

## ウェーブレット変換による近似逆行列の計算

山中 英樹<sup>†</sup> 野寺 隆<sup>††</sup>

科学技術計算では大型で疎な係数行列を持つ連立1次方程式の問題を数値的に解析し、その近似解を求める問題になることが多い。大規模な連立1次方程式を解く手法として GMRES 法のような反復法を用いることがある。一般的に反復法は行列の前処理を施し収束を改善することが多い。その前処理の1つにウェーブレット変換を利用した近似逆行列がある。本発表では前処理行列を計算するフロベニウスノルム利用したウェーブレット近似逆行列を構成する手法や、その有効性について述べる。

### Approximate Inverse of using Wavelet Transformation

HIDEKI YAMANAKA<sup>†</sup> and TAKASHI NODERA<sup>††</sup>

It is very extremely to analyze the problems of large linear systems of equations with sparse matrices in term of scientific computing and find the approximate solutions. The iterations of GMRES method are used for solving linear systems of equations. In general, preconditionings are used to get approximate solutions more quickly. We investigate different algorithms for computing a sparse approximate inverse  $M$  for a given sparse matrix  $A$  by minimizing  $\|AM - I\|$  in the Frobenius norm. In this paper, we survey that the method of generating approximate inverse preconditioner with wavelet transformation.

#### 1. はじめに

様々な物理現象を解明する際、偏微分方程式の境界値問題を扱うことになる。このような問題は有限差分法や有限要素法を用いて離散近似を行うことで次の連立1次方程式が得られる。

$$Ax = b, \quad A \in R^{n \times n}, \quad x, b \in R^n. \quad (1)$$

ただし、 $A$ は大規模で疎な係数行列である。また、 $b$ は右辺ベクトル、 $x$ は解ベクトルである。また、係数行列 $A$ は大規模かつ疎であるため、直接法よりもある初期値から近似解を求める反復法が一般に有効であり、その反復法としてクリロフ部分空間法がある<sup>1),15)</sup>。今回クリロフ部分空間法に属する GMRES 法<sup>16)</sup>を利用する。GMRES 法(一般化最小残差法)だけの反復では、残差ノルムがゼロに収束するまで時間がかかる。反復法の収束を改善するために、行列の前処理<sup>1),14),15)</sup>を利用する場合がある。行列の前処理はもともとの連立1次方程式を変形することで収束までに必要な反復回数を減少させ、計算時間を短縮させる。本稿では行列の前処理として近似逆行列<sup>2),4),6),8)~12)</sup>を利用し、その性質を改良するためにウェーブレット変換 citeco-

- |     |   |
|-----|---|
| 1.  | choose $x_0$                                      |
| 2.  | $r_0 = b - Ax_0$                                  |
| 3.  | $v_1 = r_0 / \ r_0\ $                             |
| 4.  | for $n = 1, 2, \dots, k, \dots$ do                |
| 5.  | $h_{i,j} = (Av_j, v_j), \quad i = 1, 2, \dots, n$ |
| 6.  | $\hat{v}_{j+1} = Av_j - \sum_{i=1}^j h_{i,j} v_i$ |
| 7.  | $h_{j+1,j} = \ \hat{v}_{j+1}\ $                   |
| 8.  | $v_{j+1} = \hat{v}_{j+1} / h_{j+1,j}$             |
| 9.  | end   |
| 10. | $x_k = x_0 + V_k y_k, \quad y_k$ minimize         |

図1 GMRES 法

hen, daubechies, stuart, texdoc を用いる。最初に2章において GMRES 法について述べる。次に、3章で行列の前処理について述べ、4章ではウェーブレット変換について述べる。さらに、5章ではウェーブレットを用いた近似逆行列の構成法について述べる。

#### 2. GMRES 法

GMRES 法とはクリロフ部分空間法に属する反復法である。クリロフ部分空間とは

$$K_n \equiv \text{span}\{r_0, Ar_0, \dots, A^{n-1}r_0\} \quad (2)$$

となる空間である。 $r_0$ は初期残差ベクトルであり、初期近似解を  $x_0$  とすると  $r_0 = b - Ax_0$  となる。また、正規直交ベクトルを  $v$  をし、 $v_1 = r_0 / \|r_0\|$  とする。

<sup>†</sup> 慶應義塾大学大学院理工学研究科, Graduate School of Science and Technology, Keio University

