

一般化残差切除法の収束特性の検討

A study on convergence characteristics of the generalized residual cutting method

- 阿部敏彦, ASI 総研, 東京都千代田区内神田 1-18-14, E-mail: toshihiko-abe@asiri.co.jp
 関根義人, ASI 総研
 菊地一雄, ASI 総研
 Toshihiko ABE, ASIRI, 1-18-14, Uchi-Kanda, Chiyoda-ku, Tokyo
 Yoshihit SEKINE, ASIRI
 Kazuo KIKUCHI, ASIRI

The residual cutting method is known to have superior characteristics of convergence for elliptic partial differential problems. In this paper, we propose the generalized version of the residual cutting method for general sparse matrices and investigate its performance by numerical experiments.

1. はじめに

著者らは楕円型偏微分方程式の数値解法として優れた収束性を有す残差切除法¹⁾を、内部ソルバの代わりに係数行列と残差ベクトルから生成したベクトルを用いることにより Coupled Perturbed (CP)方程式に適用し、優れた収束性を示すことを報告している²⁾。本報告では、この手法を一般化残差切除法(GRC 法)として、一般の疎行列を対象とした線形ソルバとしての性能を評価する。

2. 残差切除法

2.1 基本アルゴリズム

偏微分方程式を適切に離散化して得られる線形化連立方程式を

$$\mathbf{H}\mathbf{U} = \mathbf{b} \quad (2.1)$$

により表す。ここで \mathbf{H} は係数行列、 \mathbf{U} は解ベクトルを表す。 \mathbf{U} の近似解 \mathbf{U}^m に対する残差 \mathbf{r}^m を

$$\mathbf{r}^m = \mathbf{b} - \mathbf{H}\mathbf{U}^m \quad (2.2)$$

により定義し、式(2.1)の解 \mathbf{U} を近似解 \mathbf{U}^m と摂動量 $\boldsymbol{\phi}$ で次のように表す。

$$\mathbf{U} = \mathbf{U}^m + \boldsymbol{\phi} \quad (2.3)$$

以上の式から、摂動量の残差方程式

$$\mathbf{H}\boldsymbol{\phi} = \mathbf{r}^m \quad (2.4)$$

が得られる。

残差切除法により式(2.4)を解くには、まず内部ソルバにより、暫定近似解 $\boldsymbol{\Psi}^m$ を求める。内部ソルバとしては、緩和法やADI法などの反復解法を用いる。次に残差のL2ノルムを最小とする合成摂動量 $\boldsymbol{\phi}^m$ と新しい近似解 \mathbf{U}^{m+1} を次のように定義する。

$$\boldsymbol{\phi}^m = \alpha_1 \boldsymbol{\Psi}^m + \sum_{l=2}^L \alpha_l \boldsymbol{\phi}^{m-l+1} \quad (2.5)$$

$$\mathbf{U}^{m+1} = \mathbf{U}^m + \boldsymbol{\phi}^m \quad (2.6)$$

α_l ($l = 1, 2, \dots, L$)は次に述べる残差の最小化により定まる定数である。残差のL2ノルムをつねに小さくするため次のように残差の最小化を行う。すなわち、新しい近似解 \mathbf{U}^{m+1} が式(2.6)で表されるとき、これに対する残差 \mathbf{r}^{m+1} は式(2.2)から次のように与えられる。

$$\mathbf{r}^{m+1} = \mathbf{b} - \mathbf{H}\mathbf{U}^{m+1} \quad (2.7)$$

$$\mathbf{r}^{m+1} = \mathbf{r}^m - \alpha_l \mathbf{H}\boldsymbol{\Psi}^m - \sum_{l=2}^L \alpha_l \mathbf{H}\boldsymbol{\phi}^{m-l+1}$$

従って、近似解 \mathbf{U}^{m+1} に対する残差 \mathbf{r}^{m+1} のL2ノルム

$$r^{m+1} = \|\mathbf{r}^{m+1}\| \quad (2.8)$$

を最小化するためには、

$$\frac{\partial \|r^{m+1}\|^2}{\partial \alpha_l} = 0 \quad (2.9)$$

を解けば良い。式(2.9)は α_l のL元連立方程式となり、これを数値

的に解くことによって $\alpha_1 \dots \alpha_l$ が定まる。実際には、 α_l の数は数個程度で十分である。このように最小二乗法で $\alpha_1 \dots \alpha_l$ が定めれば式(2.5)から $\boldsymbol{\phi}^m$ が、また式(2.6)から新しい近似解 \mathbf{U}^{m+1} が求められる。式(2.2)に戻ってこのプロセスを繰り返すことによって、残差のL2ノルム式(2.8)を零または最小にする解 \mathbf{U}^∞ に収束する。

