2項漸化式に基づくQMR法*

1U−5

小木曽 武史　野寺 隆†
慶應義塾大学 理工学部

1 はじめに

QMR法（quasi-minimal residual method）は、非対称線形問題を解く様々な方法の中の1つである。QMR法はBCG法の問題点であったブレイクダウン(breakdown)を、Lanczos法のlook-ahead版を用いることで回避することが可能であり、さらに残差を準最小化して、なめらかな収束が得られる。

従来のQMR法は3項漸化式をベースとしていたのだが、近年2項漸化式に基づくものも開発されてきた。本報告は、2つの方法の数値結果を比較し、並列化の有効性について検証する。

2 QMR法

2.1 look-ahead

非対称Lanczos法は、以下の2式を満たすベクトル列 $\{v_1, v_2, \cdots, v_n\}, \{w_1, w_2, \cdots, w_n\}$ を形成する。

$$\begin{aligned} span\{v_1, v_2, \cdots, v_n\} &= K_n(v_1, A) \\ span\{w_1, w_2, \cdots, w_n\} &= K_n(w_1, A^T) \end{aligned} \tag{2.1}$$

$$w_j^T v_l = \begin{cases} 0 & \text{if } j \neq l \\ d_j \neq 0 & \text{if } j = l \end{cases} \tag{2.2}$$

そして $w_{n+1}{}^T v_{n+1} = 0$ が成立した時アルゴリズムが終了する。しかし、$w_{n+1}{}^T \neq 0,\ v_{n+1} \neq 0$ にもかかわらず $w_{n+1}{}^T v_{n+1} = 0$ が満たされることがあり、この状態がbreakdownである。（$w_{n+1} \not\approx 0,\ v_{n+1} \not\approx 0$ の時に $w_{n+1}{}^T v_{n+1} \approx 0$ となる状態をnear breakdownという。）この(near)breakdownを回避するための方法がlook-aheadである。具体的にはベクトルをk個のブロックに分けて(2.2)式の代わりに(2.3)式を満たすようにする。

$$W_j^T V_l = \begin{cases} 0 & \text{if } j \neq l \\ D_l \neq 0 & \text{if } j = l \end{cases} \qquad j,l = 1,2,\ldots,k \tag{2.3}$$

2.2 3項漸化式

(2.1)式の状態から v_{n+1}, w_{n+1} を生成するために以下の2つの3項漸化式を用いる。

$$\begin{aligned} \tilde{v}_{n+1} &= Av_n - \alpha_n v_n - \beta_n v_{n-1} \\ \tilde{w}_{n+1} &= A^T w_n - \alpha_n' w_n - \beta_n' w_{n-1} \\ \rho_{n+1} &= \|\tilde{v}_{n+1}\| \quad \xi_{n+1} = \|\tilde{w}_{n+1}\| \\ v_{n+1} &= \tilde{v}_{n+1}/\rho_{n+1} \quad w_{n+1} = \tilde{w}_{n+1}/\xi_{n+1} \end{aligned}$$

2.3 準最小化

vに関する3項漸化式を行列の形で表すと

$$AV^{(n)} = V^{(n+1)} H_e{}^{(n)} \tag{2.4}$$

となる。ただし、$H_e{}^{(n)}$はブロック3重対角行列である。ここで, $z \in \mathrm{C}^n, \Omega^{(n)}$; 3重対角の重み行列として、(2.4)式を利用すると残差は以下のようになる。

$$r_n = V^{(n+1)}(\Omega^{(n)})^{-1}(d^{(n)} - \Omega^{(n)} H_e{}^{(n)} z) \quad \text{with } d^{(n)} = \omega_1 \rho_0 e_1{}^{(n+1)} \tag{2.5}$$

(2.5)式における $V^{(n+1)}$はユニタリ行列ではないので、残差そのものを最小化することは $O(Nn^2)$ の計算を要し負荷がかかる。そこで、$z = z^{(n)} \in \mathrm{C}^n$を以下のように求める。

$$\left\| d^{(n)} - \Omega^{(n)} H_e{}^{(n)} z^{(n)} \right\| = \min_{z \in \mathrm{C}^n} \left\| d^{(n)} - \Omega^{(n)} H_e{}^{(n)} z \right\| \tag{2.6}$$

n回目の反復は、$x_n = x_0 + V^{(n)} z^{(n)}$の式より得られる。これが準最小化である。

2.4 2項漸化式

この方法では1つの3項漸化式を2つの2項漸化式に分割する。クリロフ部分空間に対する2つ目の基本ベクトルを $\{p_j\}_{j=1}^n, \{q_j\}_{j=1}^n$ と定義して、このP-Q列をV-W列と同様にk個のブロックに分け、次式を満たすようにする。

$$Q_j^T AP_l = \begin{cases} 0 & \text{if } j \neq l \\ E_l \neq 0 & \text{if } j = l \end{cases} \qquad j,l = 1,2,\ldots,k \tag{2.7}$$

P-Q列、及びV-W列はそれぞれ以下のような漸化式から得られる。

$$\begin{aligned} p_{n+1} &= v_{n+1} - p_n u_n \quad q_{n+1} = w_{n+1} - q_n u'_n \\ \tilde{v}_{n+1} &= Ap_n - v_n l_n \quad \tilde{w}_{n+1} = A^T q_n - w_n l_n \end{aligned}$$

*QMR Method Based On Coupled Two-term Recurrences

†Takeshi Ogiso and Takashi Nodera
Keio University,
3-14-1 Hiyoshi Kohoku Yokohama 223, JAPAN

