

対称用改訂CR法の収束性

日立ソフト 後 保 範 (Yasunori Ushiro)

1. はじめに

差分法や有限要素法で発生する、大次元対称疎行列を係数とする連立一次方程式は不完全コレスキー共役勾配法 (ICCG 法) で高速に計算できる。しかし、CG 法は残差ノルムが単調減少しないため、要求精度が高くない場合に、反復回数が相対的に多くなる。そこで対称行列に対して残差が単調減少する解法を提案した。しかし、本方法は筑波大学小柳教授から対称CR法そのものではないかとの御指摘をいただき、検討した結果、対称CR法と一致することが判明した。このためここでは、本解法の性質の証明と、それが対称CR法に一致していることを示すのを主目的とする。又本解法は戸川隼人著¹⁾に共役勾配法の変形として示されていた。その中では「 AP_k, AR_k の2回乗算が必要なので実用的でない」と指摘されている。しかし、 $AP_{k+1} = AR_{k+1} + \beta_k AP_k$ を使用すると反復

計算の中では Ar_{k+1} の乗算一回だけで済ますことができる。

2. 提案した解法のアルゴリズム及び性質

(1) アルゴリズム

対称行列 A を係数とする連立一次方程式 $Ax=b$ の解の計算

初期値 x_0 を適当に与える。

$$r_0 = b - Ax_0, \quad P_0 = r_0$$

$k = 0, 1, 2, \dots$, と収束まで反復

$$\alpha_k = (r_k, AP_k) / (AP_k, AP_k)$$

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k P_k$$

$$r_{k+1} = r_k - \alpha_k AP_k$$

$$\beta_k = (r_{k+1}, Ar_{k+1}) / (r_k, Ar_k)$$

$$P_{k+1} = r_{k+1} + \beta_k P_k$$

CR法では $\beta_k = -(Ar_{k+1}, AP_k) / (AP_k, AP_k)$ であるが、 A が対称行列の場合は $\beta_k = (r_{k+1}, Ar_{k+1}) / (r_k, Ar_k)$ と一致する。

(2) 性質

(a) 残差ノルム (r, r) が単調減少する。

(b) $(r_i, Ar_k) = 0 \quad (i \neq k)$

これで、本解法は有限回の反復で収束

$$(c) \quad (AP_i, AP_k) = 0 \quad (i \neq k)$$

$$(d) \quad (Ar_i, AP_k) = 0 \quad (i \neq k, k+1)$$

$$(e) \quad (Ar_k, AP_k) = (AP_k, AP_k)$$

$$(f) \quad (P_k, Ar_i) = \begin{cases} 0 & (k < i) \\ (r_k, Ar_k) & (k \geq i) \end{cases}$$

3. 性質の証明

(1) 性質 (a) の説明

$$r_{k+1} = r_k - \alpha_k AP_k \quad \text{で}$$

$f(x_{k+1}) = (r_{k+1}, r_{k+1})$ を最小にするよう α_k を定める。

$$\begin{aligned} f(x_{k+1}) &= (r_{k+1}, r_{k+1}) = (r_k - \alpha_k AP_k, r_k - \alpha_k AP_k) \\ &= (r_k, r_k) - 2\alpha_k (r_k, AP_k) + \alpha_k^2 (AP_k, AP_k) \end{aligned}$$

これを最小にする α_k は

$$\alpha_k = (r_k, AP_k) / (AP_k, AP_k) ; \text{本解法と同じ}$$

よって (r, r) は単調減少する。

(2) 性質 (b) ~ (f) の証明の準備

$$P_k = r_k + \beta_{k-1} \cdot P_{k-1}$$

$$= r_k + \frac{(r_k, Ar_k)}{(r_{k-1}, Ar_{k-1})} P_{k-1}$$

$$= \frac{(r_k, Ar_k)}{(r_k, Ar_k)} r_k + \frac{(r_k, Ar_k)}{(r_{k-1}, Ar_{k-1})} \left\{ r_{k-1} + \frac{(r_{k-1}, Ar_{k-1})}{(r_{k-2}, Ar_{k-2})} P_{k-2} \right\}$$

$$= \sum_{j=0}^k \frac{(r_k, Ar_k)}{(r_j, Ar_j)} r_j$$

(3) 数学的帰納法で性質 (b) ~ (f) の証明

「 $r_0, r_1, \dots, r_k$ 及び $P_0, P_1, \dots, P_{k-1}$ に対して
性質 (b) ~ (f) が成立すると仮定する。

