4K-8

柔軟な不完全LU分解前処理の有効性について

中村 貴稔[†], 野寺 隆[††]

[†] 慶應義塾大学大学院理工学研究科 [††] 慶應義塾大学理工学部

1 はじめに

GMRES 法は，大規模で疎な非対称行列を係数に持つ連立１次方程式の解法の１つである．この解法の収束を向上させる方法に，行列の前処理が有効である．不完全 LU 分解を前処理とする場合，fill-in の棄却方法によって，GMRES 法の収束に大きな違いが生まれる．即ち，柔軟な ILU 分解は，分解後の下三角行列の各列および上三角行列の各行の最大非ゼロ要素数を，計算中の各列や各行のノルムや対格要素に応じて最大非ゼロ要素数を制御する手法である．本発表では，柔軟な不完全 LU 分解に対して，fill-in の棄却方法を制御するパラメータの選択方法を提案し，その有効性を示す．

最初に ILU 分解について述べ，Crout 版の ILU 分解 [2] について考察する．次に，Flexible ILU 分解を提案し，数値実験の結果について述べ，最後に，Flexible な ILU 分解の有効性を示す．

2 不完全 LU 分解

最初に，LU 分解について簡単に述べる．LU 分解は，$n \times n$ の行列 A を，下三角行列 L と上三角行列行列 U の積に分解するものである．LU 分解を行うと，分解後の行列において，元の行列 A で要素が 0 であった所に，非ゼロ要素が入ることがある．これを fill-in が起こるという．通常 fill-in が起こることで，行列 L が密行列となることがある．

これを避けるために，LU 分解に fill-in の棄却についての条件を加えた ILU 分解が行列の前処理として利用される．ILU 分解は，行列 A を

$$A = LU + R$$

と分解することになる．ただし，R は A と ILU 分解の差を表す誤差行列である．

2.1 Crout 版の ILU 分解

次に，Crout 版の ILU 分解 (ILUC 分解) のアルゴリズムについて述べる．

［ILUC 分解］

1. $For\ k = 1 : n\ Do :$
2. $\quad Initialize\ row\ z$:
   $z_{1:k-1} = 0, z_{k:n} = a_{k,k:n}$
3. $\quad For\ \{i \mid 1 \le i \le k-1\ and\ l_{ki} \neq 0\}\ Do :$
4. $\quad\quad z_{k:n} = z_{k:n} - l_{ki} * u_{i,k:n}$
5. $\quad EndDo$
6. $\quad Initialize\ column\ w$:
   $w_{1:k} = 0, w_{k+1:n} = a_{k+1:n,k}$
7. $\quad For\ \{i \mid 1 \le i \le k-1\ and\ u_{ik} \neq 0\}\ Do :$
8. $\quad\quad w_{k+1:n} = z_{k+1:n} - u_{ik} * l_{k+1:n,i}$
9. $\quad EndDo$
10. $\quad Apply\ a\ dropping\ rule\ to\ row\ z$
11. $\quad Apply\ a\ dropping\ rule\ to\ column\ w$
12. $\quad u_{k,:} = z$
13. $\quad l_{:,k} = w/u_{k,k}, l_{kk} = 1$
14. $\quad w_i = 0$ when $|w_i| < \tau_j$
15. $EndDo$

line 10 と 11 での fill-in の棄却は，以下の 2 種類の方法で行われるとする．

1. $|u_{ij}| \le \tau_{\mathrm{f}} * \|z\| \Rightarrow u_{ij} = 0$
   または $|l_{ij}| \le \tau_{\mathrm{f}} * \|w\| \Rightarrow l_{ij} = 0$
2. 計算中の各行または各列の各要素の絶対値を取り，値の大きなものから p 個を残して棄却する

3 Flexible な ILU 分解

3.1 norm Flexible ILU 分解

ILUC 分解では，各行または各列の最大非ゼロ要素数を指定するパラメータ p の値は一定である．Zhang ら [3] は，不完全コレスキー分解において，パラメータ p の値を，下三角行列 L の計算済みの列のノルムを用いて，変更する手法を提案している．このアイディアを基に，新たに norm Flexible ILU 分解 (n-Flexible ILU 分解) を提案する．n-Flexible ILU 分解では，次のように下三角行列 L

の各列の最大非ゼロ要素数 q を決定する．

$$q = \begin{cases} \max\left(p_{\min}, p + \left[c \log_{10} \frac{\|l_j\|}{g_j}\right]\right), & (\|l_j\| < g_j) \\ \min\left(p_{\max}, p + \left[c \log_{10} \frac{\|l_j\|}{g_j}\right]\right), & (\|l_j\| \geq g_j) \end{cases}$$