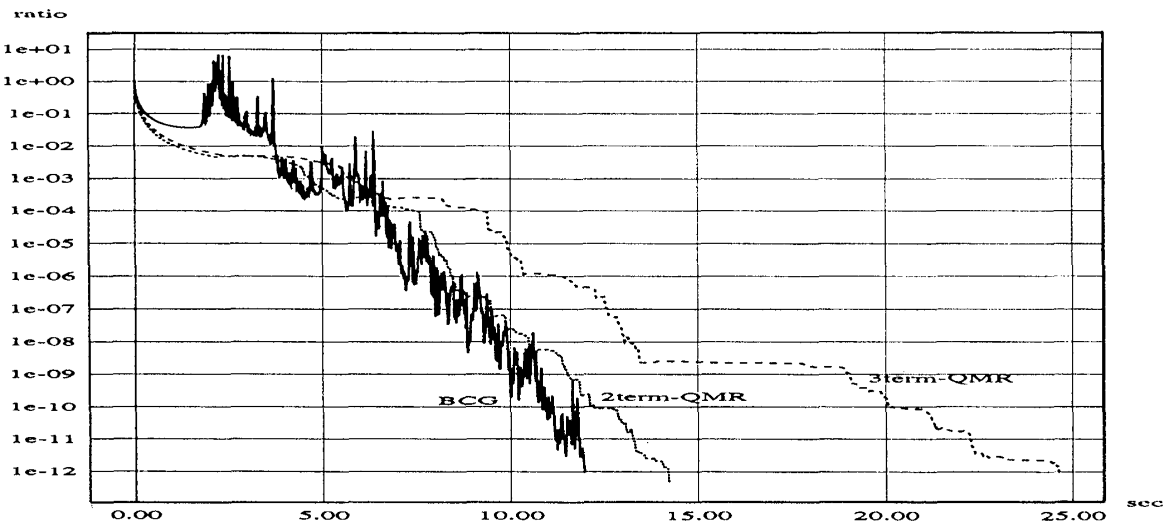

図 1: 2 項漸化式、3 項漸化式それぞれの QMR 法、及び BCG 法における収束時間の比較

vに関する 2 項漸化式を行列の形で表し $P^{(n)}$を消去すると、$AV^{(n)} = V^{(n+1)}L^{(n)}U^{(n)}$となる。ここで、$L^{(n)}$, $U^{(n)}$は各々l_n, u_nを要素に持つ行列であり、この関係式を (2.4) 式と比較すると $H_e{}^{(n)} = L^{(n)}U^{(n)}$となる。2 項漸化式で準最小化を行なう際、$y^{(n)} = U^{(n)}z^{(n)}$は

$$\left\|d^{(n)} - \Omega^{(n)}L^{(n)}y^{(n)}\right\| = \min_{y\in C^n} \left\|d^{(n)} - \Omega^{(n)}L^{(n)}y\right\| \quad (2.8)$$

で求まり、x_nは $x_n = x_0 + V^{(n)}\left(U^{(n)}\right)^{-1}y^{(n)}$より計算できる。

(2.6) 式と (2.8) 式を比較すると (2.8) 式の方が解く負担が少ない。その理由は $L^{(n)}$の方が $H_e{}^{(n)}$より非ゼロ要素の数が少ないからである。例えば、non-look-ahead の場合、$L^{(n)}$は下 2 重対角行列、$H_e{}^{(n)}$は 3 重対角行列となる。これは 2 項漸化式を用いることのメリットの 1 つである。この方法は BCG 法と似たアルゴリズムだが、このことは図 1 からも確かめられる。

3 数値実験

領域 $\Omega = [0,1] \times [0,1]$ において、2 次元楕円型偏微分方程式 $u_{xx} + u_{yy} + \sigma u_x + \tau u_y = f$に対し境界条件を $u|_{\partial\Omega} = 0$ とする。このディレクレ境界条件問題をメッシュ128×128 とした 5 点中心差分で離散化し、連立一次方程式 $Au = f$を得る。誤差も計算するため、実際には真の解を $u = (1, \cdots, 1)^T$として、右辺 fを計算した。QMR 法の初期近似解は $u_0 = 0$ とした。収束基準は $\|r_n\| / \|r_0\| < 1.0 \times 10^{-12}$とし、並列計算機 AP1000 を用いて倍精度計算を行なった。ただし今回は $\sigma = 5.0, \tau = 3.0$ とした。

3.1 実験 1

2 項漸化式、3 項漸化式それぞれに基づく QMR 法、及び BCG 法、以上 3 つの方法で収束時間を比較する。使用したセルは 64 個で、結果は図 1 に示す。

3.2 実験 2

2 種類の漸化式からなる QMR 法で、セルの数を 8, 16, 32, 64 と 2 倍に増やしながら、収束時間がどの様に変化するかを観察して並列化の台数効果を調べる。結果は表 1 に示す。

表 1: 台数効果

セルの数	収束時間 (*sec*)	
	2 項漸化式	3 項漸化式
8	115.5	182.5
16	58.1	101.9
32	28.9	45.4
64	15.0	24.0

4 まとめ

2 項漸化式の方が 3 項漸化式よりも速く収束した。σ, τの値を変えて実験をしても同じ様な結果を得ることが出来た。従って 2 項漸化式が有効であるといえる。BCG 法と 2 項漸化式の QMR 法は収束の様子が似ているが、構造上も同じ様な breakdown の問題を抱えている。実験 2 からは、およそセルの数に比例した収束時間がかかっていることから並列化の有用性が確かめられた。

参考文献

[1] R. W. FREUND AND N. M. NACHITIGAL, *QMR: A quasi-minimal residual method for non-Hermitian liner systems,* Number.Math., 60(1991), pp. 315-339.

[2] R. W. FREUND AND N. M. NACHITIGAL, *An implementation of the QMR method based on coupled two-term recurrences*, SIAM J. Sci. Comput., Vol.15, No.2, pp. 313-337, March 1994.