(f) の証明

性質 (b) を使用

$$(P_k, Ar_i) = \sum_{j=0}^k \frac{(r_k, Ar_k)}{(r_j, Ar_j)} (r_j, Ar_i) = \begin{cases} 0 & (k < i) \\ (r_k, Ar_k) & (k \geq i) \end{cases}$$

(c) の証明

$$\begin{aligned} (Ar_{i+1}, P_k) &= (A(r_i - \alpha_i AP_i), P_k) \\ &= (Ar_i, P_k) - \alpha_i (AP_i, AP_k) \end{aligned}$$

$k > i$ ならば性質 (f) を使用して

$$(Ar_{i+1}, P_k) = (r_k, Ar_k)$$

$$(Ar_i, P_k) = (r_k, Ar_k)$$

よって $\alpha_i \neq 0$ とすると

$$(AP_i, AP_k) = 0 \quad (i < k) \Rightarrow (i \neq k)$$

$\alpha_i = 0$ のときは紙面の都合で省略

(e) の証明

性質 (c) を使用

$$\begin{aligned} (AP_k, AP_k) &= (Ar_k, AP_k) + \beta_{k-1} (AP_{k-1}, AP_k) \\ &= (Ar_k, AP_k) \end{aligned}$$

(d) の証明

$$(AP_i, AP_k) = (Ar_i, AP_k) + \beta_{i-1} (AP_{i-1}, AP_k)$$

$i \neq k, k+1$ ならば性質 (c) から

$$(AP_i, AP_k) = 0, (AP_{i-1}, AP_k) = 0$$

$$\text{よって } (Ar_i, AP_k) = 0 \quad (i = k, k+1)$$

(b) の証明

$$(Ar_i, r_{k+1}) = (Ar_i, r_k) - \alpha_k (Ar_i, AP_k)$$

$i \neq k, k+1$ ならば性質 (b) 及び (d) から右辺はともにゼロ。

$$\text{よって } (Ar_i, r_{k+1}) = 0 \quad (i \neq k, k+1)$$

$$(Ar_k, r_{k+1}) = (Ar_k, r_k) - \frac{(r_k, AP_k)}{(AP_k, AP_k)} (Ar_k, AP_k) \quad \text{性質 (e) を使用}$$

$$= (Ar_k, r_k) - (Ar_k, r_k) \quad \text{性質 (f) を使用}$$

$$= (Ar_k, r_k) - (Ar_k, r_k) = 0$$

$$\text{従って } (r_i, Ar_k) = 0 \quad (i \neq k)$$

4. 本解法が対称CR法に一致することの証明

$$\beta_k = \frac{(r_{k+1}, Ar_{k+1})}{(r_k, Ar_k)} \quad \text{と} \quad \tilde{\beta}_k = - \frac{(Ar_{k+1}, AP_k)}{(AP_k, AP_k)}$$

