前処理つき共役勾配法(CG 法)*

梅谷　信行

平成 22 年 11 月 1 日

目次

1　前処理つき CG 法 (PCG 法)

前節では CG 法の収束が行列 $\mathbf{A}$ の固有値分布に強く依存することが分かった。ここで、解くべき方程式 $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ を特異でない行列 $\mathbf{P}$ を使って次のように変形できたとする。

$$\tilde{\mathbf{A}}\tilde{\mathbf{x}} = \tilde{\mathbf{b}} \tag{1}$$

但し、$\tilde{\mathbf{A}} = \mathbf{P}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{P}^{-T}$、$\tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{P}^T\mathbf{x}$、$\tilde{\mathbf{b}} = \mathbf{P}^{-1}\mathbf{b}$ とする．

$\mathbf{A}$ が正定値対称の場合、$\tilde{\mathbf{A}}$ も正定値対称となる。そこで連立一次方程式 $\tilde{\mathbf{A}}\tilde{\mathbf{x}} = \tilde{\mathbf{b}}$ に CG 法を適応することを考える。もしも、$\tilde{\mathbf{A}}$ が $\mathbf{A}$ よりも条件数が小さいようなよい固有値の分布をしているとすると、より早く解を求めることができることが分かる。ここで行列 $\mathbf{M} = \mathbf{P}\mathbf{P}^T$ とおく。以下、行列 $\mathbf{P}$、$\tilde{\mathbf{A}}$ や $\tilde{\mathbf{b}}$ を用いることなく、$\mathbf{M}$ の逆行列 $\mathbf{M}^{-1}$ のみを用いて、連立一次方程式 $\tilde{\mathbf{A}}\tilde{\mathbf{x}} = \tilde{\mathbf{b}}$ に CG 法を適応している

* これは忘れっぽい著者が昔勉強したことを書き留めておく備忘録です．きっと間違えを多く含んでいます．すいません．ご指摘ご意見などありましたら教えてもらえると有り難いです．

のと同一になるようにCG法のアルゴリズムを書き直す。$\mathbf{M}=\mathbf{A}$ の時、$\tilde{\mathbf{A}}=\mathbf{I}$ となり、変形した連立一次方程式 $\tilde{\mathbf{A}}\tilde{\mathbf{x}}=\tilde{\mathbf{b}}$ は解かずとも解が求められる。連立一次方程式 $\tilde{\mathbf{A}}\tilde{\mathbf{x}}=\tilde{\mathbf{b}}$ にCG法した際の残差 $\tilde{\mathbf{r}}$、探索方向ベクトル $\tilde{\mathbf{p}}$ とする。

$$
\begin{aligned}
\tilde{\mathbf{r}} &= \tilde{\mathbf{b}}-\tilde{\mathbf{A}}\tilde{\mathbf{x}} && (2)\\
&= \mathbf{P}^{-1}\mathbf{b}-\mathbf{P}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{P}^{-T}\mathbf{P}^{T}\mathbf{x} && (3)\\
&= \mathbf{P}^{-1}(\mathbf{b}-\mathbf{A}\mathbf{x}) && (4)\\
&= \mathbf{P}^{-1}\mathbf{r} && (5)
\end{aligned}
$$

$$(\tilde{\mathbf{r}},\tilde{\mathbf{r}})=(\mathbf{P}^{-1}\mathbf{r},\mathbf{P}^{-1}\mathbf{r})=(\mathbf{r},\mathbf{P}^{-T}\mathbf{P}^{-1}\mathbf{r})=(\mathbf{r},\mathbf{M}^{-1}\mathbf{r}) \tag{6}$$

$$(\tilde{\mathbf{p}},\tilde{\mathbf{A}}\tilde{\mathbf{p}})=(\tilde{\mathbf{p}},\mathbf{P}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{P}^{-T}\tilde{\mathbf{p}})=(\mathbf{P}^{-T}\tilde{\mathbf{p}},\mathbf{A}\mathbf{P}^{-T}\tilde{\mathbf{p}}) \tag{7}$$

よって、$\mathbf{z}=\mathbf{M}^{-1}\mathbf{r}$、$\mathbf{p}=\mathbf{P}^{-T}\tilde{\mathbf{p}}$ とおくと、CG法の係数は次のように表すことができる。

$$
\begin{aligned}
\alpha_k &= \frac{(\tilde{\mathbf{r}}_k,\tilde{\mathbf{r}}_k)}{(\tilde{\mathbf{p}}_k,\tilde{\mathbf{A}}\tilde{\mathbf{p}}_k)} && (8)\\
&= \frac{(\mathbf{r}_k,\mathbf{z}_k)}{(\mathbf{p}_k,\mathbf{A}\mathbf{p}_k)} && (9)
\end{aligned}
$$

$$\beta_k=\frac{(\tilde{\mathbf{r}}_{k+1},\tilde{\mathbf{r}}_{k+1})}{(\tilde{\mathbf{r}}_k,\tilde{\mathbf{r}}_k)}=\frac{(\mathbf{r}_{k+1},\mathbf{z}_{k+1})}{(\mathbf{r}_k,\mathbf{z}_k)} \tag{10}$$

CG法の関係式から、

$$\Delta\tilde{\mathbf{x}}_k=\tilde{\mathbf{x}}_{k+1}-\tilde{\mathbf{x}}_k=\alpha_k\tilde{\mathbf{p}}_k=\alpha_k\mathbf{P}^{T}\mathbf{p}_k \tag{11}$$

$$\Delta\tilde{\mathbf{r}}_k=\tilde{\mathbf{r}}_{k+1}-\tilde{\mathbf{r}}_k=-\tilde{\mathbf{A}}\Delta\tilde{\mathbf{x}}_k=-\alpha_k\tilde{\mathbf{A}}\tilde{\mathbf{p}}_k=-\alpha_k\mathbf{P}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{p}_k \tag{12}$$

$$\tilde{\mathbf{p}}_{k+1}=\tilde{\mathbf{r}}_{k+1}+\beta_k\tilde{\mathbf{p}}_k \tag{13}$$

