可変的前処理付き一般化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

和光市広沢 2-1　abek@postman.riken.go.jp

** 東京大学大学院 工学系研究科

文京区本郷 7-3-1　zhang@zzz.t.u-tokyo.ac.jp

†理化学研究所 情報環境室

和光市広沢 2-1　himeno@postman.riken.go.jp

Abstract. We propose a new preconditioning strategy for the Krylov subspace method for solving a large sparse system $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$. The basic idea is to use an approximation to $A^{-1}\boldsymbol{v}$ for $K^{-1}\boldsymbol{v}$: the benefit is substantial when the preconditioner K sufficiently approximates A. The preconditioning is performed by approximately solving $A\boldsymbol{z} = \boldsymbol{v}$ by some iterative method with different preconditioners applied at each iterative step. In numerical experiments, we combine the SOR method as a preconditioner and the GCR(m) method as a solver, and show that our preconditioning has lower iterative counts and shorter computation time than ILU(0). Moreover we try to use the ILU(0)-GCR and ILU(0)-Bi-CGSTAB methods as the preconditioner.

1　はじめに

$n \times n$ の正則な大規模疎行列 A を係数行列，n 次元ベクトル$\boldsymbol{b}$を右辺項とする連立一次方程式

$$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \tag{1.1}$$

を Krylov 部分空間解法によって近似的に解くことを考える．

問題（1.1）に数学的同値性が保たれるような変換を行ない，Krylov 部分空間解法（アルゴリズム）に都合の良いように変形し，大幅に収束性を改善するのが前処理である．一般の非対称行列に対する前処理付き Krylov 部分空間解法のアルゴリズムでは，係数行列 A に近似的に等しく，$K^{-1}\boldsymbol{r}$ の計算が容易にできるような前処理行列 K を構築する．前処理行列 K について，これまでに多くの構築方法が提案されてきたが，代表的な方法として，不完全 LU 分解法 (Incomplete LU factorization, ILU)[1, 5] が知られている．この方法では，$A \approx LU$ と分解して前処理行列 $K = LU$ を構築し，$K^{-1}\boldsymbol{v}$ は直接法によって $K\boldsymbol{z} = \boldsymbol{v}$ を解いて求める．近年では，Generalized Minimal Residual Method（GMRES 法）[6] の変形として，反復毎に前処理行列を変え（K_k），反復過程で計算された $K_k^{-1}\boldsymbol{v}$ を保存することによって近似解を構成する FGMRES 法 [7]，および行列分離を利用した

GMRES 法の導出において前処理行列の可変性を示し，適当な $A^{-1}\boldsymbol{v}$ の近似を求めることによって前処理を行なう GMRESR 法 [9] が開発されている．実際，これら 2 つの方法においては，GMRES 法のアルゴリズムで現れる $K^{-1}\boldsymbol{v}$ を計算する代わりに，方程式 $A\boldsymbol{z} = \boldsymbol{v}$ を解くことによって前処理が行なわれている．このとき，方程式は主に GMRES 法を用いて固定した回数の反復で解かれる．これは，反復毎に前処理を変えており，新たな前処理の概念とみなせる．

一方，われわれは前処理行列が満たす基本的性質に着眼し，FGMRES 法や GMRESR 法とは異なったアプローチの新しい前処理を提案する．その方法は，前処理行列 K が係数行列 A の近似であること，および反復過程で現れる $K^{-1}\boldsymbol{v}$ の計算に着目する．このとき，$K^{-1}\boldsymbol{v}$ は $A^{-1}\boldsymbol{v}$ を十分に近似することが望ましいので，$K^{-1}\boldsymbol{v}$ を求める代わりに $A^{-1}\boldsymbol{v}$ の近似を求めることを考える．すなわち，反復過程で解かなければならない連立一次方程式 $K\boldsymbol{z} = \boldsymbol{v}$ の代わりに，方程式 $A\boldsymbol{z} = \boldsymbol{v}$ を任意の反復解法によって近似的に解く．ただし，固定した反復回数によるのではなく，前処理の効果が十分に得られるように精度と反復回数に関する停止条件を設定する．このとき，各反復で反復回数を変化させることで，反復毎に異なった前処理を適用できる．それゆえ，われわれはこのような前処理を可変的前処理（Variable preconditioning）と呼ぶ．可変的前処理は，GMRES 法に限定することなく，様々な Krylov 部分空間解法に適用できる可能性を持つこと，また提案される停止条件の設定によって FGMRES 法や GMRESR 法とは異なった可変性が実現できる．

