対角閾値を用いたGMRES法

渡辺智敦 [*]　野寺 隆 [†]

1 はじめに

今日，物理現象や確率論，金融商品の変動など様々な分野で偏微分方程式が使われているが一般に偏微分方程式は解析的に解くことができない問題が多い．そこで数値シミュレーションにより近似解を得ることになる．すなわち有限差分法や有限要素法などにより偏微分方程式の離散化を行い，以下のような大型で疎な行列を係数に持つ連立1次方程式

$$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \tag{1}$$

を解くことになる．この方程式の解法は様々な方法が考えられているが，係数行列 A が対称行列のときには CG 法が最も有効であると言われている．一方係数行列 A が非対称のときは最適な方法は未だ示されておらず，今日も研究が続けられており，GMRES 法も有効な算法の1つとしてある．GMRES 法は反復を繰り返す度に記憶領域が大量に必要となり，計算時間もかかるため，通常は m 回反復したところで初期近似解と残差ベクトルを更新する GMRES(m) 法を用いる．また GMRES 法などの反復法は行列の前処理によりその収束性が高まることが知られている．行列の前処理とは式 (1) の両辺に行列 A の近似逆行列を掛けることにより係数行列を単位行列 I に近づけた後に反復法を行う方法である．これにより行列の解きにくさの指標となる条件数 $(\mathrm{cond}(A) = \|A\|\,\|A^{-1}\|)$ が減り収束性が高まるわけである．前処理行列により収束性が大きく変わるので，その生成方法が重要になってくる．本稿では前処理行列を対角閾値を伴う独立集合によるオーダリングで作成することを試みた．それにより係数行列 A の対角成分に 0 や非常に小さな値がある問題に対しても頑強な解法が得られた．

2 GMRES(m) 法

GMRES(m) 法は連立1次方程式を解くクリロフ部分空間法の1つである．クリロフ部分空間法とは，初期近似解を $\boldsymbol{x_0}$，初期残差ベクトルを $\boldsymbol{r_0}(= \boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x_0})$ としたとき $\boldsymbol{r_0}$ より形成されるクリロフ部分空間 $K_i(A, \boldsymbol{r_0}) = \mathrm{Span}\{\boldsymbol{r_0}, A\boldsymbol{r_0}, A^2\boldsymbol{r_0}, \cdots, A^{i-1}\boldsymbol{r_0}\}$ から近似解 $\boldsymbol{x_i}$ を次の条件を満たすように作る方法である．

$$\boldsymbol{x_i} = \boldsymbol{x_0} + \boldsymbol{z_i}, \quad \boldsymbol{z_i} \in K_i(A, \boldsymbol{r_0}) \tag{2}$$

GMRES(m) 法では，残差 $\boldsymbol{r_i}$ のノルムが最小になるように $\boldsymbol{z_i}$ を選ぶ．すなわち $\boldsymbol{z_i}$ は

$$\min_{\boldsymbol{z_i} \in K_1} \|\boldsymbol{b} - A(\boldsymbol{x_0} + \boldsymbol{z_i})\|_2 = \min_{\boldsymbol{z_i} \in K_1} \|\boldsymbol{r}_0 - A\boldsymbol{z_i}\|_2 \tag{3}$$

で決定される．ここで $\boldsymbol{z_i}$ をクリロフ部分空間 $K_i(A, \boldsymbol{r_0})$ 上の正規直交ベクトル列 $V_i = \{\boldsymbol{v_1}, \boldsymbol{v_2}, \cdots, \boldsymbol{v_i}\}$ によって $\boldsymbol{z_i} = V_i\boldsymbol{y}$ と表現することにする．正規直交系 V_i はアーノルディ原理により生成され，またこのとき得られる上ヘッセンベルグ行列を H_i^* とする．ここで $\boldsymbol{y}$ はその反復での残差ノルムを最小にするように選ぶことになる．つまり，GMRES(m) 法は次の最小2乗問題の近似解を求めることに帰着される．

$$\begin{aligned} J(\boldsymbol{y}) &= \|\gamma\boldsymbol{v_1} - AV_i\boldsymbol{y}\|_2 && (4)\\ &= \|V_{i+1}(\gamma\boldsymbol{e_1} - H_i^*\boldsymbol{y})\|_2 && (5)\\ &= \|\gamma\boldsymbol{e_1} - H_i^*\boldsymbol{y}\|_2 && (6) \end{aligned}$$

ただし，$\gamma = \|\boldsymbol{r_0}\|_2$ とする．このようにして得られた $\boldsymbol{y}$ を用いて第 i 回目の近似解は，式 (2) より $\boldsymbol{x_i} = \boldsymbol{x_0} + V_i\boldsymbol{y}$ で求められる．また，GMRES(m) 法は上記の方法において正規直交ベクトルの数を m 本に制限することで，計算量や記憶容量を減少させる方法である．反復回数が m を超える時には m 回ごとに $\boldsymbol{x_m}$ を $\boldsymbol{x_0}$ としてリスタートを行う．