<sup>††</sup> 慶應義塾大学理工学部, Faculty of Science and Technology, Keio University



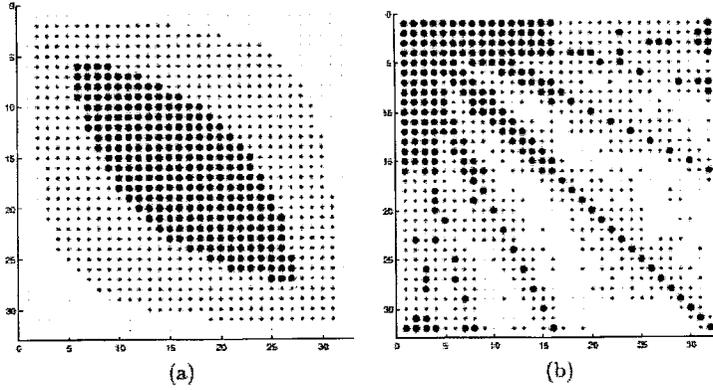


図 2 (a) 離散化した laplace 演算子 ( $n = 32$ ) とその逆行列. (b) Daubechies 4 ウェーブレット基底に変換した行列とその逆行列

- |   |
|---|
| <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Compute <math>\tilde{A}W^TAW, \tilde{b} = W^Tb</math></li> <li>2. Compute <math>\tilde{M}</math>, a right sparse approximate inverse of <math>\tilde{A}</math></li> <li>3. Solve <math>\tilde{A}\tilde{M}\tilde{y} = \tilde{b}</math></li> <li>4. Compute <math>x = W\tilde{M}\tilde{y}</math></li> </ol> |
|---|

図 3 算法 1: 両側変換行列による算法

疎行列なる可能性を持っている. 式 (9) のウェーブレット変換行列  $W$  を用いて連立 1 次方程式  $Ax = b$  を変形する.  $\tilde{A} = W^TAW$ ,  $\tilde{x} = W^Tx$ ,  $\tilde{b} = W^Tb$  とすると

$$\tilde{A}\tilde{x} = \tilde{b}. \quad (11)$$

ただし,  $\tilde{A}^{-1} = W^TA^{-1}W = (W^TAW)^{-1} = \tilde{A}^{-1}$  となるので,  $\tilde{M}$  は  $\tilde{A}$  の近似逆行列になる. 従って, 算法は図 3 のようになる.  $\tilde{M}$  を求めるためにウェーブレット変換行列を  $W$  とすると  $\tilde{A} = W^TAW$  のように  $A$  を両辺からウェーブレット変換行列  $W$  で圧縮することにより,  $\tilde{A}$  が求められる. これにより, finger パターンが形成される. 一般に  $A$  の近似逆行列  $M$  を求めるには  $\|AM - I\|_F$  というフロベニウスノルムを最小化することになるので  $AM$  を  $\tilde{A}\tilde{M}$  に入れ替えることで

$$\|\tilde{A}\tilde{M} - I\|_F. \quad (12)$$

に変形できる. これをさまざまな解法で最小化することにより近似逆行列  $\tilde{M}$  が求まることになる.

### 6. 片側変換行列による解法

式 (12) に対して, 次のような行列変換を考えることができる.

- |   |
|---|
| <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Compute <math>\hat{M}</math>, the minimizer of <math>\ A\hat{M} - W\ _F</math> subject to the prescribed sparsity pattern for <math>\hat{M}</math>.</li> <li>2. Solve <math>W^T A\hat{M}\hat{y} = W^T\tilde{b}</math></li> <li>3. Compute <math>x = W\hat{M}\hat{y}</math></li> </ol> |
|---|

図 4 算法 2: 片側変換行列を用いた算法

$$\begin{aligned} \|\tilde{A}\tilde{M} - I\|_F &= \|W^TAWW^T\tilde{M}W - I\|_F \\ &= \|W^TAMW - I\|_F \\ &= \|WW^TAMW - W\|_F \\ &= \|A\hat{M} - W\|_F. \end{aligned}$$

ただし,  $\tilde{M} = W^T\tilde{M}W$  であり,  $\hat{M} = MW = W\tilde{M}$  である. もちろん,  $\hat{M}$  の行列要素は疎なパターンを持つ. よって,  $\|A\hat{M} - W\|_F$  を最小化することは,  $n$  個の独立した  $\|AM - I\|_F$  を最小化することと同じ問題になり, 図 4 の算法を構成することができる. ここで,  $\hat{M}$  は, 近似逆行列  $A^{-1}$  であり, 標準的なウェーブレット基底から構成できる. Haukins ら<sup>7)</sup> によれば, 片側変換行列による finger パターンは図 5 のようになることが示されている.

