Deflationを前処理とするGMRES(m)法

3D－7

高篠 秀明, 野寺 隆
慶應義塾大学理工学部

1 はじめに

偏微分方程式の境界値問題の離散化によって生じる大型疎行列を係数とする連立1次方程式

$$Ax = b \tag{1}$$

の近似解を計算することを考える．通常，(1) は反復法によって解かれることが多い．

近年，GMRES法 [1] は，主要な非定常反復法の1つであるが，計算量および記憶容量の点で実用的な算法ではない．このため，適当な正の整数 m に対して，記憶容量を減らしたリスタート版のGMRES(m) 法が考案されている．しかし，GMRES(m) 法はリスタートによって固有ベクトルの情報が欠落してしまうことがあり，このことが原因で問題によっては収束しないことがある．そこで，各リスタート時に前の反復で得られる固有ベクトルの情報を付け加えることにより，近似解の構成に必要な固有値に対応する固有ベクトルの情報の欠落を防ぐ算法を考える．

2 GMRES(m) 法

GMRES法は，

$$K_m(A, r) = \mathrm{Span}\{r, Ar, ..., A^{m-1}r\}$$

によって与えられるクリロフ部分空間の直交基底を生成するアーノルディ原理を用いている．

GMRES法の算法は，

$$\| b - Ax_m \| = \min_{y \in R^m} \| \beta e_1 - \bar{H}_m y \| \tag{2}$$

を満たすように $x_m = x_0 + V_m y_m$ を計算することである．一般に，最小2乗問題を解く方法はいろいろ考えられるが，SaadとSchultz[1] はギブンス回転行列を用いて，上ヘッセンベルグ行列 $\bar{H}_m$ をQR分解し，最小2乗解を求める方法を提案している．ただし，GMRES法は，反復回数が増えるに従ってベクトルの系列 $\{r, Ar, ..., A^{m-1}r\}$ と上ヘッセンベルグ行列 $\bar{H}_m$ を保持する必要がある．これは計算量および記憶容量の点で実用的ではない．そうした欠点を改善したのが，リスタート版のGMRES(m) 法である．この算法を用いることによって計算量と記憶容量を減らすことができる．しかし，GMRES(m) 法は，リスタートによって近似解の構成に必要となる固有ベクトルの情報を欠落し，残差ノルムが収束しない可能性がある．それを改善するために，次節で固有値の情報を付加する算法について考える．

3 デフレーションに基づく3つの算法

3.1 MORGAN(m,k) 法

MORGAN(m,k) 法は，クリロフ部分空間を固有ベクトルを加えることにより拡張していく方法である [3, 4]．ここで，m はクリロフ部分空間の次元，kは $m+l$次元 ($l \le k$) の拡張部分空間に解が存在するように選ばれる．V_mを $K_m(A, r_0)$ の直交基底，Uを近似不変部分空間の基底，$W = (V_m, U)$ を拡張部分空間の基底とすると，アーノルディ原理は，次の行列表現に書き表すことができる．

$$AW = V\bar{H}$$

ただし，$V = (V_{m+1}, V_l)$ であり，Hを $(m+1+l) \times (m+l)$ の上ヘッセンベルグ行列とする．

MORGAN(m,k) 法の算法は，

$$\| b - Ax_m \| = \min_{y \in R^{m+l}} \| \beta e_1 - \bar{H} y \|$$

を満たすように $x_m = x_0 + W y_m$を計算することになる．

次に，lと Uの選び方を考える．固有値，固有ベクトルを求めるには，次のような調和問題 [3, 4] の解を求めればよい．

$$(AW)^*(A - \theta I)Wu = 0 \tag{3}$$

これは，一般固有値問題

$$Ru = \theta[QV^*W]u, \quad U = Wu \tag{4}$$

に帰着することができる．ただし，$Q\bar{H} = (R,\ 0)^T$ とする．なお，Q は $(m+1+l) \times (m+1)$ のユニタリ行列，Rは $(m+l) \times (m+l)$ の上三角行列，$[QV^*W]$ は QV^*Wの最初の $(m+l)$ 列からなる $(m+l) \times (m+l)$ の行列である．この計算により，小さい方からl個の固有値と，それに対応する固有ベクトルを求めることができる．lは各リスタートにおいて kとおく方法 [3, 4] と，0 からkまで増加させる方法 [5] がある．ただし，今回は前者を利用した．

