Krylov部分空間におけるAugmented GMRES法について

黒岩 奈保† 野寺 隆†

1 はじめに

GMRES法は，大規模な非対称行列を係数行列に持つ連立1次方程式

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

を解く反復解法の1つである．$A \in \mathbb{R}^{n\times n}, \mathbf{x}, \mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$ とする．ただし，通常，GMRES法は，Krylov部分空間から，残差ベクトルを最小にするように解$\mathbf{x}$を構成する． Baglamaら[1]は，このKrylov部分空間にある低次元空間$\mathscr{W}$を付加することで，従来のGMRES法よりも速く高精度な近似解に到達する算法を提案した．本発表では，GMRES法のリスタート版を用い，その有効性について考察する．

2 GMRES法

GMRES法は，j反復目の解$\mathbf{x}_j$，初期残差$\mathbf{r}_0$に対し，最小二乗問題

$$\|A\mathbf{x}_j - \mathbf{b}\|_2 = \min_{\mathbf{x}\in\mathbf{x}_0+\mathscr{K}_j(A,\mathbf{r}_0)} \|A\mathbf{x} - \mathbf{b}\|_2 \tag{2}$$

$$\mathscr{K}_j(A,\mathbf{r}_0) = \mathrm{span}\{\mathbf{r}_0, A\mathbf{r}_0, ..., A^{j-1}\mathbf{r}_0\} \tag{3}$$

を解くことで，残差ベクトルのノルムが最も小さくなるように解$\mathbf{x}_j$を選ぶ．

2.1 RRGMRES法

Calvettiら[2]によるRRGMRES (Range Restricted GMRES)法は，通常のGMRES法において用いるKrylov部分空間$\mathscr{K}_j(A,\mathbf{r}_0)$を，$\mathscr{K}_j(A,A\mathbf{r}_0)$として行う．実際，GMRES法における最小二乗問題，式(2)，式(3)を

$$\|A\mathbf{x}_j - \mathbf{b}\|_2 = \min_{\mathbf{x}\in\mathbf{x}_0+\mathscr{K}_j(A,A\mathbf{r}_0)} \|A\mathbf{x} - \mathbf{b}\|_2 \tag{4}$$

$$\mathscr{K}_j(A,A\mathbf{r}_0) = A\mathscr{K}_j(A,\mathbf{r}_0) \tag{5}$$

というように置き換えることになる．

RRGMRES法は，係数行列Aが非対称であり，右辺ベクトル$\mathbf{b}$に誤差が含まれる線形な悪条件問題に適用した場合，通常のGMRES法よりも速く精度の良い近似解に到達する事がCalvettiら[3]により示されている．

3 Augmented GMRES法

GMRES法は，反復解$\mathbf{x}_j$の候補が含まれる空間としてKrylov部分空間$\mathscr{K}_j(A,\mathbf{r}_0)$を利用していた．そこへ新たにユーザーの定める空間$\mathscr{W}$を付加したのがAugmented GMRES法である．ここで定める空間$\mathscr{W}$は，1次関数や2次関数，階段関数といった低次元の空間である．実際には，最小二乗問題

$$\|A\mathbf{x}_j - \mathbf{b}\|_2 = \min_{\mathbf{x}\in\mathbf{x}_0+\mathscr{K}_j(A,\mathbf{r}_0)\cup\mathscr{W}} \|A\mathbf{x} - \mathbf{b}\|_2 \tag{6}$$

を解くことになる．以下，具体的な解法の流れを簡単に示す．

3.1 空間の付加

GMRES法は，丸め誤差の観点からGram-Shcmidt法よりも良いとされる，修正Gram-Schmidt法を用いたArnoldi法によりKrylov部分空間の正規直交基底を生成する．結果として得られるArnoldi分解を用いて残差ノルムの表現を変形することで式(2)と同等の最小二乗問題を導き，最終的な近似解を得ることになる．

このGMRES法に空間の付加を組み込む為に，まずはskinnyQR分解[4]

$$AW = V_pR \tag{7}$$

を行う．$W \in \mathbb{R}n\times p$：空間$\mathscr{W}$の基底を各列に持つ行列，$V_p \in \mathbb{R}^{n\times p}$：正規直交行列，$R \in \mathbb{R}^{p\times p}$：上3角行列である．

次に，Arnoldi法により決定される列を式(7)の各行列に加えていき，j回の反復の後にArnoldi分解

$$A[WV_{p+1:p+j}] = V_{p+j+1}H \tag{8}$$

を得る．ただし，$V_{p+1:p+j+1}$はKrylov部分空間$\mathscr{K}_j(A,\mathbf{r}_0)$の正規直交基底を各列に持つ正規直交行列，Hは上Hessemberg行列である．この時，Arnoldi法の初期ベクトルとして$(I-V_pV_p^T)\mathbf{r}_0$を用いることで，V_pの各列に対する$V_{p+1:p+j+1}$の各列の直交性が保たれ，$V_{p+j+1} = [V_pV_{p+1:p+j+1}]$は，正規直交行列となる．

3.2 最小二乗問題を導く

空間の付加が完了すれば，あとはGMRES法とほぼ同様である．空間$\mathbf{x}_0 + \mathscr{K}_j(A,\mathbf{r}_0)\cup\mathscr{W}$における任意のベクトルは

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}_0 + [WV_{p+1:p+j+1}]\mathbf{y} \tag{9}$$