### 7. 近似逆行列の計算方法

3 章の行列の前処理の所でも述べたが, 疎な近似逆行列  $M$  は, 次の最小化問題の解を計算すればよい.

$$\min \|AM - I\|_F^2 \quad (13)$$

ただし, 行列  $M$  は疎行列となるように, 要素の数と位置に制限がある. フロベニウスノルムは特に並列計算に対して利用価値が高い. よって, 式 (8) を解くことは,  $n$  個の独立な最小二乗問題を解くことに帰着すること

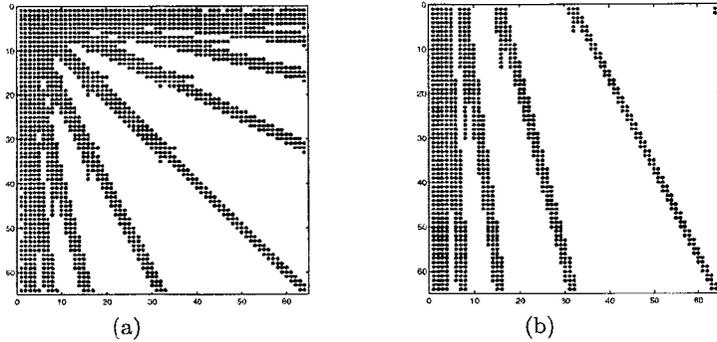


図5 (a) finger パターン. (b) 片側変換行列による finger パターン

ができる。もちろん、この計算は並列に行うことができる。フロベニウスノルムに関する別のアプローチとして、Kolotilina ら<sup>10)</sup>による重みつきフロベニウスノルムを利用する方法もある。本稿では、基本的にフロベニウスノルムの最小化によるアプローチを取るものとする。

実際の計算では、式(8)の近似解を探し求めることが望ましい。しかし、次の2つの困難な問題がある。

- (1) どのように疎な近似逆行列の要素パターンの決定するのか
- (2) 式(8)の近似解を効果的に求める算法を決定するのか

近年、近似逆行列の計算には、いくつかの方法が提案されている。もっとも簡単な方法は、正規方程式を作成し、行列の要素を疎なモードで反復して解いていけばよい。また、Grote ら<sup>6)</sup>は、式(13)をQR分解を用いて解く算法を提案している。この方法は一見コスト高に思われるが、 $m_j$ が疎であれば、QRFのコストはかなり減少する。さらに、非ゼロ要素の場所を適応的に決定する算法を利用することもできる。ウェーブレット変換を利用すると元の行列がfingerパターンを構成する疎行列になるので、QR分解による近似逆行列の構成はかなり有利な算法であるといえる。

式(8)の近似解を計算するもう一つの方法は、標準的な反復法(例えば、MR法、GMRES法、newton法など)を使用することである<sup>(4),(6),(9)</sup>。この場合に、要素のfill-inの量をコントロールするために、 $m_j$ にドロッピングを行うことになる。通常、よく利用される算法としてMR(最小残差)法がある。もちろん、この算法は式(7)を解くための解法であり、 $n$ 個の線形方程式

$$Am_j = e_j, \quad j = 1, 2, \dots, n,$$

を解く事になる。ただし、 $m_j$ は行列 $M$ の第 $j$ 列目、 $e_j$ は行列 $I$ の第 $j$ 列目を示す。これは、降下法に基づく算法を数ステップ行う事により求める算法である。

```

01:  M := M0
02:  for each column j := 1 to n do
03:    begin
04:      mj = Mej;
05:      for i = 1 to τ;
06:        rj := ej - Amj;
07:        αj := (rj, Arj) / (Arj, Arj);
08:        mj := mj + αjrj;
09:        apply dropping to mj;
10:      end
11:    end

```

図6 MR法の算法

降下法の $k$ 回目の反復における $m_j$ は、次のようになる。通常、閾値は小さな値を取る。

$$m_j = m_j + \alpha r_j \quad (14)$$

ただし、 $\alpha$ は降下法におけるパラメータで $\alpha = (r_j, Ar_j) / (Ar_j, Ar_j)$ である。ここで、 $r_j$ は、式(7)から得られる次の最小2乗問題の残差ベクトル $r_j = e_j - Am_j$ である。

$$\min_{m_j} \| e_j - Am_j \|^2 \quad (15)$$

ここで、ステップ数を $\tau$ とした時のMR法の算法は、図6のようになる。

次に、newton法による近似逆行列の計算方法について述べる。今、Newton法の $l$ 回目の反復時について考える。このとき、係数行列 $A$ に対する近似逆行列を $M_l$ とすると、 $M_l$ に対するNewton法は

$$M_{l+1} = M_l(2I - AM_l) \quad (16)$$

と記述できる<sup>(13),(17)</sup>。このNewton法が収束するには、行列 $2I - AM_0$ のスペクトル半径 $\rho(2I - AM_0)$ が

$$\rho(2I - AM_0) < 1$$

である必要がある<sup>(4)</sup>。このスペクトル半径は、初期値 $M_0$ によって左右されるので、初期値を適切に選択することは非常に重要である。newton法による反復を

