

付録 C

前処理と収束の振舞い

ここでは、非定常反復法と併用する前処理について考え、前処理がクリロフ部分空間に対して影響を与えることを示す。また、第5章では、SCとブロック完全分解が代数的に同値であり、収束も同じであるものとしたが、実際にそのとおりであることを数値実験をとおして確認する。

C.1 前処理とクリロフ部分空間

対称正定値な係数行列を持つ線形方程式

$$Ax = b \quad (\text{C.1})$$

に対する解法として提案された共役勾配法 [23] は、前処理を併用することによりその収束の振舞いに変化をもたらされる。このときの前処理は、系の対称正定値性を保持している必要がある。

係数行列 A を、簡単に逆行列が求まる行列 K と残りの要素からなる行列 R とに分離する。つまり $A = K - R$ と分離すると、式 (C.1) は、 $(K - R)x = b$ となる。反復法では、右辺の x として近似値 x_k を用いて、新しい近似値 x_{k+1} を K を係数行列とする線形方程式

$$Kx_{k+1} = Rx_k + b, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (\text{C.2})$$

を解いて求める。 $k = 0$ においては、適当な初期値 x_0 から始めて順次 x_{k+1} を計算する。式 (C.2) を変形すると、 $k + 1$ 番目における近似解は、

$$\begin{aligned} x_{k+1} &= K^{-1}(Rx_k + b) \\ &= K^{-1}\{(K - A)x_k + b\} \quad (R = K - A) \\ &= x_k + K^{-1}(b - Ax_k) \end{aligned} \quad (\text{C.3})$$

と表される。ここで、初期残差 $r_0 = b - Ax_0$ を定義すると、近似解 x_k は、

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_k = & \mathbf{x}_0 + c_0^{(k)}(K^{-1}\mathbf{r}_0) + c_1^{(k)}(K^{-1}A)(K^{-1}\mathbf{r}_0) \\ & + \cdots + c_{k-1}^{(k)}(K^{-1}A)^{k-1}(K^{-1}\mathbf{r}_0) \end{aligned} \quad (\text{C.4})$$

$c_j^{(k)}$: 第 k 回目の反復における係数, $j = 0, 1, \dots, k-1$

と表され, ベクトル $(K^{-1}\mathbf{r}_0), K^{-1}A(K^{-1}\mathbf{r}_0), \dots, (K^{-1}A)^{k-1}(K^{-1}\mathbf{r}_0)$ によって張られた k 次元部分空間の, あるベクトル \mathbf{z}_k と, \mathbf{x}_0 との和に等しい. このような形の部分空間

$$\text{span} \{ \mathbf{s}, B\mathbf{s}, \dots, B^{k-1}\mathbf{s} \} \quad (\text{C.5})$$

を \mathbf{s} と B に対応する “ k 次元のクリロフ部分空間 (Krylov subspace)[8]” と呼び, $\mathcal{K}_k(B; \mathbf{s})$ と表す. 式 (C.4) の場合, $\mathbf{x}_k = \mathbf{x}_0 + \mathbf{z}_k$ で $\mathbf{z}_k \in \mathcal{K}_k(K^{-1}A; K^{-1}\mathbf{r}_0)$ である [11] [53]. 特に, $K^{-1} \geq 0$ かつ $R \geq 0$ となるような分離を, 行列 A の正則分離 (regular splitting) という. このとき, 行列 A の正則分離に対応する反復解法は収束する [34].

また, A が対称正定値である場合は, K も対称正定値となるよう, かつ, コレスキー分解 $K = LL^T$ (L : 下三角行列) 可能であるよう生成する. これを用いて,

$$LL^T \mathbf{x}_{k+1} = R\mathbf{x}_k + \mathbf{b}, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (\text{C.6})$$

である. これを以下のとおり変形すると,

$$\begin{aligned} L^T \mathbf{x}_{k+1} &= L^{-1}(R\mathbf{x}_k + \mathbf{b}) \\ &= L^{-1} \{ (K - A)\mathbf{x}_k + \mathbf{b} \} \\ &= L^{-1} \{ K\mathbf{x}_k + \mathbf{b} - A\mathbf{x}_k \}. \end{aligned} \quad (\text{C.7})$$

