スムージング技法を用いた疑似残差法の残差の収束性

3E－5

稲津 隆敏　野寺 隆
慶應義塾大学理工学部数理科学科

1 はじめに

本稿では、連立一次方程式

$$Ax = b$$

を一般共役勾配法の１つである疑似残差法によって解いた場合の、残差の収束性について解析する。ただし、一般共役勾配法では行列 A の正則性だけを仮定しているので、A は非対称・非正定値である。

実験的に、疑似残差法の残差のノルムは激しく振動する。よって、おのおのの収束は大変不安定である。そこで、スムージング技法を用いて残差ノルムを単調減少させることにより、残差の収束を加速化する。

2 疑似残差法

x_0を方程式の初期近似解として、次の繰り返しにより疑似残差法は定義される。

【疑似残差法】

1. $\forall x_0$ を用いて初期残差 $r_0 = Ax_0 - b$ を計算する。
2. $k \geq 0$ について、適当な行列 P_kを選び、次の計算を繰り返し行なう。

$$\begin{aligned} d_k &= P_k r_k , \\ \bar{r}_{k+1} &= A d_k + \sum_{i=1}^{\sigma} \alpha_{i,k} r_{k+1-i} , \\ r_{k+1} &= \phi_k \bar{r}_{k+1} , \\ x_{k+1} &= \phi_k (d_k + \sum_{i=1}^{\sigma} \alpha_{i,k} x_{k+1-i}) , \\ \text{ただし}\quad \alpha_{i,k} &= -\frac{r_{k+1-i}^T A r_k}{r_{k+1-i}^T r_{k+1-i}} , \\ \phi_k &= \frac{1}{\sum_{i=1}^{\sigma} \alpha_{i,k}} . \end{aligned}$$

この繰り返しは、r_{k+1} の Z－ノルム $\|r_{k+1}\|_Z = \sqrt{r_{k+1}{}^T Z r_{k+1}}$ が $\epsilon(>0)$ より小さくなったところで終了する。ただし、行列 Zは適当な正定値対称行列である。

r_kは残差、$\bar{r}_k$は疑似残差と呼ばれる。ここでは、$\|\bar{r}_k\|_Z$が最小となるよう係数$\alpha_{i,k}$ を定めているので、この方法を疑似残差法と呼んでいる。

σは一般共役勾配法のオーダーであり、σの選び方により、次の３種類に分類できる。

2.1 $\sigma = k + 1$ の場合

この方法は厳密版（exact method）と呼ばれる。それは、新たな残差がそれまでに求められた全ての残差に対し Z－直交であるからである。

厳密版は解の次元（n）回で必ず収束するが、そのためには残差を n 個記憶しておかなければならず、相当なメモリが必要となる。また計算誤差の蓄積が大きい。

2.2 $\sigma = \min(k + 1, \sigma_{\max})$ の場合

この方法は打切り版（truncated method）と呼ばれる。σ は最大 $\sigma_{\max}$ であり、$k \geq \sigma_{\max}$ において最新の$\sigma_{\max}$本の残差が新たな残差の計算に使用される。よって、厳密版に比べ必要なメモリは少なくてすむが、その反面 n 回で収束することは保証されない。計算誤差の蓄積も大きい。

2.3 $\sigma = k \bmod \sigma_{res} + 1$ の場合

この方法は再出発版（restarted method）と呼ばれる。σ は最大 σ_{res} であり、$\sigma_{res} + 1$ 回ごとに x_k から残差 r_{k+1} を

$$r_{k+1} = Ax_k - b$$

と計算し、これを新たな初期残差として繰り返しを進めていく。よって、打切り版同様メモリは少なくてすむが、$\sigma_{res} + 1$ 回ごとに新たな初期残差から出発しているので残差が収束することは保証されない。しかし、

Properties of Convergence of Psuedo Residual Methods Using Smoothing Technic
Takatoshi Inadu, Takashi Nodera
Keio University
3-14-1 Hiyoshi kōhoku, Yokohama, Kanagawa, 223 Japan

一定の周期ごとに再出発するので、計算誤差の蓄積は他の2つに比べて小さい。

3 スムージング技法の適用

疑似残差法の残差ノルム $\|r_k\|_Z$ は激しく振動する。よって、$\|r_k\|_Z$ を単調減少させ、残差ノルムの収束を加速するために、Schönauer のスムージング技法 [3, 4] を疑似残差法に適用する。

