QMR 法のバリエーションについて*

1U－6

川瀬 久美　野寺 隆
慶應義塾大学理工学部†

1 はじめに

QMR 法のバリエーションである BQMR(k) 法と QMRCGSTAB(k) 法について考察する。これらの算法は、QMR 法を変形する事によって転置行列を計算する BQMR(k) や転置行列を計算しない QMRCGSTAB(k) といった方法が生成できる。そこで比較しながら数値実験を行ない、得られた結果について報告する。

2 QMR 法について

連立１次方程式

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

を解く反復法には様々な算法がある。対称な係数行列を持つ線形システムに対しては、CG 法 (共役勾配法) が良く知られている。この CG 法を非対称系に拡張する為に過去 40 年間様々な試みが成されてきた。

非対称問題に対する共役勾配系の算法は３つのクラスに分けられる。そのうちの１つが双直交化法のクラスで、例えば BCG 法である。しかし、この方法には A^T を伴う行列とベクトルのかけ算の必要性やブレイクダウンの可能性、不規則な収束挙動などいくつかの欠点がある。その後 CGS 法や Bi-CGSTAB 法の様な転置行列を計算しない方法が BCG 法の欠点を改善するために開発された。また、ブレイクダウン問題を扱う為に Freund たちによって、QMR 法が開発された。QMR 法は、ブレイクダウンを克服する為に look-ahead ランチョス過程に基づいている。そして、準最小化のステップによって収束も滑らかになる。さらに QMR 法の算法を考えることによって収束が改善される。変形版には、後に述べる BQMR(k) 法や van der Vorst の Bi-CGSTAB 法の QMR 変形である QMRCGSTAB(k) 法がある。

*Variation of QMR Method
†Hisami Kawase and Takashi Nodera
Keio University
3-14-1 Hiyoshi, Kouhoku, Yokohama, 223 Japan

3 BQMR(k) 法

本稿では、nonlook-ahead 版を用いることにする。そして QMR 法のファミリーは、準最小化ステップにおいて異なる weight 行列を使うことにより定義できる。Weight 行列は、扱う問題のスケーリングを行なう自由パラメタとしてアルゴリズム中で用いられる。Weight 行列がブロック対角行列の時（各ブロックは上三角ブロック）は、BQMR(k) 法や QMRCGSTAB(k) 法が得られる。行列 A は正則かつ非対称な n 次の行列である。

QMR 法はランチョス過程を用いるので古典的非対称ランチョス法によって２つのベクトル列を生じる。この２つの列はクリロフ部分空間を張り双直交状態を満たす。QMR 近似は残差のノルムを最小化する代わりに準最小化を行なうことになる。準最小化の最小２乗問題はランチョス過程で生じたパラメタによって定義された３重対角行列の QR 分解によって計算できる。より簡単な nonlook-ahead QMR 法では weight 行列が対角になる様に選ばれるのだが、一般的にはこうならない。従って weight 行列が対角にならない時には、今いるステップ以前の記憶してある方向ベクトルを再使用することになる。つまり weight 行列をブロック対角とすると比較的疎な行列を考えることができるからだ。各ブロックの数を２と３にとり、数値実験を行なった。なお、ここでは、ブロックサイズが１の古典的なランチョス過程に基づいた QMR の算法を BQMR(1) と記述する。また、BQMR(k) 法は、k の増加と共に収束が滑らかになる。

4 QMRCGSTAB(k) 法

多くの工学的な応用問題において転置行列を伴うベクトルとのかけ算は容易に計算できない。このことは転置行列を計算しない Lanczos 過程を用いる方法の動機づけとなり、その最初の方法が、CGS 法であった。しかし CGS 法は極端に不規則な収束をする。そこで準最小化を適用することで滑らかな収束になる手法が