本研究では，この前処理を Generalized Conjugate Residual Method（一般化共役残差法，GCR 法)[2] に適用し，その反復過程で解かなければならない方程式 $A\boldsymbol{z} = \boldsymbol{r}$ に適用する解法の違いによる効果を調べる．定常反復解法を代表して Successive Over-Relaxation Method（SOR 法）[3, 10]，また非対称行列のための Krylov 部分空間解法として Petrov-Galerkin アプローチ [4] に属する ILU(0) 付き Bi-Conjugate Gradient STABilized Method (Bi-CGSTAB) 法 [8]，Minimum Residual アプローチ [4] に属する ILU(0) 付き GCR 法を用いる．

2　新たな前処理の提案

本節では，われわれが提案する前処理の概念，および GCR(m) 法への実装について述べる．

2.1　提案する前処理の概念

従来の前処理では，K を定め，反復の中で $K^{-1}\boldsymbol{v}$ を計算する．われわれの提案する方法では，反復解法を用いて $A^{-1}\boldsymbol{v}$ の近似を求めることによって前処理を行なう．

前処理行列 K は係数行列 A の近似となるように構築される．この性質に着目すれば，$K^{-1}\boldsymbol{v}$ は次のように近似できる．

$$K^{-1}\boldsymbol{v} \approx A^{-1}\boldsymbol{v}.$$

このとき，K が A を十分に良く近似すると，言い換えれば $K^{-1}\boldsymbol{v}$ が $A^{-1}\boldsymbol{v}$ を十分に良く近似すると，前処理の効果は大きいことが期待できる．それゆえ，$A^{-1}\boldsymbol{v}$ を求めることが

理想的であるが，一般には計算コストの面で困難があり，計算が簡単になるように K を定め $K^{-1}\boldsymbol{v}$ を求めざるを得なかった．

そこで，計算コストが少ない方法で $A^{-1}\boldsymbol{v}$ の近似を求めることを考える．すなわち，$K^{-1}\boldsymbol{v}$ の代わりに，反復解法を用いて適当な精度を満たすように式（2.1）を解くことによって $A^{-1}\boldsymbol{v}$ の近似を求める．ここでの反復解法は任意の方法（定常反復解法，あるいは Krylov 部分空間解法）でよい．加えて，直接 $A^{-1}\boldsymbol{v}$ の近似を求めるため，前処理行列 K を構築する手間を省くことができる．

$$A\boldsymbol{z} = \boldsymbol{v}. \tag{2.1}$$

式（2.1）を反復解法で解く場合，停止条件は精度と反復回数の両方を設定する．このとき，結果的に反復回数が変化するので，各反復での前処理は異なってくる．

2.2 GCR(m) 法への実装

可変的前処理を GCR(m) 法へ施したアルゴリズムは，従来の前処理付き GCR(m) 法における $K^{-1}\boldsymbol{r}$ の計算を $A^{-1}\boldsymbol{r}$ の近似を求めるように書き直せばよい．そのようにして得られる以下のアルゴリズムを，Variable preconditioned GCR(m) method(可変的前処理付き GCR(m) 法，略して VPGCR(m) 法) と名付ける．

可変的前処理付き GCR(m) 法（VPGCR(m)）のアルゴリズム：

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

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

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

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

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

end for

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

end repeat

方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ を解く際の反復を外部反復，$A\boldsymbol{z} = \boldsymbol{r}_{k+1}$ を反復解法で解く際の反復を内部反復と呼ぶ.

外部反復の各反復では方程式 $A\boldsymbol{z} = \boldsymbol{r}_{k+1}$ を近似的に解かなければならない．このとき，定常反復解法や Krylov 部分空間解法など様々な解法の使用が考えられるが，次のような点に考慮する必要がある.