† 慶應義塾大学理工学部数理科学科
〒223-8522 横浜市港北区日吉3-14-1

と表されることを踏まえ，式 (8) を用いて残差ノルムを次のように変形する．

$$\begin{aligned}\|A\mathbf{x}-\mathbf{b}\|_2 &= \|A(\mathbf{x}_0+[WV_{p+1:p+j+1}]\mathbf{y})-\mathbf{b}\|_2\\ &= \|\mathbf{r}_0+A[WV_{p+1:p+j+1}]\mathbf{y}\|_2\\ &= \|\mathbf{r}_0+V_{p+j+1}H\mathbf{y}\|_2\\ &= \|V_{p+j+1}\|_2\|V_{p+j+1}^T\mathbf{r}_0+H\mathbf{y}\|_2\\ &= \|V_{p+j+1}^T\mathbf{r}_0+H\mathbf{y}\|_2 \qquad (10)\end{aligned}$$

よって，最小二乗問題

$$\min_{\mathbf{y}\in\mathbb{R}^{p+j}}\|V_{p+j+1}^T\mathbf{r}_0+H\mathbf{y}\|_2 \qquad (11)$$

の解を $\mathbf{y}_j$ とすると，式 (6) の解は

$$\mathbf{x}_j=\mathbf{x}_0+[WV_{p+1:p+j+1}]\mathbf{y}_j \qquad (12)$$

となる．

3.3 Augmented RRGMRES 法

Augmented RRGMRES 法は，Augmented GMRES 法における式 (6) を

$$\|A\mathbf{x}_j-\mathbf{b}\|_2=\min_{\mathbf{x}\in\mathbf{x}_0+\mathscr{K}_j(A,A\mathbf{r}_0)\cup\mathscr{W}}\|A\mathbf{x}-\mathbf{b}\|_2 \quad (13)$$

とし，修正 Arnoldi 法を用いる際の初期ベクトルを $(I-V_pV_p^T)A\mathbf{r}_0$ として実行すれば良い．

3.4 Augmented GMRES 式 (m) 法

GMRES 法を用いれば，理論的には高々n 回の反復により真の解が求まる．しかし，計算量や記憶容量の観点から実用的であるとは言えず，Arnoldi 法により生成する正規直交ベクトルを $m(\ll n)$ に制限し，その時の近似解 $\mathbf{x}_m$ を次の反復の初期近似解 $\mathbf{x}_0$ として用いる，リスタート版の GMRES(m) 法がよく用いられる．

本発表では，より良い近似精度を得ることを目的に，リスタート版の Augmented GMRES(m) 法を用いる．

4 数値例

空間の付加の有効性を確かめるために，C 言語を用いて算法のプログラムを作成し，数値実験を行った．また，使用した計算機は HP Compaq ProLiant DL145 である．以降，

$$W_1=\begin{bmatrix}1\\1\\\vdots\\1\end{bmatrix},W_2=\begin{bmatrix}1&1\\1&2\\\vdots&\vdots\\1&n\end{bmatrix},W_3=\begin{bmatrix}1&1&1\\1&2&4\\\vdots&\vdots&\vdots\\1&n&n^2\end{bmatrix}$$

$$\mathscr{W}_k=\text{range } W_k\ ,\ 1\leqslant k\leqslant 3$$

とする．

4.1 良条件問題

まずは，$\|A\|\|A^{-1}\|=1.2\times10^1$ となる良条件の非対称行列について実験を行った．

- $A\in\mathbb{R}^{500\times500}$：非対称 Toeplitz 行列．
  1 列目 $[1,1/2,...,1/500]^T$
  1 行目 $[1,1/4,...,1/500^2]$
- 解 $\mathbf{x}$ の j 番目の要素：$x_j=\exp(-(j-1)/500)$

4.2 悪条件問題

右辺ベクトル $\mathbf{b}$ に誤差が含まれる線形な悪条件問題の例として，第 1 種 Fredholm 積分方程式を扱う．

Hansen [5] による Regularization Tools のテスト問題から，Matlab 関数 baart を用い

$$\int_0^\pi\exp(s\cos(t))x(t)dt=b(s),\ 0\leqslant s\leqslant\frac{\pi}{2} \quad (14)$$

$$b(s)=2\frac{\sinh(s)}{s}$$

を離散化したデータを用いた．$A\in\mathbb{R}^{1000\times1000}$，真の解は $x(t)=\sin(t)$，右辺ベクトル $\mathbf{b}$ の相対誤差は 1×10^{-5} とする．

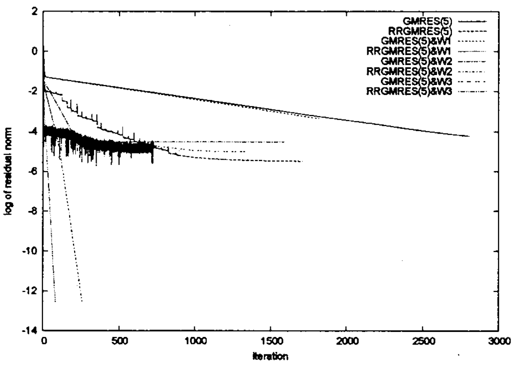

図 1: 悪条件問題： 残差ノルム vs. 反復回数

参考文献

[1] Baglama, J. and Reichel, L., "Augmented GMRES-type method," *Numerical Linear Algebra with Applications*, 2007; **14**: 337–350.

[2] Calvetti, D., Lewis, B. and Reichel, L., "GMRES-type method for inconsistent systems," *Linear Algebra and its Applications* 2000; **316**: 157–169.

[3] Calvetti, D., Lewis, B., and Reichel, L., "On the choice of subspace for iterative methods for linear discrete ill-posed problems," *International Journal of Applied Mathematics and Computer Science*, 2001; **11**: 1069–1092.

[4] Golub, G. H. and Van Loan, C., "Matrix Computations 2nd edition," *Johns Hopkins University Press*, 1989.

[5] Hansen, P C., "Regularization tools: a Matlab package for analysis and solution of discrete ill-posed problems," *Numerical Algorithms*, 1994; **6**: 1–35.