

半正定値系に対する Eisenstat SSOR による 右前処理 MINRES 法

杉原 光太* 速水 謙^{†*} Ning Zheng*

* 総合研究大学院大学 [†] 国立情報学研究所

Kota Sugihara* Ken Hayami^{†*} Ning Zheng*

*SOKENDAI (The Graduate University for Advanced Studies)

[†]National Institute of Informatics

概要. 大規模疎で対称半正定値な連立一次方程式を、数値的に効率よく解くことを考える。係数行列が半正定値で、右辺ベクトルが係数行列の値域に入らない場合、CG 法は最小二乗解への収束が保証されていないため、最小二乗解への収束が保証されている MINRES 法を採用する。MINRES 法は残差の 2 乗ノルムを最小化する解法である。特異系に対して、元の連立一次方程式の残差の 2 乗ノルムを最小化することと前処理後の連立一次方程式の残差の 2 乗ノルムを最小化することを等価にすることが、左前処理より容易な右前処理を用いる。本論文では、右前処理 MINRES 法の定式化を行い、特に、通常、CG 法の両側前処理の計算量を削減するのに用いられる Eisenstat's trick を SSOR 右前処理に適用した MINRES 法を提案し、同手法の有効性を実問題を含めた数値実験により検証する。

1. はじめに

$A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ を大規模疎で半正定値対称行列, $\mathbf{x}, \mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$ とし, 連立一次方程式

$$(1.1) \quad A\mathbf{x} = \mathbf{b}$$

または最小二乗問題

$$(1.2) \quad \min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \|\mathbf{b} - A\mathbf{x}\|_2$$

を数値的に解くことを考える。ここで、右辺ベクトル $\mathbf{b}$ は $R(A)$ (A の像空間) に必ずしも属しないと仮定する。以降、連立一次方程式の右辺ベクトル $\mathbf{b}$ が $R(A)$ に属しているか否かで (1.1), (1.2) を以下のように呼ぶ。

- consistent : $\mathbf{b} \in R(A)$
- inconsistent : $\mathbf{b} \notin R(A)$

1.1 応用分野 1

(1.1) の応用分野の一つとして、次の準定常電磁場解析が挙げられる ([4]).

$$\begin{aligned}\nabla \times (\mu \nabla \times \vec{A}_m) + j\omega\sigma(\vec{A}_m + \nabla V) &= \vec{J}_0 \\ j\omega \nabla \cdot \sigma(\vec{A}_m + \nabla V) &= 0 \\ \nabla \cdot \vec{J}_0 &= 0\end{aligned}$$

ここで $\vec{A}_m$ はベクトルポテンシャル, V はスカラポテンシャル, $\vec{J}_0$ は強制電流, μ は磁気抵抗率, ω は角周波数, σ は導電率を表す. この偏微分方程式を辺有限要素法で離散化し, $\vec{A}_m$, V を未知数とした時, 係数行列が半正定値で consistent な連立一次方程式が得られる.

1.2 応用分野 2

(1.1), (1.2) の応用分野の一つとして、次の静磁場解析が挙げられる ([5]).

$$(1.3) \quad \nabla \times (\mu^{-1} \nabla \times \vec{A}_m) = \vec{J} \text{ in } \Omega \in \mathbb{R}^d$$

ここで $\vec{A}_m$ はベクトルポテンシャル, $\vec{J}$ はコイル電流密度ベクトル, μ は透磁率, Ω は解析領域を表す. ここで, $\nabla \cdot \vec{J} = 0 \text{ in } \Omega$ を満たさない $\vec{J}$ に対して, (1.3) を辺有限要素法で離散化すると, $\vec{A}_m$ を未知数とした時, 係数行列が半正定値で inconsistent な連立一次方程式が得られる.

2. MINRES 法と前処理

文献 [2] より, 係数行列 A が対称な場合は, MINRES 法は GMRES 法と数学的に等価であり, $R(A) = R(A^T)$ なので, GMRES 法が破綻なく収束するための必要十分条件を満たすので, MINRES 法も特異系に対し, 破綻なく収束する.