- 内部反復の総反復回数は多くなるため，計算時間，演算量の少ない解法を選ぶ
- 少ない反復回数で必要な精度（十分な精度は要求されない）を満たすことが望ましい．したがって，反復の初期段階において残差ノルムが振動，停滞せず急速に減少する解法が好ましい
- 十分な精度を要求しないため，頑健な解法を用いる必要性はない

式（2.1）の相対残差ノルムが 1 より小さくなるような近似解が求まれば前処理の効果が期待できる．それゆえ，残差に基づいた収束判定が重要である．さらに，必要な精度を満たすまでに多くの反復回数を要すると効率が悪くなるため，最大反復回数を設ける.

このような点を考慮して，われわれは次のような停止条件を設定した．ただし，$k+1$ 回目の外部反復における内部反復の l 回目に求められた近似解を $\boldsymbol{z}_{k+1}^{(l)}$ と表す．また，内部反復に Krylov 部分空間を用いた場合は停止条件 1(A)，定常反復解法を用いた場合は停止条件 1(B) を使用する.

内部反復に使用する解法の停止条件：

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

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

2. （内部反復の反復回数 l） $= N_{\max}$

3 数値実験

本節では，fill-in 無しの不完全 LU 分解（ILU(0)），単純な fill-in 有りの不完全 LU 分解（ILU(1)）による前処理，内部反復に SOR 法，ILU(0) 付き Bi-CGSTAB 法，ILU(0) 付き GCR(m) 法を用いて可変的前処理を行なった場合の収束性，計算時間の比較を行なう.

3.1 モデル問題

2 次元正方領域 $\Omega = (0,1)\times(0,1)$ において，次の移流拡散方程式の離散近似解を求める．

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

境界条件は Dirichlet ($u\mid_{\partial\Omega}= 0$) 条件とする [7]．この境界値問題に対して，$\Omega$ を x, y 両方向ともに $M+1$ 等分した正方格子を考え，5 点中心差分で離散化すると係数行列 A は $n \times n$ ($n = M \times M$) の非対称行列となる．また，右辺項は解を $u = (1, \ldots, 1)$ と与えて，$f = Au$ によって計算する．

以下の数値実験では，定数 $\gamma = 10$, $\beta = -100$，$M = 100$ にとり，10^4 個の未知数をもつ連立一次方程式（1.1）を 15 回ごとにリスタートする GCR(m) 法 ($m = 15$) によって解く．また，計算は Pentium III 800MHz において倍精度演算によって実行された．外部反復において，初期ベクトルは $\boldsymbol{x}_0 = \boldsymbol{0}$，収束判定条件は $\epsilon_{\mathrm{TOL}} = 10^{-12}$ とした．

さらに，内部反復の定数は $\delta = 10^{-1.5}$，$N_{\max} = 50$ と設定した．内部反復の初期ベクトルは $\boldsymbol{z}_{k+1}^{(0)} = \boldsymbol{0}$，SOR 法の加速係数は $\omega = 1.80$ を採用した．

3.2 結果および考察

それぞれの前処理を用いたときの GCR(15) 法の残差の収束特性を Fig. 1に示す．Fig. 1における “Variable(SOR)”, “Variable(ILU-STAB)”, “Variable(ILU-GCR)” は，式 (2.1) を解くときにそれぞれ SOR 法，ILU(0) 付き Bi-CGSTAB 法，ILU(0) 付き GCR(15) 法を用いて可変的前処理を行なった場合である．また，“ILU(0)”, “ILU(1)” は，ILU(0) 付き GCR(15) 法，ILU(1) 付き GCR(15) 法である．グラフの横軸は反復回数， 縦軸は算法によって漸化的に計算された相対残差ノルム ($\log_{10}(\| \boldsymbol{r}_k \|_2 / \| \boldsymbol{r}_0 \|_2)$) を表す．

それぞれの外部反復の反復回数及び計算時間を Table 1に示す．Table 1における “Stagnation” は，5000 回まで反復したときに，残差ノルムが 10^{-12} に達しなかったことを意味する．

Table 1. Iteration counts and computation time of outer iteration.