ここで, $\mathbf{y}_k = L^T \mathbf{x}_k$ とおくと,

$$\begin{aligned} \mathbf{y}_{k+1} &= L^{-1} \{ K(L^{-T}\mathbf{y}_k) + \mathbf{b} - A\mathbf{x}_k \} \\ &= \mathbf{y}_k + L^{-1}(\mathbf{b} - A\mathbf{x}_k) \\ &= \mathbf{y}_k + L^{-1}\mathbf{b} - (L^{-1}AL^{-T})(L^T \mathbf{x}_k) \end{aligned} \quad (\text{C.8})$$

が得られる. 初期残差 $\mathbf{r}_0 = \mathbf{b} - A\mathbf{x}_0$ を用いて, $\tilde{A} \equiv L^{-1}AL^{-T}$, $\tilde{\mathbf{r}}_0 \equiv L^{-1}\mathbf{r}_0$ とおくと,

$$\mathbf{y}_k = \mathbf{y}_0 + c_0^{(k)}\tilde{\mathbf{r}}_0 + c_1^{(k)}\tilde{A}\tilde{\mathbf{r}}_0 + \cdots + c_{k-1}^{(k)}\tilde{A}^{k-1}\tilde{\mathbf{r}}_0 \quad (\text{C.9})$$

である. したがって, $\mathbf{y}_k = \mathbf{y}_0 + \tilde{\mathbf{z}}_k$ で, $\tilde{\mathbf{z}}_k \in \mathcal{K}_k(\tilde{A}; \tilde{\mathbf{r}}_0)$ である. これより, 係数行列が対称正定値な系に対する前処理は, 不完全コレスキー分解により作られた行列を $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ に施して,

$$(L^{-1}AL^{-T})(L^T \mathbf{x}) = (L^{-1}\mathbf{b}) \quad (\text{C.10})$$

と変換する．ここで， $\tilde{x} = L^T x$ ， $\tilde{b} = L^{-1} b$ とおけば，線形方程式は

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

である．

以上において行列 K を前処理行列と呼ぶ．特に $K = I$ と選べば，クリロフ部分空間は $\mathcal{K}_k(A; r_0)$ となり前処理無しの系となる．これは，Richardson 反復と呼ばれる [50]．

いま，クリロフ部分空間を生成するベクトル列は 1 次独立であると仮定する．このクリロフ部分空間にグラム・シュミットの直交化法 (Gram-Schmidt orthogonalization method) を施して，正規直交系を生成し，直交条件あるいは最小条件を用いることで，CG 法あるいは GMRES 法などの反復解法が導出される [16][52]．

実際の前処理演算においては，

$$r' = K^{-1}r \quad (\text{C.12})$$

を計算すれば良く， $K = LL^T$ の形に分解できなくても良い．このとき，クリロフ部分空間の生成はどのようになっているのだろうか．前処理付き共役勾配法の収束の振舞いにより確認した．

C.2 対象とする問題

第 5 章の例題の対称問題，すなわち，式 (5.2) において $v_1 = v_2 = 0$ としたポアソン方程式を取り上げた．これを 5 点中心差分で離散化し， x, y の各方向とも $n+1$ 等分したとき，周期境界要素を伴う対称正定値でスパースな 5 重対角行列となる．

第 5 章と同様に，この対角ブロックからブロック前処理行列 K_l が生成される． K_l は，サイズ $(n+1) \times (n+1)$ のブロック行列であり，式 (5.6) に基づき生成される前処理行列，つまり，

$$K_l^{-1} = P_l^{-1} \quad (\text{C.13})$$

である．ここで，以下の 3 通りの前処理行列を考える．

まず，

$$\begin{aligned} \check{K}_l &= \begin{bmatrix} \delta_1^{(l)} & & & & & \\ a_1^{(l)} & \delta_2^{(l)} & & & & \\ & \ddots & \ddots & & & \\ & & a_m^{(l)} & \delta_{m-1}^{(l)} & & \\ p_1^{(l)} & * & * & \alpha_{m-1}^{(l)} & \delta_m^{(l)} & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \delta_1^{(l)} & a_1^{(l)} & & & p_1^{(l)} \\ & \delta_2^{(l)} & a_2^{(l)} & & * \\ & & \ddots & \ddots & * \\ & & & \delta_{m-1}^{(l)} & \alpha_{m-1}^{(l)} \\ & & & & \delta_m^{(l)} \end{bmatrix} \\ &\equiv C_l C_l^T \end{aligned} \quad (\text{C.14})$$

