近似逆行列を前処理とするGMRES法について

3D−8

大高泰輔, 野寺 隆*
慶應義塾大学 理工学部

1 はじめに

GMRES法は, 大型の疎行列を係数とする連立1次方程式

$$Ax = b, \quad A: \text{大型で疎な正則行列} \quad (1)$$

の近似解 x を求めるための反復解法であり, Kryrov部分空間法の1つである. この解法は, 係数行列をArnordi過程を用いてHessenberg行列に変換し, これを係数とする連立1次方程式の近似解 x を求めていく算法であり, 反復ごとに残差ノルムを最小にする.

非定常反復における前処理は, 連立1次方程式(1)の近似解 x を効率的に求めるための技法の1つである. この技法は前処理行列 M を用いて, 式(1)を次のように変換するものである.

$$AMy = b, \quad x = My$$

ただし, この場合, 行列 M は右側前処理行列と呼ばれている. このような処理を行なうことによって, 反復法の残差ノルムの収束を加速することができる.

本発表では, 近似逆行列を前処理とするGMRES法について考察を行なうものとする.

2 近似逆行列

近似逆行列 M の最小自乗問題

$$\min \| AM - E \|_F^2 = \sum_{k=1}^{n} \min \| AM_k - e_k \|_2^2 \quad (2)$$

を考える. ただし, E は単位行列である. M の k 番目の列ベクトル M_k が, 少数の要素を持つとすると, 式(2)は n 本の最小自乗問題

$$\min \| AM_k - e_k \|, \quad k = 1, \ldots, n \quad (3)$$

に帰着できる. ただし, M_k の非ゼロの要素の行インデクスの集合を J とし, J と同じ番号を持つ列インデクス集合を I と定義する. このようにすると, 式(3)は

$$\begin{aligned} &\min \| A(I,J)M_k(J) - e_k(I) \| \\ &\quad = \min \| \hat{A}\hat{M}_k - \hat{e}_k \|, \quad k = 1, \ldots, n \quad (4) \end{aligned}$$

のように変形できる. ただし, $\hat{A} = A(I,J)$, $\hat{M}_k = M_k(J)$, $\hat{e}_k = e_k(I)$ である. この式(4)を使う目的は, 大規模な係数行列を小さな次元に落し, コンピュータの記憶容量を大幅に削減することである.

3 近似逆行列の拡張

初めに与えられた近似逆行列よりも近似精度の高い行列を求めることを考える. 新しい M_k の要素インデクス j に対して

$$\min_{\lambda} \| A(M_k + \lambda e_j) - e_k \| \quad (5)$$

という式を考えると, 近似精度を高くする新たなインデクスを捜し出すことができる. このような j のうち, 近似精度を高くするものをインデクス集合 J に加える. これを何回か繰り返すと, より近似精度の高い逆行列を見つけることができる. ただし, 1回の反復ステップにおいて1個以上のインデクスを加えると, 近似逆行列の要素数を増加させてしまう. そこで, 近似精度を高くすることができないインデクスを随時取り除いていく必要がある. このような処理を行なうことによって, 最終的に最適な近似逆行列を導くことが可能である.

近似逆行列を計算するには, QR分解やGram-Schmidt直交化を用いることができる. 次の節以降ではこの計算方法について考える.

4 完全QR分解

最小自乗問題(4)を解くための解法には様々なものがあるが, ここではQR分解を用いた解法を用いるものとする. A をQR分解すると, 式(4)を

$$\min \left\| Q \begin{pmatrix} R \\ 0 \end{pmatrix} \hat{M}_k - \hat{e}_k \right\|$$

*Department of Mathematics, Faculty of Science and Technology, Keio University, 3-14-1 Hiyoshi Kohoku Yokohama 223, Japan.

$$= \min \left\| (Y \quad Z) \begin{pmatrix} R \\ 0 \end{pmatrix} \hat{M}_k - \hat{e}_k \right\| \tag{6}$$

のように変形できる．また，この式は次のように変形できる．

$$\min \left\| \begin{pmatrix} R\hat{M}_k \\ 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} Y^T \hat{e}_k \\ Z^T \hat{e}_k \end{pmatrix} \right\| \tag{7}$$

故に，式 (3) の解 M_k は，

$$\hat{M}_k = R^{-1}(Y^T \hat{e}_k) \tag{8}$$

によって与えられる．また，残差ノルムは

$$\| AM_k - e_k \| = \| \hat{A}\hat{M}_k - \hat{e}_k \| = \| Z^T \hat{e}_k \| \tag{9}$$