計算の手順は次のようになる。

- (1) 初期値 \mathbf{U}^0 を与える。
- (2) 残差 $\mathbf{r}^m = \mathbf{b} - \mathbf{H}\mathbf{U}^m$ を求める。
- (3) $\mathbf{H}\boldsymbol{\phi} = \mathbf{r}^m$ を、内部ソルバによる最小単位の反復で暫定近似解 $\boldsymbol{\Psi}^m$ を求める。
- (4) 式(2.9)により残差最小化係数 α_l ($l = 1, 2, \dots, L$)を計算する。
- (5) 式(2.5), (2.6)により、合成摂動量 $\boldsymbol{\phi}^m$ と新しい近似解 \mathbf{U}^{m+1} を得る。

$$\boldsymbol{\phi}^m = \alpha_1 \boldsymbol{\Psi}^m + \sum_{l=2}^L \alpha_l \boldsymbol{\phi}^{m-l+1}, \quad \mathbf{U}^{m+1} = \mathbf{U}^m + \boldsymbol{\phi}^m \quad (2.10)$$

ただし $m - L + 1 < 0$ の場合は和の中で $\boldsymbol{\phi}$ の添え字が負になるものがあるので、その場合は零ベクトルとする。すなわち

$$\boldsymbol{\phi}^n = \mathbf{0} \text{ for all } n < 0 \quad (2.11)$$

(2)から(5)の手順を繰り返すことにより、残差を減少させていく。

2.2 一般化残差切除法 (GRC 法)

従来法では $\boldsymbol{\Psi}^m$ は内部ソルバによる $\mathbf{H}\boldsymbol{\phi} = \mathbf{r}^m$ の暫定近似解であり、通常SORなどの緩和法を用いる。緩和法を用いた場合(ここでは簡潔のため、Gauss-Seidel法の例を示す)は、繰り返しごとの演算は

$$x^i = (\mathbf{H}_L + \mathbf{H}_D)^{-1}(-\mathbf{H}_U x^{i-1} + r^m) \equiv f(x^{i-1})$$

のように書ける。ただし \mathbf{H}_L , \mathbf{H}_U , \mathbf{H}_D は係数行列をそれぞれ左三角、上三角、対角成分に分割したものである。内部ソルバではこの演算をn回適用するので、暫定近似解は

$$\boldsymbol{\Psi}^m = f^n(x_0) = F(\mathbf{H}, r^m)$$

となる。これに対し、提案法では一般の表現として

$$\boldsymbol{\Psi}^m = G(\boldsymbol{\phi}^{m-1}, \mathbf{H}, r^m)$$

とする。ただしGは線形演算子で、ここでは

$$G(\boldsymbol{\phi}^{m-1}) = (\mathbf{1} - \mathbf{H})\boldsymbol{\phi}^{m-1} + r^m$$

を用いる。つまり式(2.4)の暫定近似解を求める代わりに、

$$\boldsymbol{\Psi}^m = (\mathbf{1} - \mathbf{H})\boldsymbol{\phi}^{m-1} + \mathbf{U}^m \quad (2.12)$$

とする。この演算の目的は、近似解を得ることではなく、Krylov部分空間を構成することである。つまり、(2.9)により残差最小化により近似解を得るために、個々のベクトルは必ずしも近似解である必要はない。

3. 数値実験

3.1 実験条件

提案した GRC 法を、オリジナルの残差切除法(RC 法)、BiCGSTAB、GMRES 法と比較した。BiCGSTAB および GMRES 法には LIS ライブラリ³⁾を用いた。また、できるだけ同じ条件で比較するために、GRC 法および RC 法も LIS のサブルーチンとして実装した。式(2.5)における α_l ($l = 1, 2, \dots, L$)の個数については、GRC 法、RC 法ともに $L = 5$ とした。また、RC 法の内部ソルバとしてSORを用い、緩和係数1.9および繰り返し回数は50回とした。またGMRESのリスタートまでの回数は、LISでのデフォルトである40回とした。