2.1 MINRES 法

Krylov 部分空間を $K_k(A, r_0) = \text{span}(r_0, Ar_0, \dots, A^{k-1}r_0)$ とする. ここで x_0 は反復法における初期近似解, $r_0 = b - Ax_0$ は初期残差ベクトルを意味する. MINRES 法は係数行列が対称な連立一次方程式に対し,

$$x_k \in x_0 + K_k(A, r_0) \text{ s.t. } \|b - Ax_k\|_2 = \min_x \|b - Ax\|_2$$

となる解 x_k を求める反復法である. そのアルゴリズムを **Algorithm 1** に示す.

Algorithm 1 : MINRES method

```

1.  $\mathbf{v}^{(0)} = \mathbf{0}$ ,  $\mathbf{w}^{(0)} = \mathbf{0}$ ,  $\mathbf{w}^{(1)} = \mathbf{0}$ 
2. Choose initial approximate solution  $\mathbf{x}^{(0)}$ , compute  $\mathbf{v}^{(1)} = \mathbf{b} - A\mathbf{x}^{(0)}$ 
3. Set  $\gamma_1 = \|\mathbf{v}^{(1)}\|_2$ , set  $\eta = \gamma_1$ ,  $s_0 = s_1 = 0$ ,  $c_0 = c_1 = 1$ 
4. for  $j = 1$  until convergence do
5:    $\mathbf{v}^{(j)} = \mathbf{v}^{(j-1)} / \gamma_{j-1}$ 
6:    $\delta_j = (A\mathbf{v}^{(j)}, \mathbf{v}^{(j)})$ 
7:    $\mathbf{v}^{(j+1)} = A\mathbf{v}^{(j)} - \delta_j \mathbf{v}^{(j)} - \gamma_j \mathbf{v}^{(j-1)}$ 
8:    $\gamma_{j+1} = \|\mathbf{v}^{(j+1)}\|_2$ 
9:    $\alpha_0 = c_j \delta_j - c_{j-1} s_j \gamma_j$ ,  $\alpha_1 = \sqrt{\alpha_0^2 + \gamma_{j+1}^2}$ 
10:   $\alpha_2 = s_j \delta_j + c_{j-1} c_j \gamma_j$ ,  $\alpha_3 = s_{j-1} \gamma_j$ 
11:   $c_{j+1} = \alpha_0 / \alpha_1$ ,  $s_{j+1} = \gamma_{j+1} / \alpha_1$ 
12:   $\mathbf{w}^{(j+1)} = (\mathbf{v}^{(j)} - \alpha_3 \mathbf{w}^{(j-1)} - \alpha_2 \mathbf{w}^{(j)}) / \alpha_1$ 
13:   $\mathbf{x}^{(j)} = \mathbf{x}^{(j-1)} + c_{j+1} \eta \mathbf{w}^{(j+1)}$ 
14:   $\eta = -s_{j+1} \eta$ 
15:   $\mathbf{r}_j = \mathbf{b} - A\mathbf{x}^{(j)}$ 
16:  check convergence
16: end do

```

2.2 右前処理, 左前処理の選択

MINRES 法が Krylov 部分空間において残差の 2 乗ノルムを最小化する解を求める手法であることは, 2.1 章で述べた. 特異系が consistent である場合は, 行列 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ は特異行列, 行列 $B \in \mathbb{R}^{n \times n}$ は正則行列としたとき,

$$(2.1) \quad A\mathbf{x} = \mathbf{b} \Leftrightarrow B A \mathbf{x} = B \mathbf{b} \Leftrightarrow A B \mathbf{z} = \mathbf{b}, \quad (\mathbf{x} = B \mathbf{z})$$

が成立する. 式 (2.1) が意味することは, 特異な係数行列をもつ, consistent な連立一次方程式に対して左前処理, 右前処理をしても前処理行列が正則であるという条件のみで問題の等価性が保たれることである

一方で特異系が inconsistent である場合の左前処理, 右前処理の選択について議論するために以下の 2 つの定理 2.1, 2.2 を用いる.

文献 [1] に残差の 2 乗ノルムを最小化する解を見つける問題に関して, 行列 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ が与えられたとき, 行列 $B \in \mathbb{R}^{n \times m}$ を右前処理とした場合については定理 2.1 が示されている.

