6H-06

DQGMRES(m,k) 法とその前処理

大澤 史典　　野寺 隆

慶應義塾大学理工学部

1　はじめに

現在，偏微分方程式の境界値問題の離散化から得られる，非対称で大型な疎行列を係数とする連立1次方程式 $Ax=b$ の近似解を求めるための解法についてさまざまな研究が行なわれている．

この問題を解くための代表的な解法として GMRES 法があるが，記憶容量，計算コストの点において実用的でない．この問題点を改善した解法として，1996年に Y.Saad らによって DQGMRES(k) 法が提案されたが，不完全直交化を用いているため，問題によりその収束性は悪化する場合がある．

本発表では DQGMRES(k) 法のリスタート版である DQGMRES(m,k) 法に適切な前処理を行なうことでその収束性を改善できることを示す．

2　GMRES 法

GMRES 法ではアーノルディ過程を用いてクリロフ部分空間 $K_n(A,r)$ =Span$(r, Ar, ..., A^{n-1}r)$ 上に正規直交基底

$$V_n = (v_1, v_2, ..., v_n) \tag{1}$$

を生成する．そして，このクリロフ部分空間上で残差ノルムを最小化する．残差ノルムは以下の式により与えられる．

$$\min_{z\in K_n} \|b - A(x_0+z)\|_2 = \min_{z\in K_n} \|r_0 - Az\|_2$$

式 (1) で示された正規直交基底を用いて $z=V_ny$ と表すことができる．この V_{n+1} はユニタリ行列であるため，この最小問題は次の最小2乗問題に帰着できる．

$$\begin{aligned} J(y) &= \|\gamma v_1 - AV_ny\|_2 = \|V_{n+1}(\gamma e_1 - \bar{H}_n y)\|_2 \\ &= \|\gamma e_1 - \bar{H}_n y\|_2 \end{aligned} \tag{2}$$

ただし $\gamma = \|r_0\|_2$ である．通常，式 (2) はギブンス法などを用いて，上ヘッセンベルグ行列 $\bar{H}$ を QR 分解することでを最小化することになる．

GMRES 法における近似解 x_n は $x_n = x_0 + V_n y_k$ によって計算できる．

3　DQGMRES 法

3.1　DQGMRES(m,k) 法

DQGMRES(k) 法は GMRES 法を基にした算法で，GMRES 法で使用されているアーノルディ過程の代わりに不完全アーノルディ過程を用いて不完全直交化を行なう手法である．アーノルディ過程の完全直交化では，ベクトル v_n は，以前に求めた全ての $\{v_1, ..., v_{n-1}\}$ と直交するように計算するが，この不完全直交化では，ベクトル v_n を $\{v_{n-k}, ..., v_{n-1}\}$ のみと直交するように計算する．これにより，正規直交基底ベクトルを保存に必要な記憶容量と，行列 $\bar{H}_n$ の保存に必要な記憶容量，そして $\bar{H}_n$ における内積演算の大半を削減でき，一般に用いられているアーノルディ過程に比べて計算コストを削減することができる．しかしながら，不完全直交化を用いているため，反復が進むにつれて不完全アーノルディ過程において求められるベクトル v_i の直交性が崩れていくため，残差ノルムの収束性が悪化する場合がある．

3.2　DQGMRES(m,k) 法

DQGMRES(m,k) 法は DQGMRES(k) 法のリスタート版である．ここでは m はリスタート周期であり，k は正規直交基底ベクトルを保存する数である．DQGMRES(m,k) 法はリスタートを行なうことで，各反復において計算するベクトル v_i の直交性をある程度保つことができるが，GMRES(k) 法と同様にリスタートの際に近似解を構成する固有ベクトルの情

```
choose x_0
r_0 := b - Ax_0;   γ := ||r_0||_2;   v_1 := r_0/γ;
start
for n := 1 to m do
  begin
  v̂ := Av_n;
  for i := max(1, n - k + 1) to n do
    begin
    h_{i,n} := v̂^T v_i;
    v̂ := v̂ - h_{i,n} v_i;
    end
  h_{n+1,n} := ||v̂||_2;
  v_{n+1} := v̂/h_{n+1,n};
  compute y_n = min_y ||γe_1 - H̄_n y||_2;
  if ||b - Ax_n||_2 ≤ ε then
    stop iteration
  end if
end
x_0 := x_k;   r_0 := b - Ax_k;
γ := ||r_0||_2;   v_1 := r_0/γ;
goto start
```

図 1: DQGMRES(m,k) 法の算法

報を欠損する．DQGMRES(m,k) 法の算法を図 1 に示す．

4 近似逆行列による前処理

前処理とは連立 1 次方程式の近似解を効率的に求めるための式 $Ax = b$ の行列変換である．この手法の 1 つに次のような右前処理がある．

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

ただし，Mは前処理行列とする．このような変換をすることにより残差ノルムの収束を向上させることができる．

まず最初に，前処理行列 Mを $M \approx A^{-1}$の形で近似するために疎行列 Mの最小 2 乗問題を考える．

$$\min ||AM - E||_F^2 = \sum_{k=1}^{n} \min ||AM_k - e_k||_2^2 \qquad (3)$$

ただし，Eは単位行列で，列ベクトル M_k，e_kは，行列 M,Eにおける k番目の列ベクトル成分とする．M_kの非ゼロ要素の数が少なければ，式 (3) は以下の n 個の最小 2 乗問題に帰着できる．

$$\min ||AM_k - e_k||, \quad k = 1, ..., n \qquad (4)$$

この最小 2 乗問題を効率良く，そしてある程度の精度を保って解く必要がある．そこで A の疎構造を最大限に利用するためにインデクス集合を導入する．まず，M_kの非ゼロ要素に対応した行インデクス集合 Jを定義する．また Jと同様の行番号をもつインデクス集合 Iを定義する．これにより式 (4) を

$$\min ||A(I,J)M_k(J) - e_k(I)|| = \min ||\hat{A}\hat{M}_k - \hat{e}_k||, \quad k = 1, ..., n$$

と最小化する．この最小化問題は$\hat{A}$を QR 分解することで解くことができる．以上のような手順で，精度を保った近似逆行列を低いコストで計算することができる．

5 おわりに

ここで提案した DQGMRES(m,k) 法は，適切な前処理を行ない，リスタート周期 m に対して適当な k を選ぶことにより，より短い計算時間で解を求めることができる．数値実験より DQGMRES(m,k) 法の有効性を示す．

参 考 文 献

[1] Y. Saad and K. Wu: DQGMRES: A Direct Quasi-minimal Residual Algorithm Based on Incomplete Orthogonalization. *Numerical Linear Algebra with Applications*, Vol.3, No. 4, pp. 329–343 (1996).

[2] T. F. Chan, E. Chow, Y. Saad, and M. C. Yeung: Preserving Symmetry in Preconditioned Krylov Subspace Methods. *SIAM J. Sci. Comput.*, Vol. 20, No. 2, pp. 568–581 (1998).

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