

適応的な前処理による GMRES(m) 法

鈴木 洋夫 野寺 隆

慶應義塾大学理工学部数理科学科

1 はじめに

GMRES 法は、大型で疎な非対称正則行列を係数とする連立 1 次方程式

$$Ax = b, \quad A \in R^{n \times n}, \quad x, b \in R^n \quad (1)$$

を解くための反復解法の 1 つであり、通常は計算量や記憶容量などの面からそのリスタート版である GMRES(m) 法が用いられる。しかし、このリスタートを行なうことによって、近似解を構成する固有ベクトルの情報が欠落し、残差ノルムが収束しない場合がある。そこで、反復の間に得られる行列 A のスペクトルの情報を用いて、適応的な前処理行列を構成することで、このような欠点を改善する方法を考える。

2 GMRES(m) 法

GMRES(m) 法は、クリロフ部分空間

$$K_m(A, r_0) = r_0, Ar_0, A^2r_0, \dots, A^{m-1}r_0 \quad (2)$$

上に、 m 次元の正規直行基底

$$V_m = (v_1, v_2, \dots, v_m) \quad (3)$$

をアーノルディ原理によって生成し、残差ノルムの最小 2 乗問題を解くことによって近似解を更新する算法である。アーノルディ原理から生じる副産物として $(m+1) \times m$ の上ヘッセンベルグ行列 \bar{H}_m がある。ただし、 \bar{H}_m の ij 成分は $h_{i,j}$ とする。 \bar{H}_m の最後の行を取り除いた上ヘッセンベルグ行列を H_m とすると、アーノルディ原理の行列表現形として次式が成り立つ。

$$\begin{aligned} AV_m &= V_{m+1}\bar{H}_m \\ &= V_m H_m + h_{m+1,m} v_{m+1} e_m^T \end{aligned}$$

このとき近似解 x_m は

$$x_m = x_0 + V_m y_m$$

となり、 y_m は残差ノルムの最小 2 乗問題

$$\min_y \|b - Ax_m\|_2 = \min_y \|\beta e_1 - \bar{H}_m y\|_2$$

を解くことで求めることができる。ただし、残差ベクトルを r_m とすると、 $\beta = \|r_0\|_2$ である。

直交ベクトルの本数を m 本に制限することで、直交化にかかる計算時間と記憶領域を減少させている。

3 行列の前処理

連立 1 次方程式 (1) に反復法を直接適用すると、解が求まるまでに非常に多くの計算時間と反復回数を必要とすることがある。これは、反復法の収束率が係数行列のスペクトル特性に依存するからである。そこで、連立 1 次方程式 (1) を、良いスペクトル特性を持つものに変換してから反復法を適用することがある。このような処理を前処理といい、左側前処理と右側前処理がある。ここでは、次式で表される左側前処理を用いることとする。

$$M^{-1}Ax = M^{-1}b \quad (4)$$

ただし、 M^{-1} を前処理行列と呼び、 M^{-1} は A^{-1} を近似する。適切な前処理行列を選ぶことによって、より少ない計算時間と反復回数で解を求めることができるようになる。

3.1 スペクトルの情報を用いた前処理

ここでは、GMRES(m) 法の反復の中で、アーノルディ原理により得られる、行列 A のスペクトルの情報を用いた前処理を考える。

A の固有値を $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ ($|\lambda_1| \leq \dots \leq |\lambda_n|, |\lambda_n| = 1$) とする。また、行列 $V_k \in R^{n \times k}$ を V_m の最初の k 列から成るものとする。行列 M を

$$M = V_k H_k V_k^T + W_k W_k^T \quad (5)$$

とおく。この形の行列の逆行列を左側前処理行列として用いることにする。ただし、 $W_k W_k^T = I_n - V_k V_k^T$ である。 M は

$$M = \begin{bmatrix} V_k & W_k \end{bmatrix} \begin{bmatrix} H_k & 0 \\ 0 & I_{n-k} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} V_k^T \\ W_k^T \end{bmatrix}$$

と書くことができる。ただし、 I_{n-k} は $(n-k) \times (n-k)$ の単位行列である。このとき、 M の逆行列は存在して

$$M^{-1} = \begin{bmatrix} V_k & W_k \end{bmatrix} \begin{bmatrix} H_k^{-1} & 0 \\ 0 & I_{n-k} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} V_k^T \\ W_k^T \end{bmatrix}$$

である。ところで、行列 A は

$$\tilde{A} = \begin{bmatrix} V_k^T \\ W_k^T \end{bmatrix} A \begin{bmatrix} V_k & W_k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} H_k & \tilde{A}_{12} \\ 0 & \tilde{A}_{22} \end{bmatrix}$$

と相似であり、 \tilde{A}_{22} の固有値は $\lambda_{k+1}, \dots, \lambda_n$ である。このことから、

$$M^{-1}A = \begin{bmatrix} V_k & W_k \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I_k & H_k^{-1}\tilde{A}_{12} \\ 0 & \tilde{A}_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} V_k^T \\ W_k^T \end{bmatrix} \quad (6)$$