Precondition	Iteration counts	Computation time
Variable(SOR)	17	2.49 sec.
Variable(ILU-STAB)	69	38.6 sec.
Variable(ILU-GCR)	Stagnation	∞
ILU(0)	Stagnation	∞
ILU(1)	Stagnation	∞

可変的前処理付き GCR(15) 法の各反復において内部反復の反復回数が変化していること，すなわち異なる前処理が適用されていることを Fig. 2に示す．ここでは，特に効果が

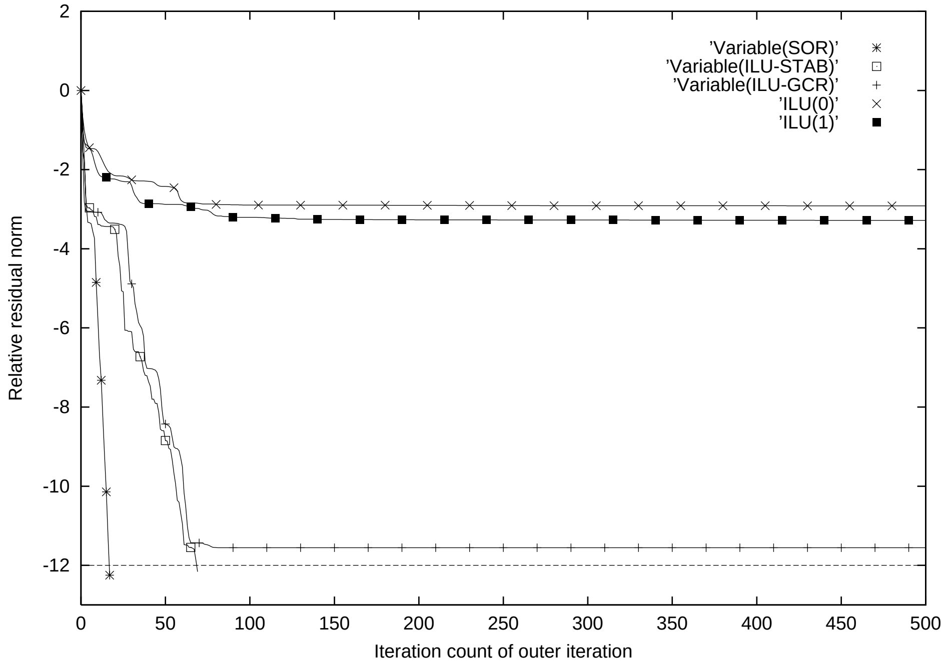

Fig. 1. Convergence history of preconditioned GCR(15).

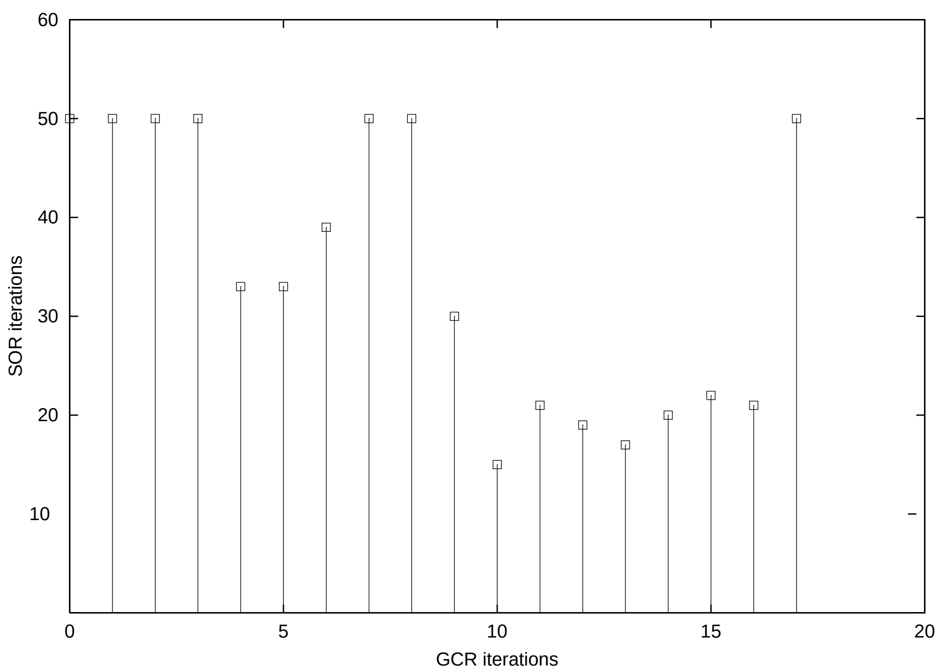

Fig. 2. The iteration counts of SOR at each outer iteration.