が一致することを証明すればよい。

$$(Ar_{k+1}, r_{k+1}) = (Ar_{k+1}, r_k) - \alpha_k (Ar_{k+1}, AP_k)$$

$$= (Ar_{k+1}, r_k) - \frac{(r_k, AP_k)}{(AP_k, AP_k)} (Ar_{k+1}, AP_k)$$

$$= (Ar_{k+1}, r_k) + (r_k, AP_k) \tilde{\beta}_k$$

性質 (b) より $(Ar_{k+1}, r_k) = 0$, 性質 (f) より $(r_k, AP_k) = (r_k, Ar_k)$

従って

$$\tilde{\beta} = \frac{(r_{k+1}, Ar_{k+1})}{(r_k, Ar_k)} = \beta$$

よって本解法は対称CR法に一致する。

5. 不完全コレスキー付き提案解法の計算手順

行列 A を不完全 LDL^T 分解する

$$P = r = (LDL^T)^{-1}(b - Ax)$$

$$\underline{e = Ar}, \quad \mu_1 = (r, e)$$

収束するまで以下を反復計算する

$$g = (LDL^T)^{-1}e$$

$$\alpha = \mu_1 / (g, e)$$

$$x = x + \alpha P$$

$$r = r - \alpha g$$

$$g = Ar, \quad \mu_2 = (r, g)$$

$$\beta = \mu_2 / \mu_1, \quad \mu_1 = \mu_2$$

$$P = r + \beta P$$

$$\underline{e = g + \beta e}$$

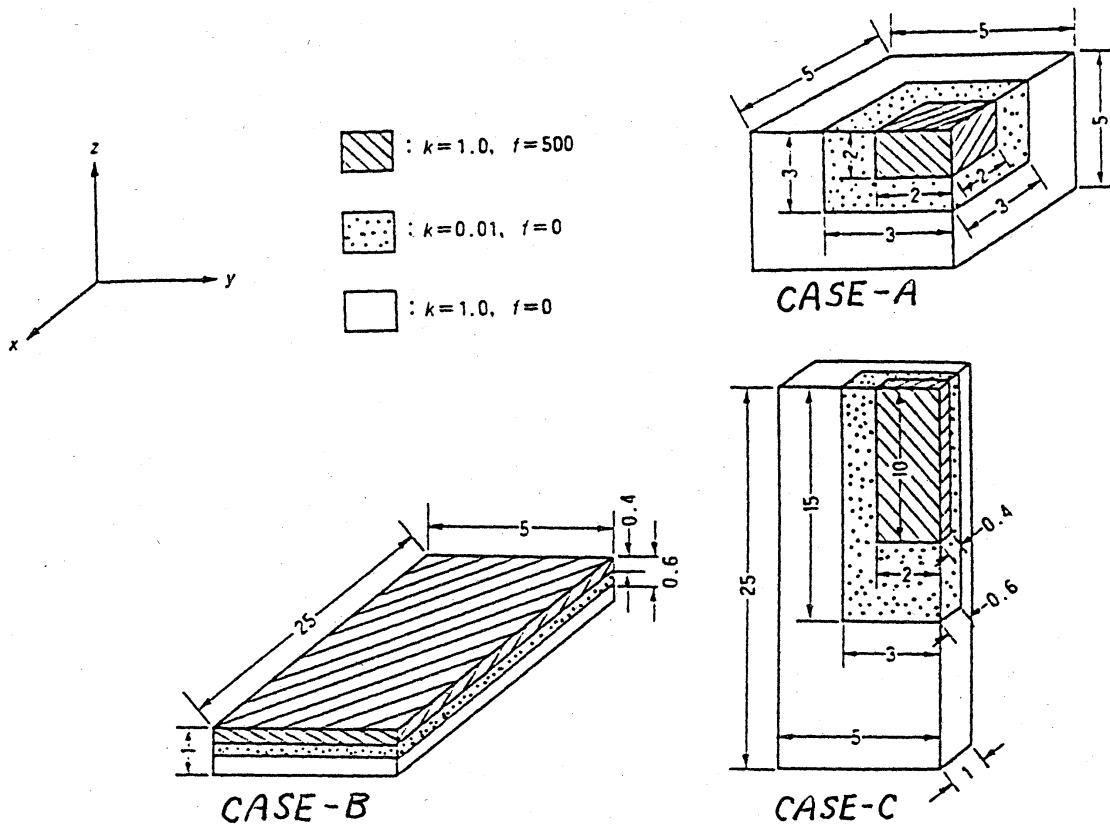
注) (a) ~~~~~ の部分が ICCG 法より多い計算

(b) ICCG 法よりベクトル 1 本 (e) 多く使用

(c) ベクトル計算機では 1 反復計算の時間は ICCG とほぼ同じ

6. 数値実験結果

図6.1 に示すモデルを三次元差分法で離散化した行列に対して ICCG 法と ICCR 法(本解法に不完全コレスキー前処理も付加した手法)を適用した。その結果を図6.2, 図6.3 及び 図6.4 に示す。これらの図はいずれも相対残差が 10^{-2} 及び 10^{-6} 以下となるまでの反復回数を示した。



$$-\operatorname{div}(k \cdot \operatorname{grad}(U)) = f$$

$$\text{境界条件} \begin{cases} U = 0 & \text{on } \Gamma_1 \text{ (裏3面)} \\ (k \cdot \operatorname{grad}(U)) \cdot n = 0 & \text{on } \Gamma_2 \text{ (表3面)} \end{cases}$$