3.1 定義

前節の疑似残差法に以下の計算を加え、単調減少する新たな残差 s_k を得る。s_k のことを smoothed residual と呼び、この計算をスムージング技法と呼ぶ。

$$\begin{aligned} s_0 &= r_0 \,, \\ x_0^s &= x_0 \,, \\ s_{k+1} &= s_k + \gamma_k (r_{k+1} - s_k) \,, \\ x_{k+1}^s &= x_k^s + \gamma_k (x_{k+1} - x_k^s) \,, \\ \text{ただし} \quad \gamma_k &= -\frac{s_k^T Z (r_{k+1} - s_k)}{(r_{k+1} - s_k)^T Z (r_{k+1} - s_k)} \,. \end{aligned}$$

3.2 smoothed residual の性質

$$\begin{aligned} s_{k+1} &= s_k + \gamma_k (r_{k+1} - s_k) \\ &= \gamma r_{k+1} + (1 - \gamma) s_k \end{aligned}$$

より、

$$\begin{aligned} \|s_{k+1}\|_Z &\le \|s_k\|_Z \,, \\ \|s_{k+1}\|_Z &\le \|r_{k+1}\|_Z \,. \end{aligned}$$

よって $\|s_{k+1}\|_Z$ は単調減少し、さらに元の残差ノルムより収束が速い。

4 数値実験

$A = (a_{ij})$、$b = (b_j)$、P_k、Z を以下のように定義し、打切り版において $\sigma_{\max} = 5$ とした場合の $\|r_k\|$、$\|s_k\|$ と $\|r_0\|$ の比率を表したのが図 1 である。x 軸は反復回数、y 軸はそれぞれの比を表している。

A は 50×50 の非対称正方行列で、各行の非零要素は5個である。各行とも対角要素は必ず非零とし、他4個は乱数を用いて列番号を決定する。b_j の決定にも乱数を用い、各値は $a_{ij} = 1$ or 2、$b_j = 1$ or 2 である。行列 P_k、Z は単位行列である。

また収束を加速するため、前処理として不完全 LU 分解を用いた。

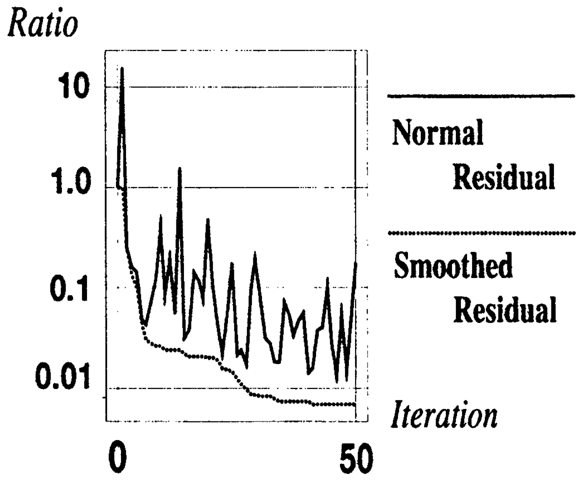

図 1 各残差の初期残差に対する比

結果を見ると、やはり単調減少する s_k の方がより収束が速いと言える。当日、より詳細な数値実験の結果を報告する。

5 まとめ

疑似残差法は疑似残差ノルムを最小にするような探索ベクトルの係数 $\alpha_{i,k}$ を求めおり、最適な方法ではない。しかしスムージング技法を適用することによって、真の残差ノルムが最小化されるので、収束は安定して速くなることが実験結果からもわかる。

参考文献

[1] R. Weiss. *Convergence Behavior of Generalized Conjugate Gradient Methods.* Doctoral Thesis, University of Karlsruhe. Interner Bericht des Rechenzentrums, 43/90, 1990.

[2] R. Weiss. *Properties of Generalized Conjugate Gradient Methods.* Numerical Linear Algebra with Applications, Vol.1(1), 45-63, 1994.

[3] W. Schönauer, E. Schnepf, H. Müller. *The FIDISOL Program Package.* Interner Bericht Nr. 27/85, Universität Karlsruhe, Rechenzentrum, 1985.

[4] W. Schönauer. *Scientific Computing on Vector Computers.* North Holland, Amsterdam, New York, Oxford, Tokyo, 1987.