定理 2.1 ([1], 2010) (右前処理の場合) 行列 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $B \in \mathbb{R}^{n \times m}$ に対して,

$$(2.2) \quad \min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \|\mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}\|_2 = \min_{\mathbf{z} \in \mathbb{R}^m} \|\mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{B}\mathbf{z}\|_2 \text{ for } \forall \mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$$

の必要十分条件は $R(\mathbf{A}) = R(\mathbf{A}\mathbf{B})$ である.

一方, 行列 $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{n \times m}$ を左前処理とした場合については定理 2.2 が示されている.

定理 2.2 ([1], 2010) (左前処理の場合) 行列 $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}, \mathbf{B} \in \mathbb{R}^{n \times m}$ に対して,

$\|\mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}^*\|_2 = \min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \|\mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}\|_2 \Leftrightarrow \|\mathbf{B}\mathbf{b} - \mathbf{B}\mathbf{A}\mathbf{x}^*\|_2 = \min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \|\mathbf{B}\mathbf{b} - \mathbf{B}\mathbf{A}\mathbf{x}\|_2 \text{ for } \forall \mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$
 の必要十分条件は $R(\mathbf{A}) = R(\mathbf{B}^T \mathbf{B}\mathbf{A})$ である.

そこで, 定理 2.1, 2.2 を用いて, 特異な係数行列をもつ連立一次方程式が inconsistent な場合について右前処理か左前処理にすべきかを議論する.

$\mathbf{A}$ が特異行列で $\mathbf{B}$ が正則行列の場合,

- $R(\mathbf{A}) = R(\mathbf{A}\mathbf{B})$ は成立するが,
- $R(\mathbf{A}) = R(\mathbf{B}^T \mathbf{B}\mathbf{A})$ は必ずしも成立しない.

さて, 右前処理の場合は, 定理 2.1 から, 特異行列 $\mathbf{A}$ を係数行列とする連立一次方程式に対して, $\mathbf{B}$ が正則行列でありさえすれば, 行列 $\mathbf{B}$ を前処理行列とした右前処理を用いれば元の問題 (1.1) または (1.2) の等価性は保つことができる.

一方で左前処理の場合は, 元の連立一次方程式の係数行列 $\mathbf{A}$ が特異で inconsistent な場合 $\mathbf{B}$ が正則行列という条件だけでは, $R(\mathbf{A}) = R(\mathbf{B}^T \mathbf{B}\mathbf{A})$ は必ずしも成立しないため, 問題の等価性が保たれるとは限らない.

そこで本研究では特異な係数行列をもつ連立一次方程式に前処理を適用する場合, inconsistent な場合でも $\mathbf{B}$ を正則行列とするだけで問題の等価性が保たれる右前処理を採用することとし, 以降では consistent な場合も含めて右前処理について論じる.

2.3 右前処理 MINRES 法

$\mathbf{M}$ を対称正定値行列とし, 元の最小二乗問題 $\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \|\mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}\|_2$ に対し, 右前処理した特異な係数行列をもつ最小二乗問題

$$(2.3) \quad \min_{\mathbf{z} \in \mathbb{R}^n} \|\mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{M}^{-1}\mathbf{z}\|_2$$

を考える. $\mathbf{M}^{-1}$ は正定値行列であるので, 正則行列である. したがって $R(\mathbf{A}) = R(\mathbf{A}\mathbf{M}^{-1})$ を満たすので $\mathbf{B} = \mathbf{M}^{-1}$ として, 式 (2.2) が成立し, 式 (2.3) と式 (1.2) は等価である.

しかしながら, 式 (2.3) において行列 $\mathbf{A}$ と $\mathbf{M}$ がそれぞれ対称であっても, 係数行列 $\mathbf{A}\mathbf{M}^{-1}$ は対称とは限らない. このため, (特異な係数行列をもつ最小二乗問題)(2.3) に $\mathbb{R}^n$ の標準内積を使った通常の MINRES 法は適用できない.