を考える．“*” は *fill-in* により生じた非 0 要素である．すなわち，完全コレスキー分解である．

次に,

$$\begin{aligned}\hat{d}_1^{(l)} &= d_1^{(l)} - p_1^{(l)}, \\ \hat{d}_m^{(l)} &= d_m^{(l)} - p_1^{(l)}\end{aligned}$$

とにおいて,

$$\begin{aligned}\hat{K}_l &= \begin{bmatrix} \hat{d}_1^{(l)} & a_1^{(l)} & & & \mathbf{0} \\ a_1^{(l)} & d_2^{(l)} & a_2^{(l)} & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & a_{m-2}^{(l)} & d_{m-1}^{(l)} & a_{m-1}^{(l)} \\ \mathbf{0} & & & a_{m-1}^{(l)} & \hat{d}_m^{(l)} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} p_1^{(l)} & 0 & \cdots & 0 & p_1^{(l)} \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ p_1^{(l)} & 0 & \cdots & 0 & p_1^{(l)} \end{bmatrix} \\ &= T_l + \begin{bmatrix} p_1^{(l)} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ p_1^{(l)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 & 1 \end{bmatrix} \\ &\equiv S_l S_l^T + \mathbf{u}_l \mathbf{v}_l^T \end{aligned} \quad (\text{C.15})$$

とする．すなわち，第5章のSC前処理である． \hat{K}_l は，対称な3重対角行列 T_l とランク1の項とに分離された．この式自体は，コレスキー分解では表現できない．

さらに極端な例として，

$$\begin{aligned}\bar{K}_l &= \begin{bmatrix} d_1^{(l)} & a_1^{(l)} & & & \mathbf{0} \\ a_1^{(l)} & d_2^{(l)} & a_2^{(l)} & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ \mathbf{0} & & a_{m-2}^{(l)} & d_{m-1}^{(l)} & a_{m-1}^{(l)} \\ p_1^{(l)} & & & a_{m-1}^{(l)} & d_m^{(l)} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 & p_1^{(l)} \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \end{bmatrix} \\ &= Q_l + \begin{bmatrix} p_1^{(l)} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 \end{bmatrix} \\ &\equiv L_l U_l + \mathbf{s}_l \mathbf{t}_l^T \end{aligned} \quad (\text{C.16})$$

を考える． \bar{K}_l は，非対称な行列 Q_l と一要素のみからなるランク1の項とに分離された．以上をまとめると，

$$\text{Prec1: } \check{K}_l^{-1} = (C_l C_l^T)^{-1}, \quad (\text{C.17})$$

$$\text{Prec2: } \hat{K}_l^{-1} = (S_l S_l^T + \mathbf{u}_l \mathbf{v}_l^T)^{-1}, \quad (\text{C.18})$$

$$\text{Prec3: } \bar{K}_l^{-1} = (L_l U_l + \mathbf{s}_l \mathbf{t}_l^T)^{-1} \quad (\text{C.19})$$

である．ただし，

$$\check{K}_l^{-1} = \hat{K}_l^{-1} = \bar{K}_l^{-1} \quad (\text{C.20})$$

である．

式 (C.17) は完全コレスキー分解，式 (C.18) は Sherman-Morrison 公式 [19] と完全コレスキー分解，そして，式 (C.19) は Sherman-Morrison 公式と LU 分解を用いて計算する．

C.3 同値な前処理と収束の振舞い

ポアソン方程式を5点中心差分を用いて離散化する際に， $n = 64$ とした．これにより得られた線形方程式を，前処理付き共役勾配法を用いて解いた．前処理は，式 (C.17)(C.18)(C.19) のとおりである．このときの収束の振舞いを，相対残差ノルムをプロットして比較した．その結果を，図 C.1 に示す．