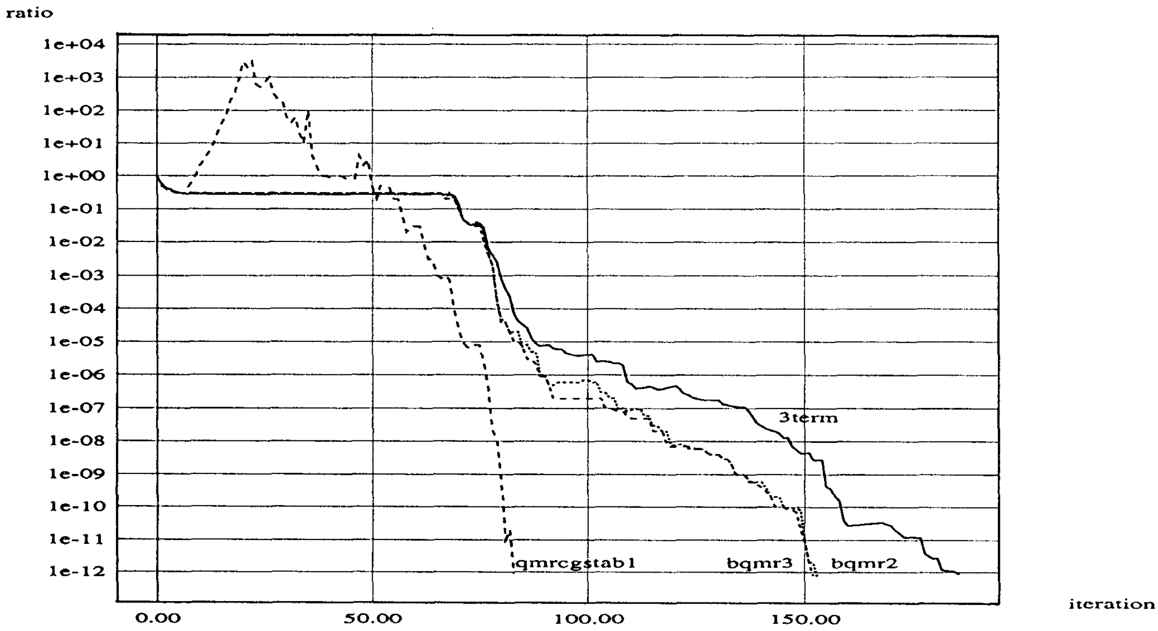

図 1 各方法の残差ノルムの収束 (n=1600)

教えられた。その 1 つが QMRCGSTAB 法である。ここでは QMRCGSTAB(1) 法を実験したが、この場合には weight 行列は対角になる。QMRCGSTAB(k) 法の k はブロックサイズであるが、k の増加と共に収束が滑らかになる。

QMRCGSTAB 法は転置行列を計算しない方法であるので BCG 法の欠点を 1 つ克服したといえる。また前述の BQMR(k) 法より残差ノルムの収束は速い。QMRCGSTAB 法は Bi-CGSTAB 過程を用いるので転置行列を計算しない。その収束は滑らかである。

5 数値実験

$\Omega = R^2$における 2 階の楕円形微分方程式の境界値問題を考える。

$$\begin{aligned} u_{xx} + u_{yy} + au_x + bu_y &= f(x, y) \\ u(x, y)\,|_{\partial\Omega} &= 0 \end{aligned}$$

に対して $a = 30$, $b = 50$ とし、5 点中心差分によって係数行列 A を作成した。メッシュサイズは 15, 21, 30, 40 について行なった。収束条件は $\|r_k\|_2/\|r_0\|_2 \leq 1.0 \times 10^{-12}$ とした。反復回数の結果は以下の表の通りである。

表 1 反復回数の比較

アルゴリズム	行列サイズ			
	225	441	900	1600
BQMR(2)	61	79	129	153
BQMR(3)	61	77	128	152
QMRCGSTAB(1)	43	47	61	83

6 終りに

以上、QMR 法のバリエーションについて概要を述べてきたが、数値実験の詳細については当日発表することにする。

参考文献

[1] Charles H. Tong, *"A family of quasi-minimal residual methods for nonsymmetric linear systems,"* SIAM J. Sci. Comput. Vol. 15. No. 1, pp. 89-105, January 1994.

[2] T. F. Chan, E. Gallopoulos, V. Simoncini, T. Szeto and C. H. Tong, *"A Quasi-Minimal Residual Variant of the Bi-CGStab Algorithm for Nonsymmetric Systems,"* Center for Supercomputing Research and Development Report 1231, University of Illinois at Urbanda-Champaign, May 1992.