繰り返すと、反復が進むにつれ、 $M$  はますます密行列となるので、newton 反復がコスト高になり、行列の疎性を保つために要素のドロップングを行なう必要がある。近年、Moriya ら<sup>11)</sup> は、近似逆行列の効果的な計算方法を提案している。これらの算法に関する詳細は、研究会当日に報告する。

### 参 考 文 献

- 1) Bru, R., Credán, J., Marín, J., and Mas, J.: "Preconditioning sparse nonsymmetric linear systems with the Sherman-Morrison formula," *SIAM J. Sci. Comput.*, Vol. 25, pp. 701–715, 2003.
- 2) Bruaset, A. M., "A survey of preconditioned iterative methods," Pitman Research Note in Mathematics, No. 32, Longman Scientific & Technical, U.K., 1995.
- 3) Cohen, A. and Masson, R.: "Wavelet method for second-order elliptic problems, preconditioning, and adaptivity," *SIAM J. Sci. Comput.*, Vol. 21, No. 3, pp. 1006–1026, 1999.
- 4) Chow, E. and Saad, Y.: "Approximate inverse preconditioners via sparse-sparse iterations," *SIAM J. Sci. Comput.*, Vol. 19, pp. 995–1023, 1998.
- 5) Daubechies, I.: "Orthonormal base of compactly supported wavelets," *Comm. Pure Appl. Math.*, pp. 909–996, 1998.
- 6) Grote, M. and Huckel, T.: "Parallel preconditioning with sparse approximate inverses," *SIAM Journal on Scientific Computing*, Vol. 18, pp. 838–853, 1997.
- 7) Hawkins, S. C. and Chen, K.: "An implicit waveret sparse approximate inverse preconditioner," *SIAM J. Sci. Comput.*, Vol. 27, No. 2, pp. 667–686, 2005.
- 8) Huckel, T.: "Efficient computation of sparse approximate inverse," *Numer. Linear Algebra Appl.*, Vol. 5, pp. 57–71, 1998.
- 9) Huckel, T.: "Approximate sparsity patterns for the inverse of a matrix and preconditioning," *Appl. Numer. Math.*, Vol. 30, pp. 291–303, 1999.
- 10) Kolotilina, L. and Yermin, A.: "Factorized sparse approximate inverse preconditionings I theory," *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, Vol. 14, pp. 45–58, 1993.
- 11) Moriya, K. and Nodera, T.: "Computing the preconditioner for Schur complement," *ANZIAM J.*, Vol. 46 (E), pp. C394–C408, 2005.
- 12) Montero, G., González, L., Flórez, E., García, M. D., and Suárez, A.: "Approximate inverse computation using Frobenius inner product," *Numer. Linear Algebra Appl.*, Vol. 9, pp. 239–247, 2002.
- 13) Pan, V., and Schreiber, R.: "An improved Newton iteration for the generalized inverse of a matrix with applications," *SIAM J. Sci. Stat. Comp.*, Vol. 12, No. 5, pp. 1109–1130, 1991.
- 14) Saad, Y.: "Preconditioning techniques for nonsymmetric and indefinite linear systems," *Comput. Appl. Math.*, Vol. 24, pp. 89–105, 1988.
- 15) Saad, Y.: "Iterative method for sparse linear systems," 2nd ed. SIAM, 2003.
- 16) Saad, Y. and Schultz, M. H.: "GMRES: A generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems," *SIAM J. Sci. Statist. Comput.*, Vol. 7, pp. 856–869, 1986.
- 17) Shulz, G.: "Iterative berechnung der reziproken matrix," *Z. Angew. Math. Mech.*, Vol. 13, pp. 57–59, 1933.
- 18) Chan, T. F., Tang, W. P., and Wan, W. L.: "Wavelet sparse approximate inverse preconditioners," *BIT*, Vol. 37, pp. 644–660, 1997.