残差最小性に基づく Krylov 空間法に対する可変的前処理

阿部 邦美 （理化学研究所）　　張　紹良 （東京大学大学院）
長谷川秀彦 （図書館情報大学）　　姫野龍太郎 （理化学研究所）

1　はじめに

連立一次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ を Krylov 部分空間解法によって解くとき，多くの場合，前処理が併用される．従来の方法では，まず前処理行列 K を定め，反復の過程で $K^{-1}\boldsymbol{v}$ を直接的に計算する．一方，われわれは各反復で異なった前処理を行なえる方法を提案し，GCR(m) 法に適用して効果を示した [1]．本発表では，残差最小化に基づく解法である Orthomin(m) 法，GMRES(m) 法にその前処理を適用し，効果を調べる．

2　可変的前処理

従来のように直接法で連立一次方程式 $K\boldsymbol{z} = \boldsymbol{v}$ を解く代わりに，$A\boldsymbol{z} = \boldsymbol{v}$ を反復解法で適当な所要精度を満たすように解くことによって $A^{-1}\boldsymbol{v}$ の近似を求めるのが可変的前処理である [1].

2.1　可変的前処理付き GCR (m) 法

従来の前処理付き GCR (m) 法における $K^{-1}\boldsymbol{r}$ の計算を $A^{-1}\boldsymbol{r}$ の近似を求めるように書き直せば，可変的前処理を施した GCR (m) 法のアルゴリズムとなる [1]．その GCR 法の残差ベクトル $\boldsymbol{r}_k$ について，次のような定理が成り立つ．

定理 1　$\boldsymbol{r}_k \neq \boldsymbol{0}$，かつ A が正則であるとき，$0 < \theta_k < 1$ に対して

$$\|\boldsymbol{r}_k - A\boldsymbol{z}_k\| \leq \theta_k \|\boldsymbol{r}_k\| \tag{2.1}$$

となるような $\boldsymbol{z}_k$ が存在するならば，$\|\boldsymbol{r}_{k+1}\| \leq \theta_k \|\boldsymbol{r}_k\|$ が成り立つ．　□

2.2　Orthomin(m) 法への適用

従来の前処理付き Orthomin(m) 法のアルゴリズムでは $K^{-1}\boldsymbol{r}$ を計算する部分があるため，GCR(m) 法と同様，$A^{-1}\boldsymbol{r}$ の近似を求めるように書き直せば，可変的前処理付き Orthomin(m) 法のアルゴリズムが得られる．また，Orthomin(m) 法は，GCR(m) 法と数学的に同値であるため，定理 1と同様の収束性が保証できる．そこで，可変的前処理を施した Orthomin(m) 法の効果を調べる．

2.3　内部反復

定理 1は $A\boldsymbol{z} = \boldsymbol{r}_k$ を解くときにどのような解法を適用しても収束することを保証している．そこで，[1] でも用いたように，方程式 $A\boldsymbol{z} = \boldsymbol{r}_k$ を解くために定常反復解法の SOR 法を用いる．

また，式（2.1）を $A\boldsymbol{z} = \boldsymbol{r}_k$ を解く過程（内部反復と呼ぶ）の停止条件として用いる．ただし，SOR 法を使用するので次の停止条件 1 を設定する．さらに，内部解法の反復回数が多くなると効率的ではないので，停止条件 2 も設定する．ここで，$\boldsymbol{z}_k^{(l)}$ は k 回目の外部反復における内部反復の l 回目に求められた近似解を表す．

内部反復の停止条件：

条件 1，2 のいずれか一方の条件を満たした場合に 内部反復を停止する．

1. $\|\boldsymbol{z}_k^{(l)} - \boldsymbol{z}_k^{(l-1)}\|_\infty / \|\boldsymbol{z}_k^{(l)}\|_\infty \le \delta$
2. （内部反復の反復回数 l） $= N_{\max}$ （内部反復の最大回数）