実験用の係数行列として、

- (1) 非等間隔格子上でPoisson方程式を離散化して得られる係数行列(フルノイマン条件、格子点数 $81 \times 53 \times 55 =$ 約24万点)

- (2) 偏微分方程式

$$u_{xx} + u_{yy} + u_{zz} + 1000u_x = F$$

を離散化することにより得られる係数行列⁴⁾(125000次元)

- (3) University of Florida sparse matrix collection⁵⁾のデータベースに登録されている係数行列の一つである、'raefsky2'の3つの行列を用いた。

3.2 実験結果

図3.1、3.2、3.3に(1)(2)(3)のそれぞれの結果を示す。上段は繰り返しステップ数、下段は時間の関数としての収束特性である。

(1)の場合は、RC法が最も収束が早い。これはRC法の内部ソルバとしての緩和法が、差分化されたPoisson方程式に対して効率的に収束しているためと考えられる。それと比較してGRC法は、前半は遅く、後半は次第に加速していくような収束曲線を示している。BiCGSTAB法は、残差が単調減少しないため独特の振動を伴うが、収束曲線の概形としてはGRC法に似ている。GMRES法は途中で収束が止まっている。

(2)の場合は、RC法は残差ノルムが全く減少していない。これは内部ソルバの緩和法が発散しており、残差切除法のアルゴリズムでは原理的に残差ノルムは増加することはないため、一定に保たれている結果であることを確認している。GRC法、GMRES法とも似たような収束曲線を示している。それよりも遅れて、BiCGSTABが収束している。

(3)の場合では、RC法は(2)と同じく内部ソルバが発散しているため、途中までは残差ノルムが変化しないが、その後、発散している。これは内部ソルバの発散の程度が著しく、残差ノルムが 10^{00} 程度のオーダーに達しているため、残差最小化が正確に行われなためであることを確認している。BiCGSTABが顕著に早い収束を示した。かなり遅れてGMRESが収束し、さらに遅れてGRC法が収束している。

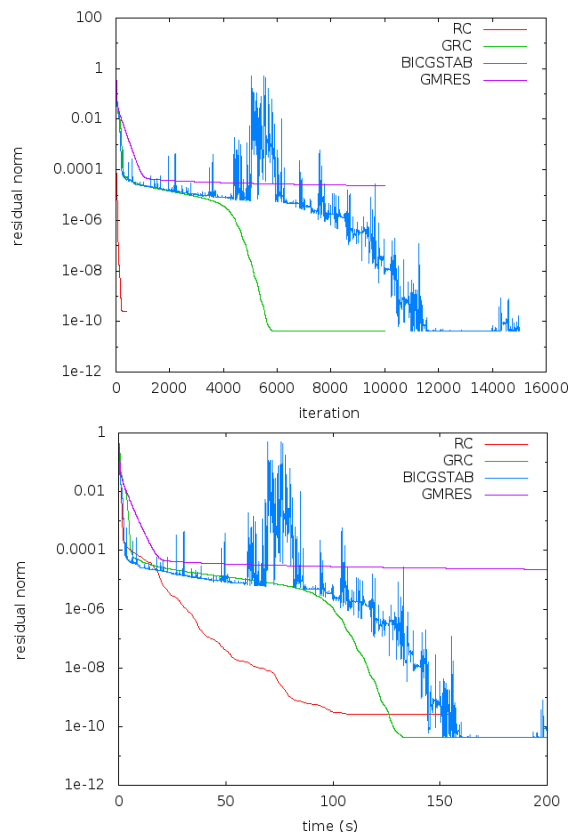


Fig. 3.1 Results from the coefficient matrix (1)