そこで式 (2.3) に MINRES 法を適用して、右前処理 MINRES 法のアルゴリズムを導出するために以下のポイントを利用する。ただし、

定義 2.3 $(x, y)_{M^{-1}} = x^T M^{-1} y$

と定義する。行列 M が対称正定値なため、上記は内積の条件を満たしている。ここで A は対称なので $(AM^{-1}x, y)_{M^{-1}} = (x, AM^{-1}y)_{M^{-1}}$ より、右前処理した係数行列 AM^{-1} は行列 M^{-1} に関する内積について自己随伴なので、行列 M^{-1} に関する内積空間における MINRES 法を最小二乗問題 (2.3) に適用することが可能である。このようにして導出した右前処理 MINRES 法のアルゴリズムの概要は **Algorithm 2** のようになる。

Algorithm 2 : Right preconditioned MINRES (essence)

1: Find

$$z_k \in Mx_0 + K_k(AM^{-1}, r_0) \text{ s.t. } \|b - AM^{-1}z_k\|_{M^{-1}} = \min_{z \in \mathbb{R}^n} \|b - AM^{-1}z\|_{M^{-1}}$$

2: Compute the solution $x_k = M^{-1}z_k$

右前処理 MINRES 法では M^{-1} に関するノルムでの残差ノルムを最小化する。したがって、inconsistent な場合は一般に元の残差の 2 ノルム最小の解とは異なる解を与える。さらに、**Algorithm 3** に定式化した右前処理 MINRES 法のアルゴリズムを示す。

前処理なし MINRES 法ならびに右前処理 MINRES 法と、残差ベクトル $r = b - Ax = b - AM^{-1}z$ について以下の命題 2.4 が成立する。

命題 2.4 前処理なし MINRES 法では $\|r\|_2$ を最小化しているのに対し、右前処理 MINRES 法では $\|M^{-\frac{1}{2}}r\|_2$ を最小化しており、これは $AM^{-1}r = 0$ を解くことと等価になる。

特に、特異な係数行列をもつ連立一次方程式 $Ax = b$ が consistent な場合、MINRES 法、右前処理 MINRES 法によって得られる解の残差ベクトルは 0 になる。

2.4 収束判定方法

特異な係数行列をもつ連立一次方程式が consistent な場合は **Algorithm 3** にて $\frac{\|r_j\|_2}{\|v^{(1)}\|_2}$ の値が設定した値より小さくなった場合、右前処理 MINRES 法は収束したと判定する。

命題 2.4 より、 $\frac{\|AM^{-1}r_j\|_2}{\|AM^{-1}v^{(1)}\|_2}$ の値が設定した値より小さくなった場合、右前処理 MINRES 法は収束したと判定する。なお、初期ベクトルを 0 とした場合、 $v^{(1)}$ は b と同一ベクトルである。

Algorithm 3 : Right preconditioned MINRES method

```

1.  $\mathbf{v}^{(0)} = \mathbf{0}, \mathbf{w}^{(0)} = \mathbf{0}, \mathbf{w}^{(1)} = \mathbf{0}$ 
2: Choose initial approximate solution  $\mathbf{x}^{(0)}$ , compute  $\mathbf{v}^{(1)} = \mathbf{b} - A\mathbf{x}^{(0)}$ 
3:  $\mathbf{u}^{(1)} = M^{-1}\mathbf{v}^{(1)}$ 
4 : Set  $\gamma_1 = \sqrt{(\mathbf{v}^{(1)}, \mathbf{u}^{(1)})}$ , set  $\eta = \gamma_1, s_0 = s_1 = 0, c_0 = c_1 = 1$ 
5: for  $j = 1$  until convergence do
6:      $\mathbf{v}^{(j)} := \mathbf{v}^{(j)}/\gamma_j, \mathbf{u}^{(j)} := \mathbf{u}^{(j)}/\gamma_j$ 
7:      $\delta_j = (\mathbf{u}^{(j)}, A\mathbf{u}^{(j)})$ 
8:      $\mathbf{v}^{(j+1)} = A\mathbf{u}^{(j)} - \delta_j\mathbf{v}^{(j)} - \gamma_j\mathbf{v}^{(j-1)}$ 
9 :      $\mathbf{u}^{(j+1)} = M^{-1}\mathbf{v}^{(j+1)}$ 
10 :      $\gamma_{j+1} = \sqrt{(\mathbf{v}^{(j+1)}, \mathbf{u}^{(j+1)})}$ 
11 :      $\alpha_0 = c_j\delta_j - c_{j-1}s_j\gamma_j, \alpha_1 = \sqrt{\alpha_0^2 + \gamma_{j+1}^2}$ 
12:      $\alpha_2 = s_j\delta_j + c_{j-1}c_j\gamma_j, \alpha_3 = s_{j-1}\gamma_j$ 
13:      $c_{j+1} = \alpha_0/\alpha_1, s_{j+1} = \gamma_{j+1}/\alpha_1$ 
14:      $\mathbf{w}^{(j+1)} = (\mathbf{u}^{(j)} - \alpha_3\mathbf{w}^{(j-1)} - \alpha_2\mathbf{w}^{(j)})/\alpha_1$ 
15:      $\mathbf{x}^{(j)} = \mathbf{x}^{(j-1)} + c_{j+1}\eta\mathbf{w}^{(j+1)}$ 
16 :      $\eta = -s_{j+1}\eta$ 
17:      $\mathbf{r}_j = \mathbf{b} - A\mathbf{x}^{(j)}$ 
18:     check convergence
19:end do