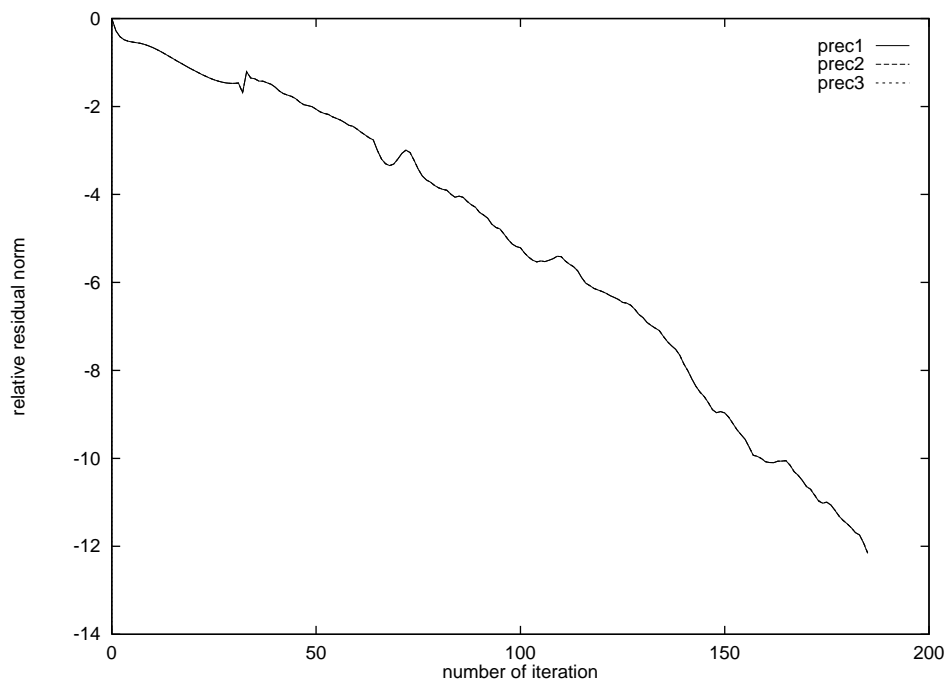


図 C.1: 各前処理に対する収束の振舞い.

この結果から，Prec1，Prec2，Prec3 の各前処理を施した共役勾配法の収束の振舞いは，全て同じであることが確認できる．

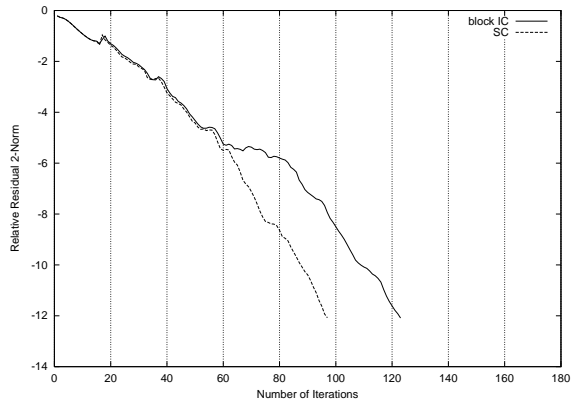
C.4 反復途中で前処理を切替えたときの振舞い

ここでは、ブロック完全コレスキー分解による前処理 (Prec1) と Splitting Correction 前処理 (Prec2) およびブロック不完全コレスキー分解を取り上げ、これら前処理付き共役勾配法の反復の途中で前処理を切替えたときの $\log_{10}(\|b - Ax_k\|_2 / \|b\|_2)$ による収束の振舞いの様子を確認する。また本実験では、 $n = 32$ として離散化した。

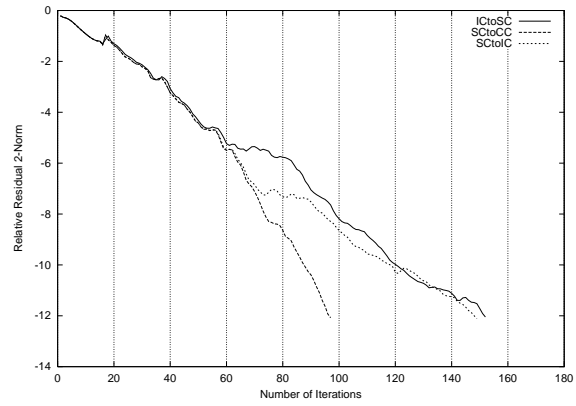
図 C.2 は、その他の結果との比較の対象として、前処理を切替えずに収束するまで実行したときの収束の振舞いである。