ただし，p は q の基準となるパラメータで，c は q の変化の割合に関するパラメータである．また，$p_{\min}$, $p_{\max}$ もパラメータで，$p_{\min} \leq q \leq p_{\max}$ を満たす．さらに，次式が成立する．

$$g_j = \left(\sum_{k=1}^{j} \|l_k\|_2\right) \Big/ j, \quad (j = 1, \cdots, n).$$

上三角行列 U も同様にして求める．

3.2 非ゼロ要素数の比較

ILUC 分解と n-Flexible ILU 分解による下三角行列をそれぞれ L, $\tilde{L}$ とする．この時，L, $\tilde{L}$ の非ゼロ要素数は，それぞれ次式のようになる．

$$\begin{aligned} \mathrm{nnz}(L) &\approx np, \\ \mathrm{nnz}(\tilde{L}) &\approx np + \sum_{j=1}^{n} \left[c \log_{10} \frac{\|l_j\|}{g_j}\right]. \end{aligned}$$

ただし，次式が成立する．

$$\sum_{j=1}^{n} \left[c \log_{10} \frac{\|l_j\|}{g_j}\right] < 0 \Rightarrow \mathrm{nnz}(L) > \mathrm{nnz}(\tilde{L})$$

ここで，対数関数 $f(x) = \log_{10} x$ を考える．対数関数の性質: (1) $f'(x)$ が単調減少，(2) $f(1) = 0$ より次の不等式が成立する．

$$\log_{10}(1 + d) + \log_{10}(1 - d) < 0, \quad (0 < d < 1)$$

さらに，$\|l_j\|/g_j$ が 1 に関して対称な分布であると仮定すると，$\sum [c \log_{10} \|l_j\|/g_j] < 0$ となり，$\mathrm{nnz}(L) > \mathrm{nnz}(\tilde{L})$ が成立する．上三角行列 U についても同様である．

3.3 diagonal Flexible ILU 分解

diagonal Flexible ILU 分解 (d-Flexible ILU 分解) では，の代わりに対角要素によって前処理行列の最大要素数をコントロールする．すなわち，q を以下のように定める．

$$q = \begin{cases} \max\left(p_{\min}, p + \left[c \log_{10} \frac{|d_j|}{g_j}\right]\right), & (\|d_j\| < g_j) \\ \min\left(p_{\max}, p + \left[c \log_{10} \frac{|d_j|}{g_j}\right]\right), & (\|d_j\| \geq g_j) \end{cases}$$

表 1: Poisson3Db に対する数値実験の比較

前処理	P-T	I-T	Total	nz(LU)/nz
ILUC	3.460	2.510	5.970	4.449
n-Flexible	4.770	2.620	7.390	5.031
d-Flexible	3.330	2.520	5.850	4.352

ただし，次式が成立する．

$$g_j = \left(\sum_{k=1}^{j} |d_k|\right) \Big/ j, \quad (j = 1, \cdots, n).$$

d-Flexible ILU 分解では，ノルムの計算をする必要がないので，ILU 分解の計算量を減少させることができる．

4 数値実験

数値流体力学の問題から生じる行列 Poisson3Db に対して，ILUC 分解，n-Flexible ILU 分解，d-Flexible ILU 分解を行い，それぞれの分解の計算時間，GMRES 法の計算時間，合計の計算時間，行列 L と U の非ゼロ要素数を比較をした結果を表 1 に示した．ただし，パラメータは以下のように設定した．$p = 70$，$p_{\min} = 0.8p$，$p_{\max} = 1.2p$，$c = 8$．

5 おわりに

本発表では，Flexible な ILU 分解を提案し，その有効性について考察した．今後の課題は，それぞれのパラメータに対する考察，d-Flexible ILU 分解がより効果的な行列を探すことなどがあげられる．

参考文献

[1] Y. Saad, M. H Schultz, "*GMRES: A generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems,*" SIAM J. Sci. Stat. Comput., Vol. 7, pp. 856–869, 1986.

[2] N. Li, Y. Saad, E. Chow,"*Crout versions of ILU for general sparse matrices,*" SIAM J. Sci Comput., Vol. 25, pp. 716–728, 2003.

[3] Y. Zhang, T.-Z. Huang, Y.-F. Jing and L. Li, "*Flexible incomplete Cholesky factorization with multi-parameters to control the number of nonzero elements in preconditioners,*" Numer. Linear Algebr. Appl., Vol. 19, pp. 555–569, 2011.