が成り立つ。よってこれから、解 $\mathbf{x}$, 残差 $\mathbf{r}$, ベクトル $\mathbf{p}$ の更新について求めることができる。

$$\Delta\mathbf{x}_k=\mathbf{P}^{-T}\Delta\tilde{\mathbf{x}}_k=\alpha_k\mathbf{P}^{-T}\mathbf{P}^{T}\mathbf{p}_k=\alpha_k\mathbf{p}_k \tag{14}$$

$$\Delta \mathbf{r}_k = \mathbf{P}\Delta\tilde{\mathbf{r}}_k = -\alpha_k \mathbf{P}\mathbf{P}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{p}_k = -\alpha_k \mathbf{A}\mathbf{p}_k \tag{15}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{p}_{k+1} &= \mathbf{P}^{-T}\tilde{\mathbf{p}}_{k+1} = \mathbf{P}^{-T}\tilde{\mathbf{r}}_{k+1} + \beta_k \mathbf{P}^{-T}\tilde{\mathbf{p}}_k & (16)\\ &= \mathbf{P}^{-T}\mathbf{P}^{-1}\mathbf{r}_{k+1} + \beta_k \mathbf{P}^{-T}\mathbf{P}^{T}\mathbf{p}_k & (17)\\ &= \mathbf{M}^{-1}\mathbf{r}_{k+1} + \beta_k \mathbf{p}_k = \mathbf{z}_{k+1} + \beta \mathbf{p}_k & (18) \end{aligned}$$

よって、CG 法のアルゴリズムは次のようになる。

1.1 アルゴリズム (PCG 法)

1. *Compute* $\mathbf{r}_0 = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}_0, \mathbf{z}_0 = \mathbf{M}^{-1}\mathbf{r}_0, \mathbf{p}_0 = \mathbf{z}_0$
2. *For* $k = 0, 1, \ldots, m$ *Do* :
   (a) $\alpha_k = \frac{(\mathbf{r}_k, \mathbf{z}_k)}{(\mathbf{p}_k, \mathbf{A}\mathbf{p}_k)}$
   (b) $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{p}_k$
   (c) $\mathbf{r}_{k+1} = \mathbf{r}_k - \alpha_k \mathbf{A}\mathbf{p}_k$
   (d) $\mathbf{z}_{k+1} = \mathbf{M}^{-1}\mathbf{r}_{k+1}$
   (e) $\beta_k = \frac{(\mathbf{r}_{k+1}, \mathbf{z}_{k+1})}{(\mathbf{r}_k, \mathbf{z}_k)}$
   (f) $\mathbf{p}_{k+1} = \mathbf{z}_{k+1} + \beta \mathbf{p}_k$
3. *End Do*

2 前処理の手法

$\mathbf{M}$ は前処理行列と呼ばれる。実際に用いられるのは前処理行列 $\mathbf{M}$ そのものではなく、前処理行列 $\mathbf{M}$ は連立一次方程式 $\mathbf{M}\mathbf{z} = \mathbf{r}$ を解いて $\mathbf{z}$ を求めることさえできればよい。$\mathbf{M}$ を解くことが $\mathbf{A}$ を解くこととあまり難しさが変わらなければ本末転倒である。つまり前処理行列 $\mathbf{M}$ は $\mathbf{A}$ より簡単に解くことができる必要がある。前処理行列 $\mathbf{M}$ には、$\mathbf{A}$ と十分に近い $\mathbf{M} \simeq \mathbf{A}$ という性質が求められる。$\mathbf{M} = \mathbf{A}$ の時、$\tilde{\mathbf{A}} = \mathbf{I}$ となり、わずか 1 回の反復で収束する。つまり $\mathbf{M} \simeq \mathbf{A}$ ならば、$\tilde{\mathbf{A}} \simeq \mathbf{I}$ となりよい固有値分布が得られ収束も早くなると考えられる。また CG 法に限って言えば、$\mathbf{M} = \mathbf{P}\mathbf{P}^T$ と表されていたので、前処理行列 $\mathbf{M}$ は正定値対称でなくてはならな

い。逆に $\mathbf{M}$ が正定値対称の場合は $\mathbf{M} = \mathbf{P}\mathbf{P}^T$ となるような実行列 $\mathbf{P}$ が存在することが知られている。以上をまとめると、

前処理行列として望ましい性質

前処理行列 $\mathbf{M}$ は $\mathbf{M}\mathbf{z} = \mathbf{r}$ を解いて $\mathbf{z}$ を簡単に求めることができる、$\mathbf{A}$ を近似した正定値対称の行列

ということがいえる。CG 法向けの前処理行列が対称である前処理として代表的なものは

- 対角スケーリング (Diagonal Scaling)
- 不完全 LU 分解 (ILU 分解、Incomplete LU Fractarization)
- SSOR 法 (Symetric Successive Over Relaxation)
- 点ヤコビ法 (Point Jacobi Method)
- マルチグリッド法 (Multigrid Method)

があげられる。不完全 LU 分解を前処理として使った PCG 法は特に ICCG 法と呼ばれよく使われる。

3 参考にしたもの

[1]

参考文献

[1] Saad, Y.: *Iterative Methods for Sparse Linear Systems, Second Edition*, Society for Industrial and Applied Mathematics, 2 edition (2003).