可変的前処理付き一般共役残差法の性能評価

阿部 邦美*
張　紹良**
姫野龍太郎*
*理化学研究所情報環境室
**東京大学大学院工学系研究科

はじめに

物理現象

↓ 定式化

偏微分方程式

↓ 離散化

大規模連立一次方程式 $Ax= b$

↓

Krylov部分空間解 (CG, Bi-CGSTAB,GMRES)

＋

前処理(相似変換を用いて収束性を改善)
(スケーリング，不完全LU分解)

↓

新たな前処理の提案(高速化)

従来の前処理

- 行列前処理 K の構築：

  基本性質 $K \approx A$ ＋ $K^{-1}\boldsymbol{v}$ が容易に計算

  （例　不完全 LU 分解）
- $K^{-1}\boldsymbol{v}$ を直接法で求める

Let x_0 be an initial guess, and put $r_0 = b - Ax_0$.
For $k = 0, 1, \ldots,$ do:
begin
$\vdots$
$r_{k+1} = \ldots,$
compute $K^{-1} r_{k+1},$
$\vdots$
end

発表の概略

1. 可変的前処理法の概念
2. 内部反復の役割
3. 実装
   – 内部反復に様々な反復解法を適用
4. 数値実験
   – 収束振舞いの比較
   – 前処理の可変性
   – 収束性と内部反復との関連

可変的前処理の概念

$K^{-1}\boldsymbol{v}$ が $A^{-1}\boldsymbol{v}$ に十分近似されると前処理の効果大

↓

$A^{-1}\boldsymbol{v}$ を求めることが理想であるが，計算上は無理

↓

容易に $A^{-1}\boldsymbol{v}$ の近似を求める

‖

$K\boldsymbol{z}=\boldsymbol{v}$ を直接法で求める代わりに $A\boldsymbol{z}=\boldsymbol{v}$ を反復法で解く（内部反復） ※十分な精度を要求されない

※ $A\boldsymbol{z}=\boldsymbol{v}$ の解は常に同じである必要はない

特徴の比較

	従来の前処理	可変的前処理
• 前処理行列の構築	必要	必要なし
• 元の行列情報	ある程度保存	完全に保存
• 前処理行列	不変	可変
• 計算手法	直接法	反復法

実　装

従来のアルゴリズムので現れる $K^{-1}\boldsymbol{v}$ の代わりに,
$A^{-1}\boldsymbol{v}$ の近似を求めるように書き直す

- 外部反復（Ax=b）

一般共役残差法（GCR法）

↓　実用性

GCR(m) 法

可変的前処理付きGCR(m)法のアルゴリズム

可変的前処理付きGCR(m)法

Let $\boldsymbol{x}_0$ be an initial guess.

repeat

set $\boldsymbol{r}_0 = b - A\boldsymbol{x}_0$

<u>approximately solve $A\boldsymbol{p} = \boldsymbol{r}_0$ using some iterative method to get $\boldsymbol{p}_0$</u>

set $\boldsymbol{q}_0 = A\boldsymbol{p}_0$

for $k = 0, 1, \ldots, m-1$

$$\alpha_k = \frac{(\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{q}_k)}{(\boldsymbol{q}_k, \boldsymbol{q}_k)}$$

$$\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{x}_k + \alpha_k \boldsymbol{p}_k$$

$$\boldsymbol{r}_{k+1} = \boldsymbol{r}_k - \alpha_k \boldsymbol{q}_k$$

if $\| \boldsymbol{r}_{k+1} \|_2 \le \varepsilon_{\mathrm{TOL}} \cdot \| \boldsymbol{r}_0 \|_2$ then exit