3 近似逆行列による左前処理

式 (1) の両辺に係数行列の近似逆行列 M をかけて得られた

$$MA\boldsymbol{x} = M\boldsymbol{b} \tag{7}$$

を考える．このとき $MA \approx I$ となり，式 (1) よりも式 (7) を解くほうが早い収束で解を得ることができる．このことが前処理を行う利点である．次に近似逆行列の作成方法について述べる．

*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

3.1　近似逆行列

係数行列 A にある置換を施して以下の形にする．

$$PAP^T = \begin{pmatrix} D & F \\ E & C \end{pmatrix} \tag{8}$$

だたし，D は対角行列とする．ここで，$D = \mathrm{diag}[d_1, d_2, \cdots, d_l]$ である．この置換の方法は後述する独立集合によるオーダリングを用いている．$\bar{A} = PAP^T$，$\bar{\boldsymbol{b}} = P\boldsymbol{b}P^T$ とすると

$$\bar{A}\boldsymbol{x} = \bar{\boldsymbol{b}} \tag{9}$$

を解くことになる．式 (8) はさらに

$$\bar{A} = \begin{pmatrix} I & 0 \\ ED^{-1} & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} D & F \\ 0 & A_1 \end{pmatrix} \tag{10}$$

とブロック 3 角行列に分解される．ただし $A_1 = C - ED^{-1}F$ である．よって

$$\bar{A}^{-1} = \begin{pmatrix} D^{-1} & -D^{-1}FA_1^{-1} \\ 0 & A_1^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I & 0 \\ -ED^{-1} & I \end{pmatrix} \tag{11}$$

ここで，D は対角行列なので

$$D^{-1} = \mathrm{diag}[d_1^{-1}, d_2^{-1}, \cdots, d_l^{-1}] \tag{12}$$

となる．また，A_1^{-1} を求めるのは一般に困難であるが前処理行列としては近似逆行列が得られればよいので，ここでは簡単に $A_1^{-1} = I$ と置くことにする．以上により得られた行列を近似逆行列 M とする．

$$M = \begin{pmatrix} D^{-1} & -D^{-1}F \\ 0 & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I & 0 \\ -ED^{-1} & I \end{pmatrix} \tag{13}$$

3.2　独立集合によるオーダリング

互いに方程式で結ばれていない未知数の集合を独立集合という [3]．独立集合に属する未知数が上に来るように行に関して置換を行い，同時に対応する列に関しても置換を行うと係数行列が式 (8) のように変形される．この方法を独立集合によるオーダリングという．なお，本稿では独立集合を求める方法として Greedy の算法 [2] を利用した．

3.3　対角閾値

前処理行列を構成する際に D^{-1} が必要となるが，今 D の成分に非常に小さな値があると D^{-1} は式 (12) より，その逆数を成分に持つため解が不安定になる．そこで対角閾値 ε を用いて，$|a_{ii}| < \varepsilon$ なる i は独立集合に入らないよう Greedy の算法を改良した．これにより対角成分に非常に小さな値がある問題に対しても頑強な解法となった．表 1 に対角閾値付き Greedy の算法を記すことにする．ここで S は独立集合であり S^c には S の元と従属か対角成分が ε 未満のものが入る．

表 1: 対角閾値付き Greedy の算法

set $S = 0$ and select a threshold tolerance ε
for $j = 1, 2, \cdots, n$ **do**
　if node j is not marked
　　and $|a_{j,j}| > \varepsilon$ then
　　$S = S \cup \{j\}$
　　mark node j,
　　　and mark all its nearest neighbors
　else
　　if it isn't marked
　　　then mark node j and add it to S^c
　　endif
　endif
enddo

4　おわりに

以上の方法で生成した近似逆行列を用いて行列の前処理をし，GMRES(m) 法で解を求める．当日，このような方法で行った数値実験の結果を報告し，その有効性について述べる．また今後の課題としては A_1^{-1} を簡単に I と置くだけでなくなんらかの方法で近似することにより，より有効な前処理行列を生成することである．

参考文献

[1] Y. Saad and J. Zhang: Diagonal Threshold Techniques in Robust Multi-level ILU Preconditioners for General Sparse Linear Systems, *Numer. Linear Algebra Appl.*, 6, pp. 257–280 (1999).

[2] Y. Saad.: Iterative Methods for Sparse Linear Systems. *PWS Publishing Co.*, Boston, 1996.

[3] J. A. George and J. W. Liu, *: Computer Solution of Large Sparse Positive Definite Systems.*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1981.