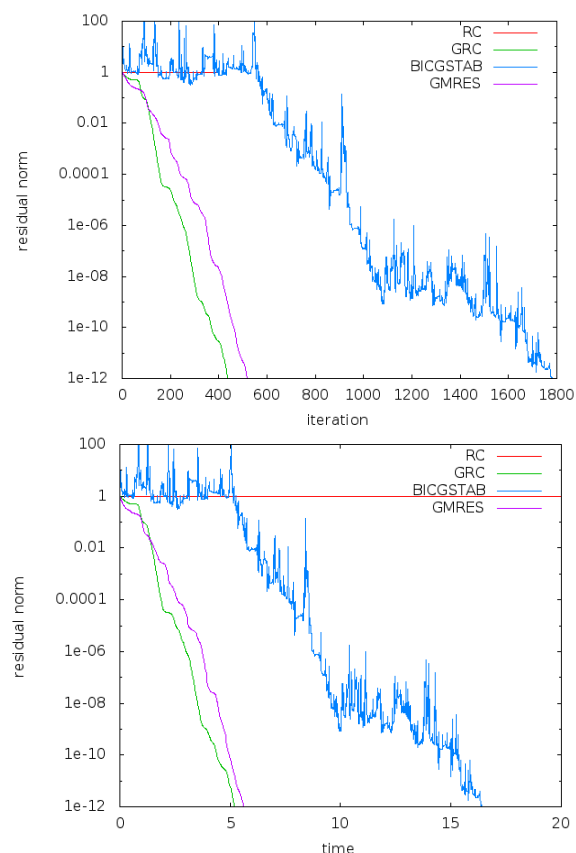


Fig. 3.2 Results from the coefficient matrix (2)

4. まとめ

4つの手法の中で、まず RC 法については、実験結果(1)のように、内部ソルバとしての緩和法が有効な係数行列に対しては、最も速く収束した。また GRC 法、GMRES 法、BiCGSTAB 法については、それぞれ異なる収束結果を示し、今回の実験結果からはどれかが特別に優れているようなことは見られなかった。ただし GRC 法 ($L = 5$) は GMRES 法 (40 ステップ 毎リスタート) に比べて保持するベクトル本数が 5/40 となり、そのためメモリ使用量が少なくて済むので、同じ計算環境でより大きな係数行列に適用可能であると考えられる。

参考文献

- (1) A. Tamura, K. Kikuchi and T. Takahashi, "Residual cutting method for elliptic boundary value problems: application to Poisson's equation," *J. Comp. Phys.*, **137**, pp. 247-264, 1997.
- (2) T. Abe, Y. Sekine and F. Sato, "Solving a coupled perturbed equation by the residual cutting method," *J. Chem. Phys.*, **557**, pp. 176-181, 2013.
- (3) <http://www.ssisc.org/lis/index.ja.html>
- (4) G. L.G. Sleijpen and R. Fokkema, "BiCGSTAB(L) for linear equations involving unsymmetric matrices with complex spectrum," *Electronic Transactions on Numerical Analysis*. vol 1, pp. 11-32, 1993.
- (5) <http://www.cise.ufl.edu/research/sparse/matrices/index.html>

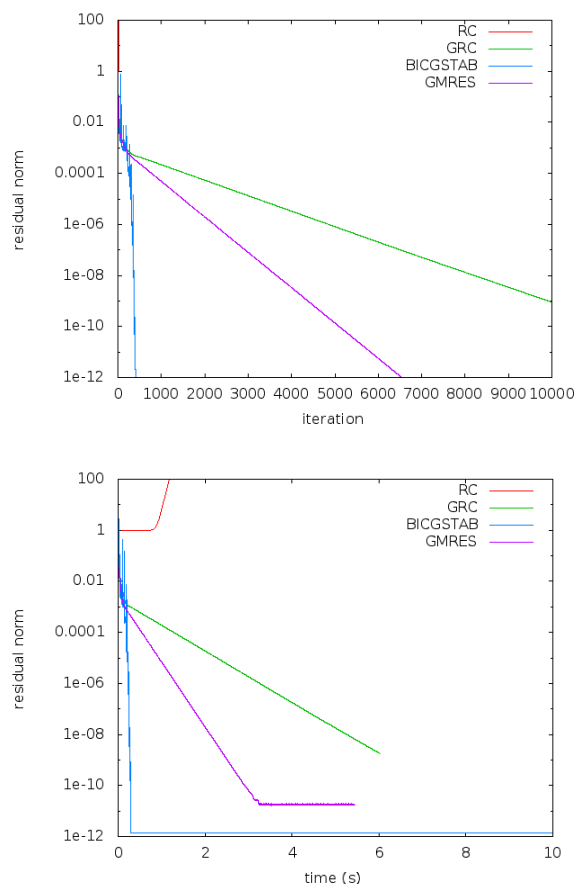


Fig. 3.3 Results from the coefficient matrix (3)