```

3. E-SSOR 右前処理 MINRES 法

連立一次方程式の係数行列が正定値対称行列の場合、SSOR 法を内部反復数 1 回で用いた場合の前処理行列 M は実数の加速パラメータを ω とした時、以下の式で与えられる。ただし、係数行列 $A = L + D_0 + L^T$ とし、 L は A の狭義下三角部分、 D_0 は A の対角部分とする。正定値対称行列の場合、対角行列 D_0 の全ての成分は正の実数なので D_0^{-1} 、 $D_0^{-\frac{1}{2}}$ が存在する。

$$(3.1) \quad M = \frac{\omega}{(2-\omega)}(L + \frac{D_0}{\omega})D_0^{-1}(L^T + \frac{D_0}{\omega})$$

しかしながら、係数行列が半正定値の場合、対角成分は 0 以上である。そこで半正定値系に対し、SSOR 法を反復数 1 回にして、MINRES 法の前処理として用いる場合、対角行列 D の成分を D_0 の成分が正の値の場合はその値をそのまま定義するが、非正である対角成分に対しては、正の値に置き換え、行列 D を正の対角行列として定義する。その場合前処理行列 M は以下のように定義し、特異な連立一次方程式への SSOR 前処理行列として

用いる.

$$(3.2) \quad M = \frac{\omega}{(2-\omega)}(L + \frac{D}{\omega})D^{-1}(L^T + \frac{D}{\omega})$$

行列 M が正定値行列であれば, M は正則なので定理 2.1 の式 (2.2) の必要十分条件 $R(A) = R(AM^{-1})$ は成立する. また右前処理 MINRES 法の定式化にあたり, 行列 M^{-1} に関する内積が行列 M^{-1} が正定値行列であれば定義できる.

対角行列 D の全ての対角成分が正であるため, 行列 $(L + \frac{D}{\omega})$ は正則行列であり, シルベスターの慣性則から, 行列 $(L + \frac{D}{\omega})D^{-1}(L^T + \frac{D}{\omega})$ の固有値は全て正になる. したがって, $\frac{\omega}{(2-\omega)}$ が正であること, すなわち $\omega \in (0, 2)$ であることが, 式 (3.2) で定義される行列 M が正定値行列であるための必要十分条件である.

ところで, CG 法で SSOR 法の反復 1 回を前処理として用いる場合, Eisenstat's trick を用いると (以下, E-SSOR 前処理と略記する) 行列ベクトル積の計算が削減され, かつ収束性が変わらないので結果として CPU 時間は短縮されることが知られている [3].

つまり, 連立一次方程式 (1.1) を

$$D^{-1}[(D+L)^{-1}A(D+L^T)^{-1}](D+L^T)x = D^{-1}(D+L)^{-1}b$$

のように両側から前処理し, CG 法を適用する. ここで $\hat{A} = [(D+L)^{-1}A(D+L^T)^{-1}]$ としたとき, CG 法での行列ベクトル積を

$$\hat{A}v = (D+L^T)^{-1}v + (D+L)^{-1}[v - (2D - D_0)(D+L^T)^{-1}v]$$

という形にする. すなわち, 行列ベクトル積を前進後退代入, 対角行列とベクトル積という演算に置き換えることで計算量を削減する手法が Eisenstat's trick である.