となる。式(6)から、 $M^{-1}A$ は固有値 $\lambda_{k+1}, \dots, \lambda_n, 1$ を持つことがわかる。つまり、前処理行列 M^{-1} を組み込むと、絶対値が小さい方から k 番目までの固有値をすべて1に変換することができる。それによって係数行列 $M^{-1}A$ の絶対値の小さい固有値が減少し、残差ノルムの収束を改善することができる。

3.2 前処理行列の構成方法

次に、前節で述べた前処理行列をどのように構成するかを考える。

アノルディ原理によって生成される $m \times m$ の上ヘッセンベルグ行列 H_m に対して、 $H_m - z_1 I_m = Q^{(1)} R^{(1)}$ を定義する。ただし、 $Q^{(1)}, R^{(1)} \in R^{m \times m}$ 、 $Q^{(1)}$ をユニタリ行列、 $R^{(1)}$ を上三角行列とする。このとき、

$$(A - z_1 I_m) V_m = V_m (H_m - z_1 I_m) + f_m e_m^T$$

$$(A - z_1 I_m) V_m = V_m Q^{(1)} R^{(1)} + f_m e_m^T$$

$$(A - z_1 I_m) (V_m Q^{(1)}) = (V_m Q^{(1)}) (R^{(1)} Q^{(1)}) + f_m e_m^T$$

$$A (V_m Q^{(1)}) = (V_m Q^{(1)}) (R^{(1)} Q^{(1)} + z_1 I_m) + f_m e_m^T$$

となる。ただし、 $f_m = h_{m+1,m} v_{m+1}$ である。ここで、 $V_m^{(1)} = V_m Q^{(1)}$ 、 $H_m^{(1)} = R^{(1)} Q^{(1)} + z_1 I_m$ とおくと、

$$A V_m^{(1)} = V_m^{(1)} H_m^{(1)} + f_m e_m^T$$

を得る。このとき、 $H_m^{(1)}$ もまた上ヘッセンベルグ行列である。続いて、 $H_m - z_2 I_m = Q^{(2)} R^{(2)}$ について、同様のことをする。その結果、 $m-k$ 回反復後

$$A V_m^{(m-k)} = V_m^{(m-k)} H_m^{(m-k)} + f_m e_m^T$$

となる。前処理行列では、 $V_m^{(m-k)}$ 、 $H_m^{(m-k)}$ の第 k 列までを取り出した行列 $V_k^{(m-k)}$ 、 $H_k^{(m-k)}$ を用いることになる。

次に、原点移動の大きさ z_1, \dots, z_{m-k} について考える。 $m \times m$ の上ヘッセンベルグ行列 H_m の固有値を $\{\theta_j^{(m)}\}_{j=1}^m$ とする。ただし、

$$|\theta_1^{(m)}| \leq |\theta_2^{(m)}| \leq \dots \leq |\theta_m^{(m)}|$$

とする。 $H_m = V_m^T A V_m$ が行列 A の直交射影であることから、 $\theta_j^{(m)}$ が A の固有値の良い近似であると考えられる。このことから、

$$z_j = \theta_{m+1-j}^{(m)}, \quad 1 \leq j \leq m-k$$

とおく。つまり、 z_j は A の大きい方から $m-k$ 個の固有値を近似している。このように選ぶことで $V_k^{(m-k)}$ が A の小さい方から k 個の固有値による近似不変部分空間を張ることになる。

以上のようにして得られる $V_k^{(m-k)}$ 、 $H_k^{(m-k)}$ を用いて、最初の前処理行列 M_1^{-1} を式(5)のように構成する。この結果得られる $M_1^{-1} A x = M_1^{-1} b$ に対する前処理行列 M_2^{-1} が同様の手順で得られる。言い換えると、連立1次方程式(1)に対する $M_{-1} = M_2^{-1} M_1^{-1}$ が得られる。以下同様にして、ある整数 $\alpha_0 \geq 1$ に対して、

$$M^{-1} = M_{\alpha_0}^{-1} M_{\alpha_0-1}^{-1} \dots M_1^{-1} \quad (7)$$

という前処理行列を決定する。

4 おわりに

以上のような前処理はGMRES(m)法の反復の中で、適応的に構成することができる。前処理行列を更新するために必要な計算は、近似解の更新と並行して行なうことができる。当日、このような前処理を適用したGMRES(m)法のアルゴリズムと数値実験の結果を報告し、その有効性について述べる。

参考文献

- [1] Y. Saad and M. H. Schultz: GMRES: A Generalized Minimal Residual Algorithm for Solving Nonsymmetric Linear Systems, *SIAM J. Sci. Stat. Comp.*, Vol. 7, No. 3, pp. 856-869 (1986).
- [2] J. Baglama, D. Calvetti, G. H. Golub, and L. Reichel: Adaptively Preconditioned GMRES Algorithms, *SIAM J. Sci. Comput.*, Vol. 20, No. 1, pp. 243-269 (1998).
- [3] R. Lehoucq: Analysis and Implementation of an Implicitly Restarted Arnoldi Iteration: Ph.D. Thesis, Rice University, Houston, (1995).