<u>approximately solve $A\boldsymbol{z} = \boldsymbol{r}_{k+1}$ using some iterative method to get $\boldsymbol{z}_{k+1}$</u>

$$\beta_{k,i} = -\frac{(A\boldsymbol{z}_{k+1}, \boldsymbol{q}_i)}{(\boldsymbol{q}_i, \boldsymbol{q}_i)}, \qquad i \le k$$

$$\boldsymbol{p}_{k+1} = \boldsymbol{z}_{k+1} + \sum_{i=0}^{k} \beta_{k,i} \boldsymbol{p}_i$$

$$\boldsymbol{q}_{k+1} = A\boldsymbol{z}_{k+1} + \sum_{i=0}^{k} \beta_{k,i} \boldsymbol{q}_i$$

end for

$\boldsymbol{x}_0 = \boldsymbol{x}_m$

end repeat

収束定理

Theorem 1 Suppose that A is nonsinglar and the condition $\boldsymbol{r}_k \neq \boldsymbol{0}$ holds for non-negative integer k. If the vector $\boldsymbol{z}_k$ exists for a constant $0 < \theta_k < 1$ such that

$$\|\boldsymbol{r}_k - A\boldsymbol{z}_k\|_2 \leq \theta_k \|\boldsymbol{r}_k\|_2 ,$$

then we have the inequality

$$\|\boldsymbol{r}_{k+1}\|_2 \leq \theta_k \|\boldsymbol{r}_k\|_2 .$$

- 内部解法によらず収束する！
- 外部反復に対して内部解法の反復回数を固定する必要はない
- 内部反復は高精度の解を求めることができなくとも，精度の悪い解を素早く求めることができる解法が望ましい

内部反復とその停止条件

- **内部解法**

  SOR **法**

  GCR **法,** Bi-CGSTAB **法**

条件 1，2 のいずれか一方の条件を満たした場合に 内部反復を停止する

1. (1) $\|\boldsymbol{r}_{k+1} - A\boldsymbol{z}_{k+1}^{(l)}\| / \|\boldsymbol{r}_{k+1}\| \le \delta.$

   (2) $\|\boldsymbol{z}_{k+1}^{(l)} - \boldsymbol{z}_{k+1}^{(l-1)}\|_\infty / \|\boldsymbol{z}_{k+1}^{(l)}\|_\infty \le \delta.$

2. （内部反復の反復回数 l） $= N_{\max}.$

モデル問題

- 正方領域 $\Omega = (0,1) \times (0,1)$
  偏微分方程式

$$-u_{xx} - u_{yy} + \gamma(xu_x + yu_y) + \beta u = f,\ 0 < x, y < 1$$

ただし，境界は Dirichlet$(u\,|_{\partial\Omega} = 0)$ 条件

$$\Downarrow$$

x, y 方向共に $M+1$ 等分
5 点中心差分で離散近似

$$\Downarrow$$

$$A : n \times n \quad (n = M \times M)$$

- 解： $x = (1, 1, \ldots, 1)^{\mathrm{T}} \quad \Rightarrow \quad$ 右辺項 $b : Ax$

実験条件

- M=100
- γ=10, β = -80
- GCR(m)法においてm=15
- 外部反復の停止条件 $\|r_k\|/\|r_0\| = 10^{-12}$
- 初期値 $x_0 = (1, 2, \ldots, n-1, n)^{\mathrm{T}}$
- 前処理
  - 従来のILU
  - 可変的前処理

$* \; N_{\max} = 50$

$* \; \delta = 1.0 \times 10^{-1.5}$

$*$ SOR 法の場合 $\Rightarrow$ 加速パラメータ $\omega = 1.70$

実験結果

	回数	時間	可変性
• SOR	30	3.8	○
• Bi-CGSTAB	2500	519	△
• GCR(m)	Stagnation	ー	△
• ILU(0)-Bi-CGSTAB	24	12.7	○
• ILU(0)-GCR(m)	31	25.1	△

まとめ

- 可変的前処理は
  - 従来と比べ, 反復回数, 計算時間で効果あり
  - 反復毎に前処理が異なる
- 収束定理を示し, 内部反復の意味を明らかにすることができた
  - 素早く粗い精度の解を求めることが望ましい
  - 内部反復の収束回数を固定する必要なし
  - 内部解法として
    - ✧SOR法は効果的（△前処理付きBi-CGSTAB法）
    - ✧外部解法と同種の解法はあまり効果がない

今後の課題

- 内部解法が収束に与える影響の解明
  - なぜ, SOR法が有効に働くか解析
- 並列化
- 実用問題へ適用し, 他の解法と比較

➢ 参考文献

Saad, FGMRES, SISC, 1993

van der Vorst, GMRESR, Numer. LAA, 1994

Tamura, et al., ResCut, JCP, 1997