この手法をわれわれの右前処理 MINRES 法にも適用したい. しかしながら, E-SSOR 前処理を用いる際は, 両側前処理にしないといけないので, ここまで議論してきた右前処理 MINRES 法に直接は適用できない. 一方で両側前処理 MINRES 法を inconsistent な特異な係数行列をもつ連立一次方程式に適用すると, 左前処理が入るため, 前章にて述べたように, 前処理行列が正則という条件だけでは問題の等価性が保たれるとは限らない.

3.1 E-SSOR 右前処理 MINRES 法の導出

Algorithm 3 の右前処理 MINRES 法における $v^{(j)}$ に対して, $\tilde{v}^{(j)} := D^{\frac{1}{2}}(L + \frac{D}{\omega})^{-1}v^{(j)}$ を定義する.

Algorithm 3 の導出にあたり, 行列 M^{-1} の内積に関して行列 AM^{-1} が自己随伴であることを用いた. 具体的には **Algorithm 3** の 7 行目の δ_j の計算にあたり,

$$(3.3) \quad \begin{aligned} \delta_j &= (AM^{-1}v^{(j)}, v^{(j)})_{M^{-1}} \\ &= ((M^{-1}v^{(j)})^T, AM^{-1}v^{(j)}) \\ &= (u^{(j)}, Au^{(j)}) \end{aligned}$$

としていた. この δ_j の計算では, 右前処理 MINRES 法なので, 一度 $u^{(j)} = M^{-1}v^{(j)}$ を計算した後, $Au^{(j)}$ を計算する形になる. 行列 M を式 (3.2) で定義した場合, 両側前処理の

形を導出できず、Eisenstat's trick は使えないので、行列 M^{-1} によって右前処理して作成したベクトルと行列 A との積を計算する形になる。

しかしながら、 $\tilde{\mathbf{v}}^{(j)} := D^{\frac{1}{2}}(L + \frac{D}{\omega})^{-1}\mathbf{v}^{(j)}$ を用いると、式 (3.3) は以下のように変形できる。

$$\delta_j = (\frac{2-\omega}{\omega})^2 \tilde{\mathbf{v}}^{(j)\top} D^{\frac{1}{2}}(L + \frac{D}{\omega})^{-1} A (L^T + \frac{D}{\omega})^{-1} D^{\frac{1}{2}} \tilde{\mathbf{v}}^{(j)}$$

ここで行列 $\tilde{A} = D^{\frac{1}{2}}(L + \frac{D}{\omega})^{-1} A (L^T + \frac{D}{\omega})^{-1} D^{\frac{1}{2}}$ と定義すると、式 (3.4) は、

$$\delta_j = (\frac{2-\omega}{\omega})^2 (\tilde{\mathbf{v}}^{(j)}, \tilde{A} \tilde{\mathbf{v}}^{(j)})$$

となり、 $\tilde{A} \tilde{\mathbf{v}}^{(j)}$ の計算には $\tilde{A} = D^{\frac{1}{2}}(L + \frac{D}{\omega})^{-1} A (L^T + \frac{D}{\omega})^{-1} D^{\frac{1}{2}}$ であることから、Eisenstat's trick を使うことができる。即ち

$$(3.4) \quad \tilde{A} \tilde{\mathbf{v}}^{(j)} = D^{\frac{1}{2}} \{ (L^T + \frac{D}{\omega})^{-1} + (L + \frac{D}{\omega})^{-1} \{ I_n - (\frac{2D}{\omega} - D_0)(L^T + \frac{D}{\omega})^{-1} \} \} D^{\frac{1}{2}} \tilde{\mathbf{v}}^{(j)}$$

とできる。ここで I_n は n 次の単位行列を意味する。式 (3.4) により、 $\tilde{A} \tilde{\mathbf{v}}^{(j)}$ という行列ベクトル積を対角行列とベクトルの積、前進代入、後退代入の形に置き換えて計算量を削減するのが Eisenstat's trick である。式 (3.4) を計算する過程で、 $\mathbf{y}^{(j)} = (L^T + \frac{D}{\omega})^{-1} D^{\frac{1}{2}} \tilde{\mathbf{v}}^{(j)}$ と定義する。