2.4　GMRES(m) 法への適用

従来の前処理付き GMRES(m) 法のアルゴリズムでは前処理のために $K^{-1}\boldsymbol{v}$ を計算するので，$A^{-1}\boldsymbol{v}$ の近似を求めるように書き直すと可変的前処理を施した GMRES(m) 法のアルゴリズムとなる．ただし，右辺項が残差ベクトルではないため，定理 1によって収束することは保証されない．しかしながら，得られたアルゴリズムは FGMRES 法 [3] とほぼ同一のものとなるので，可変的前処理を GMRES(m) 法に適用した場合の効果を調べる．ここで，内部反復では，[3] のように GMRES 法を用いて固定した回数の反復を行なうのではなく，SOR 法と 2.3小節で述べた停止条件を使用する．

3　数値実験

正方領域 $\Omega = (0,1)\times(0,1)$ で全周 Dirichlet 境界条件を課した次の 2 つ偏微分方程式の離散近似解を求める．

$$-u_{xx} - u_{yy} + \gamma(xu_x + yu_y) + \beta u = f_1(x,y), \tag{3.1}$$

$$-u_{xx} - u_{yy} + D\left\{(y-\frac{1}{2})u_x + (x-\frac{1}{3})(x-\frac{2}{3})u_y\right\} - 43\pi^2 u = f_2(x,y). \tag{3.2}$$

式（3.1）の右辺項は解 $\hat{\boldsymbol{x}} = (1,\cdots,1)$ を与えて $\boldsymbol{b} = A\hat{\boldsymbol{x}}$ とし [3]，式（3.2）の場合，厳密解 $u(x,y) = 1 + xy$ を与えて計算する [2]．これらの境界値問題に対して式（3.1），（3.2）の格子幅をそれぞれ $h = \frac{1}{201}$，$\frac{1}{129}$ とし，x, y 方向ともに等間隔で離散近似して得られた連立一次方程式を可変的前処理付き Orthomin(m)，GMRES(m)，GCR(m) 法で解く．ただし，解法のリスタート係数 m は，式（3.1）の場合は各々15, 16, 15，式（3.2）の場合は 40, 41, 40 とした．数値実験では，PC-AT 互換機（Pentium III 800MHz）において富士通 Fortran コンパイラの倍精度演算によって実行された．さらに，外部反復において，初期ベクトル $\boldsymbol{x}_0 = \boldsymbol{0}$，収束判定条件 $\epsilon_{\mathrm{TOL}} = 10^{-12}$ を採用した．

式（3.1），（3.2）のパラメータを $\gamma = 10, \beta = -100$，$Dh = 2^{-1}, 2^{-2}$ として実験した結果を Table 1 に示す．SOR 法の加速パラメータは 1.9 とし，内部反復における停止条件は式（3.1）の場合には $\delta = 10^{-1.75}$，$N_{\max} = 60$，式（3.2）の場合には $\delta = 10^{-0.95}$，$N_{\max} = 60$ を採用した．

従来の ILU(0) によって前処理した場合には停滞し，収束しなかった．

Table 1. Iterations and computation time for GMRES(m), GCR(m) and Orthomin(m) methods with the variable preconditioning.

	(3.1)		(3.2)			
	$\gamma = 10, \beta = -100$		$Dh = 2^{-1}$		$Dh = 2^{-2}$	
Methods	Iterations	Time	Iterations	Time	Iterations	Time
Orthomin (m)	20	17.3 sec	Stagnation	∞	Stagnation	∞
GMRES (m)	28	20.9 sec	114	41.0 sec	79	25.7 sec
GCR (m)	26	24.0 sec	80	36.6 sec	77	32.1 sec

参考文献

[1] 阿部邦美, 張紹良, SOR 法を用いる可変的な前処理法, 日本応用数理学会年会講演予稿集, (1999), 184-185.

[2] Joubert, W. D., Lanczos Methods for the Solution of Nonsymmetric Systems of Linear Equations, *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, **13** (1992), 926-943.

[3] Saad, Y., A Flexible Inner-outer Preconditioned GMRES Algorithm, *SIAM J. Sci. Stat. Computing*, **14** (1993), 461-469.