6H-07

近似逆行列を前処理とするGMRES(k)法

佐藤 拓郎　野寺 隆

慶應義塾大学理工学部数理科学科

1　要旨

CG法を始めGMRES法，Bi-CGSTAB法などに代表される反復法は，ときとしてその収束がひどく停滞してしまう場合があり，そのような場面では，前処理を行なうことで収束が改善される場合がある．本稿では，前処理行列として係数行列の近似逆行列を用いる方法について述べる．

2　はじめに

理工学におけるさまざまな現象を数値的にシュミレーションすることは，偏微分方程式を有限差分法や有限要素法といった手法で離散近似することにより得られる連立1次方程式

$$Ax = b \tag{1}$$

を解くことに帰着される．ただし，行列Aは大型で疎な正則行列とする．係数行列Aの次元が小さい場合には直接法が有効であるのだが，問題が大型になる場合には直接法が有効でないこともあり，反復法が用いられることもある．

しかし，反復法の収束性は対象とする係数行列の特性に依存し，停滞してしまう場合もある．そこで前処理を用い，連立1次方程式の解は変えないが係数行列の特性をより良いものに変換するという試みが行なわれている．

本稿の構成は以下の通りである．第3節では，非定常的反復法の1つであるGMRES法とGMRES(k)法について述べる．第4節では，前処理として用いる近似逆行列の構成について述べる．

3　GMRES(k)法

GMRES法では，クリロフ部分空間上にn次の正規直交系をアーノルディ原理を適用して生成し，この部分空間上で残差ノルムの最小2乗問題を解き近似解を更新する．

残差r_nは次の最小条件から決まる．

$$\min_{z \in K_n} \|b - A(x_0 + z)\| = \min_{z \in K_n} \|r_0 - Az\|$$

ここで，アーノルディ原理によってK_nの正規直交系$V_n = (v_1, v_2, ..., v_n)$が生成される．このとき，この最小問題は次の$n$次元関数の最小2乗問題に帰着される．

$$J_n(y) \quad = \quad \|\beta e_1 - \bar{H}_n y\| \tag{2}$$

ただし$\beta = \|r_0\|$であり，$\bar{H}$はヘッセンベルグ行列である．GMRES法は，前に計算された全ての直交するベクトル列を保持しておかねばならず，反復ごとに計算量と記憶容量が増加してしまう．この理由で，通常はリスタート版GMRES(k)法が使われている．

4　近似逆行列による前処理

4.1　前処理

反復法の収束を良いものにするために，連立1次方程式(1)を

$$M_1 A y = M_1 b \tag{3}$$

もしくは

$$\begin{cases} AM_2 y = b \\ x = M_2 y \end{cases} \tag{4}$$

と変換してから反復法を適用することがある．M_1とM_2は，各々左前処理行列，右前処理行列と呼ばれる．ここで，M_1及びM_2はA^{-1}を近似している．前処理の目的は，(3)及び(4)が(1)よりも少ない反復回数と計算時間で解けることである．

前処理行列を構成する場面では，(i)Aを近似するようなM^{-1}を見つけてその逆行列を前処理行列とす

るか，(ii) あるいは Mを乗算するだけでいいように A^{-1}を近似する Mを見つけるかという，大きく分けて 2 つの方法がある．

4.2 近似逆行列の構成

この節では，A^{-1}を近似するような前処理行列 M を見つけることを考える．このような近似逆行列を求めるための方法として，本稿では次のような方法を考える．

2 つのベクトル集合 $\{z_i\}_{i=1}^{n}$及び $\{w_i\}_{i=1}^{n}$が，次の条件を満たすものとする．

$$w_i^T A z_j = 0, \quad if \quad i \neq j$$

これを A-双直交と呼ぶことにする．ここで，$\{z_i\}_{i=1}^{n}$ 及び $\{w_i\}_{i=1}^{n}$を列ベクトルとするような行列 Z及び Wを考えれば，

$$W^T A Z = D = \begin{pmatrix} p_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & p_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & p_n \end{pmatrix}$$

という式を導くことができる．ただし，

$$p_i = w_i^T A z_i \neq 0.$$

これにより，

$$A^{-1} = Z D^{-1} W^T = \sum_{i=1}^{n} \frac{z_i w_i^T}{p_i} \tag{5}$$

となり，2 つのベクトル集合が決まれば，A^{-1}を求めることができる．

Z及び Wは一意ではないのだが，ここでは 2 つの任意の行列 $Z^{(0)}$及び $W^{(0)}$に対して図 1 に示した双直交過程をかけることで，2 つの A-双直交な列を持つ行列を構成する．また，a_i^T及び c_i^Tはそれぞれ行列 A 及び A^Tの i 番目の行とする．

5 おわりに

GMRES(k) 法に対し近似逆行列による前処理を適用し，数値実験を行なう．特に GMRES(k) 法の収束が停滞するような場合には前節で述べた前処理が有効なものとなる．具体的な数値実験の結果については発表時に述べるものとする．

choose $w_i^{(0)}, z_i^{(0)} \quad (1 \leq i \leq n)$
for $i = 1$ **to** n **do**
  for $j = i$ **to** n **do**
    $p_j^{(i-1)} := a_i^T z_j^{(i-1)}, \quad q_j^{(i-1)} := c_i^T w_j^{(i-1)}$
  enddo
  if $i \neq n$ **then**
    for $j = i+1$ **to** n **do**
      $z_j^{(i)} := z_j^{(i-1)} - (\frac{p_j^{(i-1)}}{p_i^{(i-1)}}) z_i^{(i-1)},$
      $w_j^{(i)} := w_j^{(i-1)} - (\frac{q_j^{(i-1)}}{q_i^{(i-1)}}) w_i^{(i-1)}$
    enddo
  else
    $Z = [z_1^{(0)}, z_2^{(1)}, ..., z_n^{(n-1)}],$
    $W = [w_1^{(0)}, w_2^{(1)}, ..., w_n^{(n-1)}],$
    $$D = \begin{pmatrix} p_1^{(0)} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & p_2^{(1)} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & p_n^{(n-1)} \end{pmatrix}.$$
  endif
enddo

図 1: 双直交過程

参考文献

[1] M. Benzi and M. Tùma: A Sparse Approximate Inverse Preconditioner for Nonsymmetric Linear Systems, *SIAM J. Sci. Comput.*, Vol.19, No. 3, pp. 968–994 (1998).

[2] M. Benzi and M. Tùma: Numerical Experiments with Two Approximate Inverse Precontitioners, *BIT*, Vol.38, No. 2, pp. 234–241 (1998).

[3] M. Benzi, C.D.Meyer, and M. Tùma: A Sparse Approximate Inverse Preconditioner for the Conjugate Gradient Method, *SIAM J. Sci. Comput.*, Vol.17, No. 5, pp. 1135–1149 (1996).

[4] T. K. Hucle: Efficient Computation of Sparce Approximate Inverses, *Numerical Linear Algebra with Applications*, Vol.5, pp. 57–71 (1998).