これらの議論から右前処理 MINRES 法の **Algorithm 3** において、前処理行列 M を内部反復数 1 回の SSOR 前処理行列の式 (3.2) にしたときの E-SSOR 右前処理 MINRES 法のアルゴリズムを **Algorithm 4** に示す。

4. 数値実験・結果

E-SSOR 右前処理 MINRES 法を 1.2 節で述べた静磁場解析で扱われる係数行列が半正定値対称行列で、inconsistent な連立一次方程式に適用し、前処理なし MINRES 法 (以後 MINRES 法と記述)、スケーリング右前処理 MINRES 法と、性能ならびに収束性を比較する。いずれの手法でも初期ベクトルを $\mathbf{0}$ とした。本行列データならびに右辺ベクトルデータは北海道大学五十嵐一先生からご提供いただいた。テスト問題の次元数は、5,362 である。収束判定条件は、 $\frac{\|AM^{-1}\mathbf{r}_j\|_2}{\|AM^{-1}\mathbf{b}\|_2} < 10^{-11}$ と設定する。

数値実験では、CPU: Intel(R) Xeon(R) CPU ES-2630 (2.30GHz); OS: Cent OS 6.3 の計算機において、反復法を FORTRAN90 で実装し、全て倍精度演算で行った。またコンパイラは Intel Fortran 13.0.1 を使用した。Table1 に各手法の反復数と CPU 時間を示す。なお、E-SSOR 右前処理 MINRES 法の加速パラメータ ω は 1.0 を用いた。

E-SSOR 右前処理 MINRES 法は、MINRES 法と比較し 2.66 倍、スケーリング右前処理法 MINRES 法と比較し、1.48 倍高速であった。

Fig. 1 に相対残差 $\frac{\|AM^{-1}\mathbf{r}_j\|_2}{\|AM^{-1}\mathbf{b}\|_2}$ vs. 反復数のグラフを示す。○が前処理なし MINRES 法、△がスケーリング右前処理 MINRES 法、★が E-SSOR 右前処理 MINRES 法を表す。

Algorithm 4 : Eisenstat SSOR for right preconditioned MINRES

-
1. $\tilde{\mathbf{v}}^{(0)} = \mathbf{0}, \mathbf{w}^{(0)} = \mathbf{0}, \mathbf{w}^{(1)} = \mathbf{0}$
 - 2: Choose initial approximate solution $\mathbf{x}^{(0)}$, compute $\mathbf{v}^{(1)} = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}^{(0)}$
 - 3: $\tilde{\mathbf{v}}^{(1)} = D^{\frac{1}{2}}(L + D/\omega)^{-1}\mathbf{v}^{(1)}$
 - 4 : Set $\gamma_1 = \sqrt{\frac{2-\omega}{\omega}}(\tilde{\mathbf{v}}^{(1)}, \tilde{\mathbf{v}}^{(1)})$, set $\eta = \gamma_1, s_0 = s_1 = 0, c_0 = c_1 = 1$
 - 5: for $j = 1$ until convergence do
 - 6: $\tilde{\mathbf{v}}^{(j)} := \tilde{\mathbf{v}}^{(j)} / \gamma_j$
 - 7: $\mathbf{u}^{(j)} = \tilde{\mathbf{A}}\tilde{\mathbf{v}}^{(j)}$
 - 8: $\delta_j = (\frac{2-\omega}{\omega})^2(\tilde{\mathbf{v}}^{(j)}, \mathbf{u}^{(j)})$
 - 9: $\tilde{\mathbf{v}}^{(j+1)} = (\frac{2-\omega}{\omega})\mathbf{u}^{(j)} - \delta_j\tilde{\mathbf{v}}^{(j)} - \gamma_j\tilde{\mathbf{v}}^{(j-1)}$
 - 10 : $\gamma_{j+1} = \sqrt{(\frac{2-\omega}{\omega})(\tilde{\mathbf{v}}^{(j+1)}, \tilde{\mathbf{v}}^{(j+1)})}$
 - 11 : $\alpha_0 = c_j\delta_j - c_{j-1}s_j\gamma_j, \alpha_1 = \sqrt{\alpha_0^2 + \gamma_{j+1}^2}$
 - 12: $\alpha_2 = s_j\delta_j + c_{j-1}c_j\gamma_j, \alpha_3 = s_{j-1}\gamma_j$
 - 13: $c_{j+1} = \alpha_0/\alpha_1, s_{j+1} = \gamma_{j+1}/\alpha_1$
 - 14: $\mathbf{w}^{(j+1)} = ((\frac{2-\omega}{\omega})\mathbf{y}^{(j)} - \alpha_3\mathbf{w}^{(j-1)} - \alpha_2\mathbf{w}^{(j)})/\alpha_1$
 - 15: $\mathbf{x}^{(j)} = \mathbf{x}^{(j-1)} + c_{j+1}\eta\mathbf{w}^{(j+1)}$
 - 16 : $\eta = -s_{j+1}\eta$
 - 17: $\mathbf{r}_j = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}^{(j)}$
 - 18: check convergence
 - 19: end do
-