として与えられる．

一方，式 (4) を解くためには，

$$Q^T \hat{e}_k = \tilde{H}_m \cdots \tilde{H}_1 \hat{e}_k \tag{10}$$

を決定する必要がある．このベクトルは，式 (10) の左から Householder 行列 $\tilde{H}_{m+1}$ を掛けることにより，全ての新しいインデクス j_{m+1} に対して拡張することができる．故に，更新された Householder 行列 $\tilde{H}_{m+1}$ による積が 1 つだけ必要になる．また，新しい最適な $\hat{M}_k$ を計算するために，上三角行列 $\tilde{R}_m$ と式 (7) の上側の部分にできる方程式を解くことになる．一方，式 (9) より，式 (7) の下側の部分のノルムをとることで，残差ノルム $\| AM_k - e_k \|$ を更新することができる．

1 回の反復において 1 個以上のインデクスを加えると，Householder 行列 $\tilde{H}_l$ が $\hat{A}_m$ と同様の疎構造を持つことが期待できる．また，$I = I_1 \cup I_2 \cup \cdots I_m$ の形式にインデクス集合 I （I_l は新しい行インデクス集合）を分解することを考える．計算コストは高いが，$J_j = J \cup j$ を用いることにより，式 (5) よりも厳密な

$$\min_{M_k(J_j)} \| A(:, J_j) M_k(J_j) - e_k \| \tag{11}$$

を考えることで，次の列のインデクス j_l を導くことができる．

同様に，Householder 行列の代わりに Givens 行列などを用いることもできるが，計算スピードや計算精度は失われてしまう．このような欠点を補うために，Gram-Schmidt の直交化を用いることになる．

5 Gram-Schmidt 直交化

更新された列 Ae_j をすでに直交化されている全ての列に対して直交化する．次の列のインデクス j_l に関係した I_l を用いて，再びインデクス集合 I を $I = I_1 \cup \cdots \cup I_m$ という形式に表す．このとき QR 分解は，

$$\hat{A} = Q \begin{pmatrix} R \\ 0 \end{pmatrix} = (Y \quad Z) \begin{pmatrix} R \\ 0 \end{pmatrix} = YR$$

という形式に記述できる．このとき，更新された列の直交化は

$$r_j = Y^T(\hat{A}\hat{e}_j), \quad q_j = \hat{A}\hat{e}_j - Yr_j,$$
$$r_{jj} = \| q_j \|, \quad q_j = q_j / r_{jj}$$

によって計算できる．拡張された行列 R は

$$\left(\begin{array}{c|c} R_{j-1} & r_j \\ \hline 0 & r_{jj} \end{array} \right)$$

によって与えられる．また，新しい行列 Y は，ベクトル q_j から生成され，式 (9) の $\hat{A}$ と同様の疎構造を持つことになる．すなわち，A が疎構造を持つときに，近似逆行列も同様の疎構造を持つことが可能となり，記憶容量の削減や計算時間の短縮が期待できる．

6 おわりに

最適な近似逆行列 M を求めることは，大規模な連立 1 次方程式の近似解を求めるのに有効である．この手法は，従来の前処理技法と比べ残差ノルムの収束を加速することができる．当日，前処理なしの GMRES 法と近似逆行列を前処理とする GMRES 法の比較をした数値実験について報告する．

参考文献

[1] O. Axelsson; *Iterative Solution Methods.* Cambridge University Press, Cambridge, 1994.

[2] R. Barrett, M. Berry, T. Chan, J. Demmel, J. Danato, J. Dongarra, V. Eijkhout, R. Pozo, C. Romine and H. van der Vorst; *Templates for the Solution of Linear Systems: Building Blocks for Iterrative Methods.* SIAM, Philadelphia, 1994.

[3] N. I. M. Gould and J. A. Scott; On approximate-inverse preconditioners. *Technical Report RAL 95-026, Rutherford Appleton Laboratory, Chilton, UK,* 1995.

[4] M. Grote and T. Huckle; Parallel preconditioning with sparse approximate inverses. *SIAM J. Sci. Comput.,* 18(3), 838-853, 1997.

[5] M. Grote and T. Huckle; Effective parallel preconditioning with sparse approximate inverses. In *D. H. Bailey, editor, Proceedings of the Seventh SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing, SIAM,* pages 466-471, Philadelphia PA, 1995.