3.2 DEFLATED-GMRES(m,k) 法

DEFLATED-GMRES(m,k) 法は，各リスタート毎に更新される前処理を導入する方法である [5]． M を各リスタートごとに更新する前処理行列，V_mをクリロフ部分空間 $K_m(r_0, AM^{-1})$ の直交基底とすると，DEFLATED-GMRES(m,k) 法の算法は，GMRES(m) 法に対し

$$AM^{-1}V_m = V_{m+1}\bar{H}_m$$

を満たすように各リスタートごとに行列 AM^{-1}を適用したものである．ここで，$\bar{H}_m$は $(m+1) \times m$ の上ヘッセンベルグ行列である．DEFLATED-GMRES(m,k) 法の算法は，

$$\| b - Ax_m \| = \min_{y \in R^m} \| \beta e_1 - \bar{H}_m y \|$$

を満たすように $x_m = x_0 + M^{-1}V_m y_m$を計算する．前処理行列 M^{-1}を

$$M^{-1} := I_n + U(|\lambda_n|T^{-1} - I_l)U^T$$

のように定義する．ただし，Uは $l \leq k$の固有ベクトルの集合，$T = U^TAU$とする．次に，lと Uの求め方を考える．固有値，固有ベクトルを求めるには，次のような斜交 (oblique) 問題 [5] を解けばよい．

$$V_m^*(AM^{-1} - \theta I)V_m u = 0$$

これは，標準固有値問題

$$H_m u = \theta u, \quad U = V_m u$$

に帰着することができる．ここで，H_mは$\bar{H}_m$から最後の列を取り除いた上ヘッセンベルグ行列である．この計算により，絶対値の小さい方からl個の固有値と，それに対応する固有ベクトルを求めることができる．

3.3 DEFLATION(m,k) 法

DEFLATION(m,k) 法は，DEFLATED-GMRES (m,k) 法とは固有値，固有ベクトルの計算法が異なる．つまり，以下のような調和問題を解くことになる．

$$(AM^{-1}V_m)^*(A - \theta I)M^{-1}V_m u = 0$$

これは，一般固有値問題

$$R_m u = \theta[Q_m V_{m+1}^*]u, U = M^{-1}V_m u \qquad (5)$$

に帰着できる．ただし，$Q_m\bar{H} = (R_m,\ 0)^T$ とすると，Q_mは $(m+1) \times (m+1)$ のユニタリ行列，R_mは $m \times m$ の上三角行列である．

さらに，固有ベクトルの数が kより小さい場合は，以下のような調和問題を解くことになる．

$$(AU_1)^*(A - \theta I)U_1 u = 0$$

これは，一般固有値問題

$$(AU_1)^*AU_1 u = \theta(AU_1)^*U_1 u, U_2 = U_1 u \qquad (6)$$

に書き換えることができる．

DEFLATED-GMRES(m,k) 法は，2 つの調和問題を解くことにより，1 つ目の計算で固有ベクトルの精度が悪くなっても 2 つ目を解くことで精度を改善することができる．

4 終りに

固有値の情報を利用する 3 つの算法により，従来の GMRES(m) 法の近似解の構成に必要な固有ベクトルの情報が欠落する欠点を改善できると推測される．今後，AP3000 による数値実験で検証し，その結果を発表当日に報告する．

参考文献

[1] Y. Saad and M. K. Schultz.: A generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems. *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, No.7, pp. 856-869, (1986).

[2] K. Burrage and J. Erhel.: On the Performance of Various Adaptive Preconditioned GMRES Strategies. *Numer. Linear Algebra Appl.*, No. 5, pp. 101-121, (1998).

[3] R. Morgan.: A restarted GMRES method augmented with eigenvectors. *SIAM J. Matrix Anal. App.*, No. 16, pp. 1154-1171, (1995).

[4] A. Chapman and Y. Saad.: Deflated and augmented Krylov subspace techniques. Numerical Linear Algebra with Applications, No. 4(1), pp. 43-66, (1997).

[5] J. Erhel, K. Burrage and B. Pohl.: Restarted GMRES preconditioned by deflation. *Journal of Computational and Applied Mathmatics*, No. 69, pp. 303-318, (1996).