図6.1 数値実験対象モデル

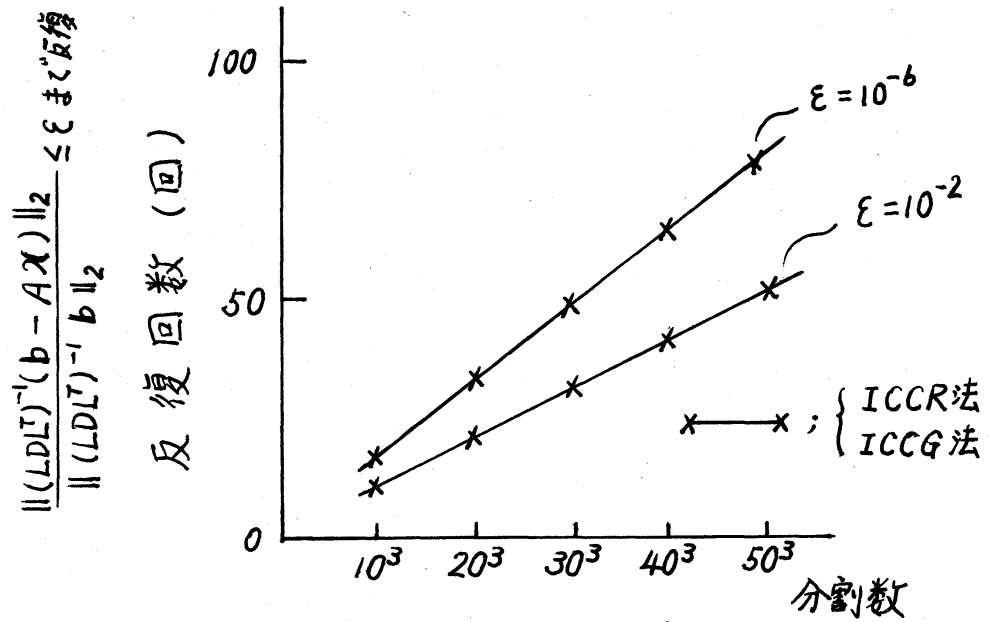


図 6.2 CASE-A の数値実験結果

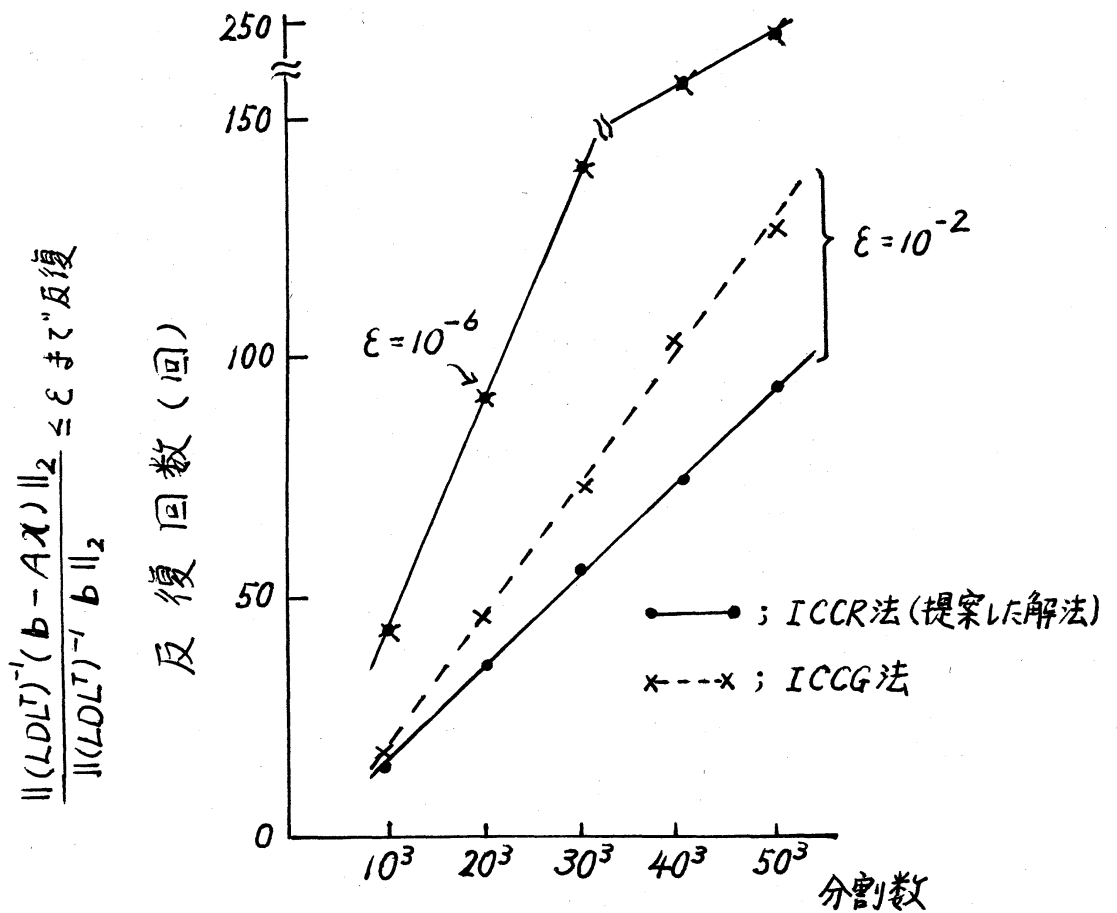


図 6.3 CASE-B の数値実験結果

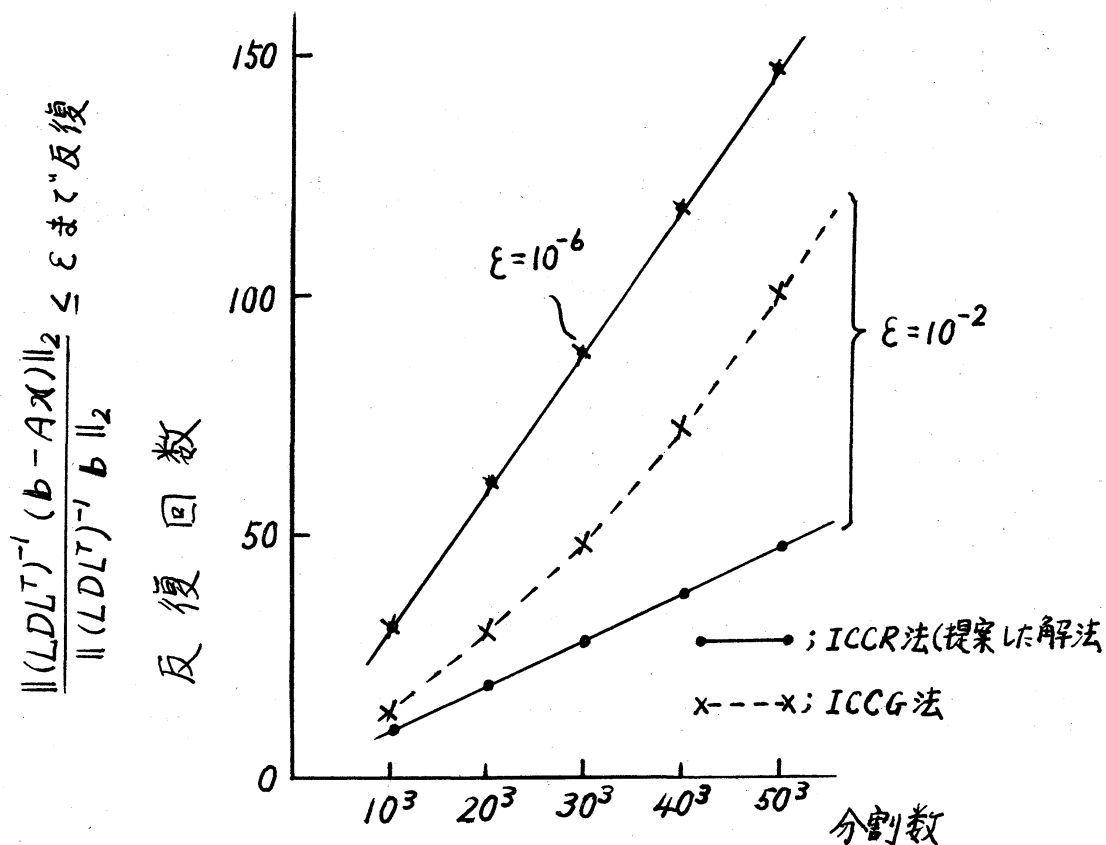


図 6.4 CASE-C

相対残差 ϵ が 10^{-6} のときは ICCG 法と ICCR 法の反復解法では同じ収束回数を示している。相対残差が 10^{-2} のときは、CASE-C, CASE-B では ICCR 法 (提案した解法) の方が、反復回数が少なくて収束する。また反復回数が大きくなるほどその差は大きくなっていく。しかし、CASE-A では ICCG 法と ICCR 法の反復回数は同じである。これより、解析領域の各寸法比が大きく異なり、求める相対残差が比較的大きい場合に ICCR 法は ICCG 法より有利と思われる。

7. おわりに

今回提案した解法はCG法とCR法を合わせたものと思っていた。発表時に筑波大学小柳教授から本解法は対称CR法そのものではないかとの御指摘を受け、検討した結果、御指摘の通り対称CR法と一致することが分かった。御指摘いただいた小柳教授に感謝致します。

参考文献

- 1) 戸川隼人；「共役勾配法，教育出版，1976
- 2) 後 保範；「大型疎行列に対するPCG，PCR法」，コンピュータ
NO.12，コロナ社，1985