あった SOR 法の場合をとりあげる．横軸は外部反復の回数，縦軸は内部反復での SOR 法の反復回数を表す．

次に，内部反復で用いた SOR 法，ILU(0) 付き Bi-CGSTAB 法，ILU(0) 付き GCR(15) 法の収束振舞いを Fig. 3に示す．ただし，SOR 法の場合は外部反復が 10 回目，ILU(0) 付き Bi-CGSTAB 法，ILU(0) 付き GCR(15) 法の場合は外部反復が 30 回目である．横軸は内部反復の反復回数，縦軸は ILU(0) 付き Bi-CGSTAB 法，ILU(0) 付き GCR(15) 法の相対残差ノルム（$\log_{10}(\| \boldsymbol{r}_k \|_2 / \| \boldsymbol{r}_0 \|_2)$），また SOR 法の相対誤差（$\log_{10}(\|\boldsymbol{x}_k - \boldsymbol{x}_{k-1}\|_\infty / \|\boldsymbol{x}_k\|_\infty)$）を表す．

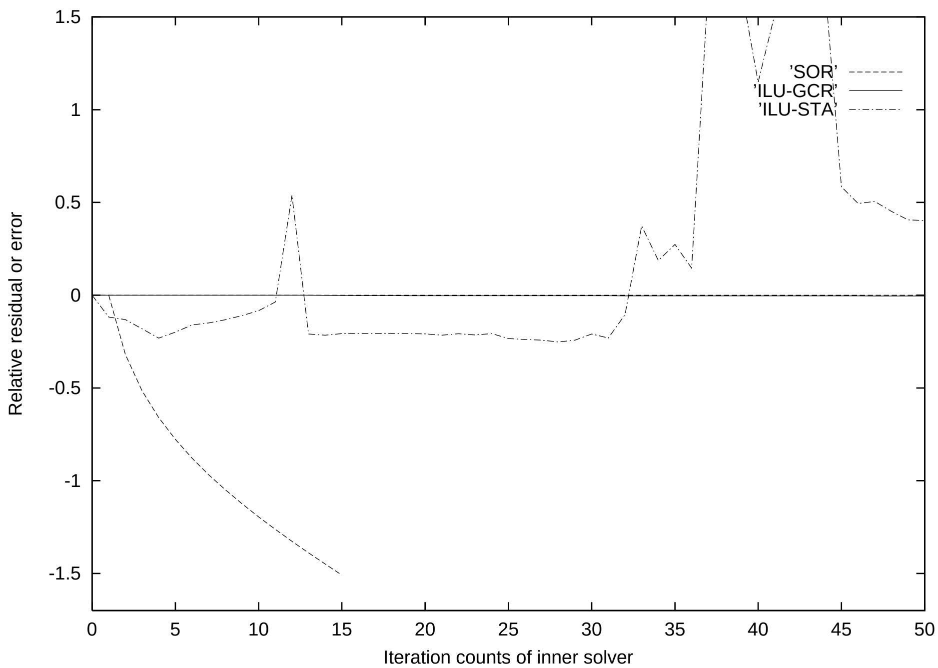

Fig. 3. Convergence history of each inner solver.

[**結果および考察**]

ILU(0)，ILU(1) を用いた前処理の場合，ともに残差ノルムは停滞して収束しなかった．一方で，SOR 法，ILU(0) 付き Bi-CGSTAB 法を用いて可変的前処理を行なった場合，残差ノルムは急速に減少し収束した．特に，SOR 法を用いた場合は ILU(0) 付き Bi-CGSTAB 法を用いた場合と比較して，反復回数は 24.5%，計算時間は 6.5%であった．また，内部反復に外部反復と同種の解法を用いた場合，すなわち ILU(0) 付き GCR(m) 法を用いた場合，残差ノルムは減少したが収束判定条件の直前に停滞し，10^{-12} に到達しなかった．これらの結果から，従来の不完全 LU 分解を用いる前処理法と比べ，可変的前処理法は収束性，および計算時間の点で優れていると言える．また，内部反復に用いる解法として，Bi-CGSTAB 法より SOR 法を用いた方が効果的であること，また同種の解法（GCR 法）は有効ではないと言える．