Table 1. Computation results for an inconsistent problem (Iter: number of iterations, Tno: computation time not including the computation of the relative residual norm) The values in () are the ratio compared to MINRES with E-SSOR right preconditioning.

Convergence criterion: $\frac{\|\mathbf{A}\mathbf{M}^{-1}\mathbf{r}_j\|_2}{\|\mathbf{A}\mathbf{M}^{-1}\mathbf{b}\|_2} < 10^{-11}$

Method	Iter	Tno [sec]
MINRES without preconditioning	381 (5.95)	0.066 (2.66)
MINRES with scaling right preconditioning	174 (2.72)	0.037 (1.48)
MINRES with E-SSOR right preconditioning	64 (1)	0.025 (1)

5. まとめ

対称半正定値な係数行列をもつ連立一次方程式に対して, inconsistent な場合にも最小二乗解を与える MINRES 法を採用し, inconsistent な場合を考慮すると, 右前処理の方が左前処理より問題の等価性を実現しやすいことを示し, 右前処理 MINRES 法の定式化

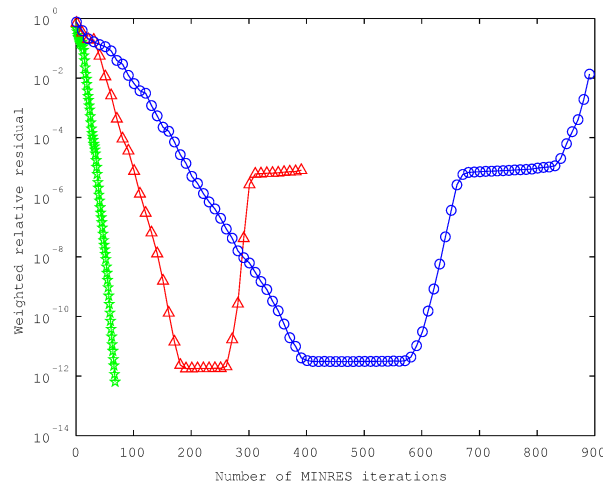


Fig. 1. $\frac{\|AM^{-1}r_j\|_2}{\|AM^{-1}b\|_2}$ vs. number of iterations for MINRES without preconditioning($\circ$), MINRES with scaling right preconditioning (Δ), and MINRES with E-SSOR right preconditioning ($\star$) for an inconsistent problem

を行った。またさらに、前処理として、CG法の両側前処理の計算量を削減するのに用いられる Eisenstat's trick を SSOR 右前処理に適用した MINRES 法 (E-SSOR 右前処理 MINRES 法) を提案し、数値実験ではスケーリング右前処理 MINRES 法より速く収束した。

参考文献

- [1] Hayami, K., Yin, J.-F., and Ito, T., GMRES methods for least squares problems, *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, **31**(2010), 2400–2430.
- [2] Hayami, K., and Sugihara, M., A geometric view of Krylov subspace methods on singular systems, *Numerical Linear Algebra with Applications.*, **18**(2011), 449–469.
- [3] Eisenstat, S. C., Efficient implementation of a class of preconditioned conjugate gradient methods, *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, **2**(1981), 1–4.
- [4] Igarashi, H., and Honma, T., On convergence of ICCG applied to finite element equation for quasi-static fields, *IEEE Trans. Magn.*, **38**(2002), 565–568.
- [5] Igarashi, H., On the property of the curl-curl matrix in finite element analysis with edge elements, *IEEE Trans. Magn.*, **37**(2001), 3129–3132.