図 C.3~ C.7 は、反復の途中で前処理を切替えたときの収束の振舞いであり、各図の説明中で “ITER=” で示した値が前処理を切替えたときの反復回数を示している。また、グラフ中の記号として、ブロック完全コレスキー分解による前処理を CC, Splitting Correction 前処理を SC, ブロック不完全コレスキー分解による前処理を IC と表しており、“ICtoSC” は、最初は IC 前処理を用いて “ITER=” の反復回数に達したところで、SC 前処理に切替えたことを意味している。他の、SCtoCC や SCtoIC も同様である。

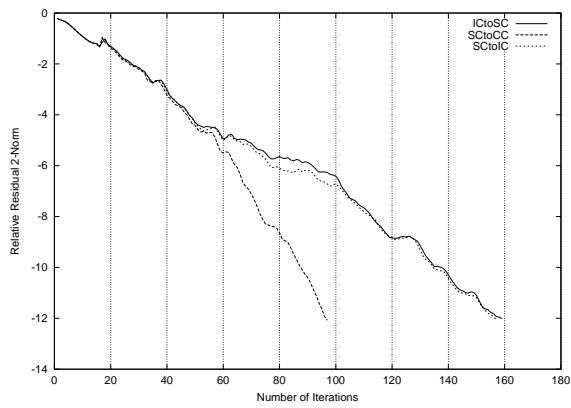
これらの結果から、代数的に同値な前処理である SC とブロック CC 前処理では、反復の途中で切替えても前処理付き CG 法の収束の振舞いは、SC のみのときと変わらないが、ブロック IC との切替えでは、前処理付き CG 法の収束の振舞いが変わってしまうことが確認できる。



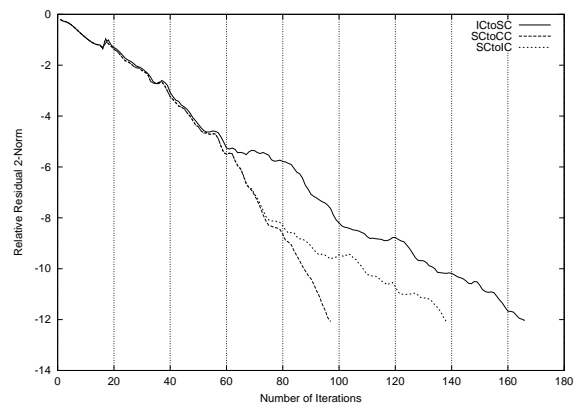
☒ C.2: Base.



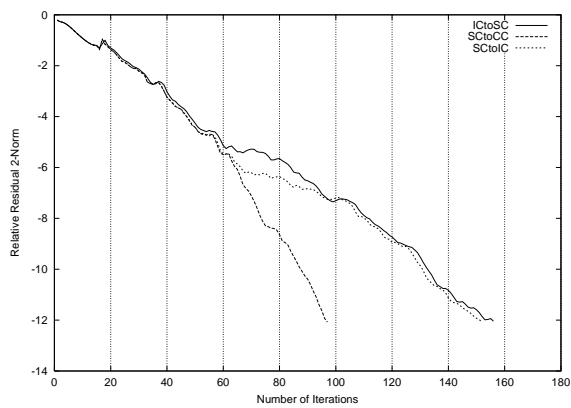
☒ C.5: Change at ITER=45.



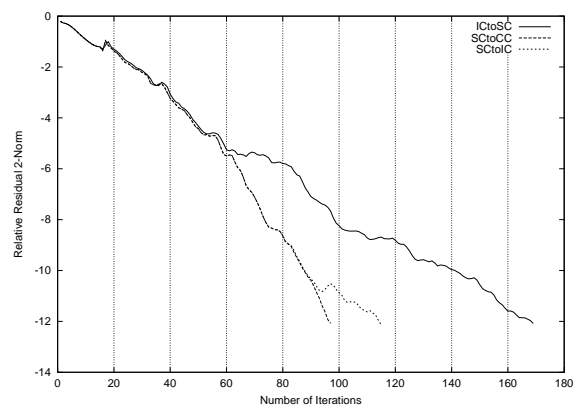
☒ C.3: Change at ITER=10.



☒ C.6: Change at ITER=60.



☒ C.4: Change at ITER=30.



☒ C.7: Change at ITER=70.