Fig. 2から，内部反復で用いた SOR 法の反復回数は異なっているので，外部反復において異なった前処理が適用されたことになる．すなわち，可変的な前処理が実現できている．

内部反復で SOR 法を適用した場合，相対誤差は単調減少し，少ない反復回数で収束判定条件を満たした．その一方で，ILU(0) 付き Bi-CGSTAB 法の残差ノルムは上下に振動し，反復回数 50 回では収束判定条件を満たさなかった．さらに，ILU(0) 付き GCR(m) 法の残差ノルムはまったく減少しなかった．したがって，SOR 法だけが 2.2小節で述べた内部反復に望まれる収束特性を満たしていることがわかる．

4　まとめ

提案した可変的前処理法を GCR(m) 法に施し，その外部反復の各反復で解かなければならない方程式 $A\boldsymbol{z} = \boldsymbol{r}$ に対して SOR 法，ILU(0) 付き Bi-CGSTAB 法，ILU(0) 付き GCR(m) 法を適用して前処理した．そして，これらの解法の違いによる効果を比較した．数値実験では，不完全 LU 分解を用いた前処理（ILU(0)，ILU(1)）より可変的前処理を行なった場合の方が，収束性，計算時間の点で有効であった．さらに，内部反復に適用する解法として，SOR 法，ILU(0) 付き Bi-CGSTAB 法の順に効果が大きかった．また，ILU(0) 付き GCR(m) 法は有効に働かなかった．

次に，内部反復に用いる解法として，残差ノルムが振動したり，一時的に残差ノルムが改善されないという収束性を持つ解法ではなく，定常反復解法のように少ない反復回数である程度の残差ノルムの減少を期待できる解法が望ましいことがわかった．

FGMRES 法や GMRESR 法では内部反復の反復回数が固定されており，残差ノルムの減少とともに前処理の効果を十分に得ることができない．そのため，われわれは内部反復に適用する解法にある停止条件を設定し，内部反復の反復回数を変えた．また，不完全 LU 分解を用いる前処理では各反復において前処理行列が一定であるのに対し，提案する前処理では各反復で異なった前処理を適用することができた．

参考文献

[1] Bruaset, A. M., *A Survey of Preconditioned Iterative Methods*, Frontiers in Applied Mathematics 17, Longman Scientific and Technical, London, 1995.

[2] Eisenstat, S. C., Elman, H. C. and Schultz, M. H., Variational iterative methods for nonsymmetric systems of linear equations, *SIAM J. Numer. Anal.*, **20**(1983), 345-357.

[3] Golub, H. G. and van Loan, F. C., *Matrix Computations*, Third ed., The Johns Hopkins University Press, Baltimore and London, 1996.

[4] Golub, H. G. and van der Vorst, H. A., *Closer to the Solution: Iterative Linear Solvers*, The State of the Art in Numerical Analysis, Duff, I. S. and Watson, G. A.

(eds), Clarendon Press, Oxford, 1997, 63-92.

[5] Meijerink, J. A. and van der Vorst, H. A., An Iterative Solution Method for Linear Systems of which the Coefficient Matrix is a Symmetric M-matrix, *Mathematics of Computation*, **31** (1977), 148-162.

[6] Saad, Y. and Schultz, M. H., GMRES: A Generalized Minimal Residual Algorithm for Solving Nonsymmetric Linear Systems, *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, **7** (1986), 856-869.

[7] Saad, Y., A Flexible Inner-outer Preconditioned GMRES Algorithm, *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, **14** (1993), 461-469.

[8] van der Vorst, H. A., Bi-CGSTAB:A Fast and Smoothly Converging Variant of Bi-CG for the Solution of Nonsymmetric Linear Systems, *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, **13** (1992), 631-644.

[9] van der Vorst, H. A. and Vuik, C., GMRESR: A family of Nested GMRES Methods, *Numer. Linear Algebra with Applics.*, **1** (1994), 369-386.

[10] Varga, R., *Matrix Iterative Analysis*, Prentice-Hall, New Jersey, 1962.