5N-1

シフトした線形システムに対する GMRES(m) 法の有効性について

平野 友貴　野寺 隆
慶應義塾大学理工学部

1 はじめに

大規模な線形計算の解法としてGMRES(m)法がある．このGMRES(m)法は，大型で疎な非対称正則行列を係数にした線形システム(連立1次方程式)

$$A\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b},\quad A\in \boldsymbol{C}^{n\times n}\quad \boldsymbol{x},\boldsymbol{b}\in \boldsymbol{C}^{n} \tag{1}$$

を解くための反復法の1つである．

本稿で扱うシフトした線形システムとは，

$$\hat{A}\hat{\boldsymbol{x}}=\boldsymbol{b},\quad \hat{A}\in \boldsymbol{C}^{n\times n}\quad \hat{\boldsymbol{x}},\boldsymbol{b}\in \boldsymbol{C}^{n} \tag{2}$$

であり，ここでの係数行列$\hat{A}=A+\alpha I$ ($\alpha\in\boldsymbol{C}, I$: $n\times n$の単位行列)も正則とし，右辺項$\boldsymbol{b}$は上の式(1)と同一である[1].

これら2つの線形システムを解くにあたり，従来のGMRES(m)法を用いてもいいが，A.Frommerら[2]が提案したShifted-GMRES(m)法を用いれば，少ない計算コストで計算できる．

2 GMRES(m)法

GMRES(m)法は，1986年にY.Saadら[3]によって提案された，クリロフ部分空間法の1つである．この解法は，初期残差ベクトルを$\boldsymbol{r}_0(=\boldsymbol{b}-A\boldsymbol{x}_0)$として，クリロフ部分空間を用いる．

$$K_m(A,\boldsymbol{r}_0)=\{\boldsymbol{r}_0,A\boldsymbol{r}_0,A^2\boldsymbol{r}_0,\ldots,A^{m-1}\boldsymbol{r}_0\}$$

この上に，正規直交ベクトルを各列にもった基底行列

$$V_m=[\boldsymbol{v}_1,\boldsymbol{v}_2,\ldots,\boldsymbol{v}_m]$$

を生成する．これを用いて近似解$\boldsymbol{x}_m$を

$$\boldsymbol{x}_m=\boldsymbol{x}_0+V_m\boldsymbol{y}$$

と構成する．ここでの$\boldsymbol{y}$は，残差ノルムの最小2乗問題

$$\begin{aligned}J(\boldsymbol{y}) &= \min_{\boldsymbol{y}}\|\beta\boldsymbol{v}_1-AV_m\boldsymbol{y}\|\\ &= \min_{\boldsymbol{y}}\|V_{m+1}(\beta e_1-H_m^*\boldsymbol{y})\|\\ &= \min_{\boldsymbol{y}}\|\beta e_1-H_m^*\boldsymbol{y}\| \end{aligned}\tag{3}$$

の解である．ただし，$\beta=\|\boldsymbol{r}_0\|_2$であり，$H_m^*$はアーノルディ過程で得られる上ヘッセンベルグ行列である．式(3)は，通常H_m^*をギブンス回転行列でQR分解することによって解くことができる．

3 Shifted-GMRES(m) 法

ここでは，上で述べたGMRES(m)法を，シフトした線形システムも解くように変形を施したShifted-GMRES(m)法について述べる．この解法は，クリロフ部分空間の性質を利用したもので，各反復で行なうアーノルディ過程での基底行列の生成を最小限にとどめ，計算コストのかかる行列ベクトル積を減らすことができる．

3.1 クリロフ部分空間

GMRES(m)法はクリロフ部分空間法の1つで，近似解$\boldsymbol{x}_m$が

$$\boldsymbol{x}_m\in\boldsymbol{x}_0+K_m(A,\boldsymbol{r}_0)$$

となるような反復法である．式(2)のシフトを行なったものに関しても同様に，

$$\hat{\boldsymbol{x}}_m\in\hat{\boldsymbol{x}}_0+K_m(\hat{A},\hat{\boldsymbol{r}}_0)$$

となるのは明らかである．ただし，$\hat{\boldsymbol{r}}_0=\boldsymbol{b}-\hat{A}\hat{\boldsymbol{x}}$とする．

ここで、初期近似解を$\boldsymbol{x}_0=\hat{\boldsymbol{x}}_0=0$とすれば，$\boldsymbol{r}_0=\boldsymbol{b}-A\boldsymbol{x}_0,\hat{\boldsymbol{r}}_0=\boldsymbol{b}-\hat{A}\hat{\boldsymbol{x}}_0$より，$\boldsymbol{r}_0=\hat{\boldsymbol{r}}_0=\boldsymbol{b}$となる．すると，2つのクリロフ部分空間は，

$$\begin{aligned}K_m(A,\boldsymbol{b}) &= span\{\boldsymbol{b},A\boldsymbol{b},A^2\boldsymbol{b},\ldots,A^{m-1}\boldsymbol{b}\}\\ K_m(\hat{A},\boldsymbol{b}) &= span\{\boldsymbol{b},\hat{A}\boldsymbol{b},\hat{A}^2\boldsymbol{b},\ldots,\hat{A}^{m-1}\boldsymbol{b}\}\end{aligned}$$

となり，線形性から$K_m(A,\boldsymbol{b})=K_m(\hat{A},\boldsymbol{b})$が成立し，クリロフ部分空間が一致する．よって，GMRES(m)法の性質から，アーノルディ過程で得られる基底行列が同じものになり，元の線形システムで1度だけ基底行列を生成すればよいことがわかる．

しかし，リスタートによって$\boldsymbol{x}_m \neq \hat{\boldsymbol{x}}_m$となり，リスタートした時点の初期残差が異なり，$K_m(A, \boldsymbol{r}_m) \neq K_m(\hat{A}, \hat{\boldsymbol{r}}_m)$ になってしまう．この状況を修正するため,「共線形条件 (colinear condition)」を加える必要がある．この条件とは,

$$\hat{\boldsymbol{r}}_m = \beta_m \boldsymbol{r}_m, \quad \beta_m \in \boldsymbol{C} \tag{4}$$

である．これは,

$$\hat{\boldsymbol{r}}_0 = \beta_0 \boldsymbol{r}_0, \quad \beta_0 \in \boldsymbol{C} \tag{5}$$

として初期残差の条件でもよい．

この条件は

$$\begin{cases} \cdot \quad A: \text{正定値行列} \\ \qquad (Re(A\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}) > 0, \quad \forall \boldsymbol{x} \neq 0) \\ \cdot \quad Re(\alpha) > 0 \end{cases} \tag{6}$$

のとき，成り立つことが分かっている [2].

3.2 アルゴリズム

ここでは，Shifted-GMRES(m) 法のアルゴリズムを式(4) の共線形条件から求めることにする．

$$\begin{aligned} & \hat{\boldsymbol{r}}_m = \beta_m \boldsymbol{r}_m \\ \Leftrightarrow \quad & \boldsymbol{b} - \hat{A}(\hat{\boldsymbol{x}}_0 + V_m \hat{\boldsymbol{y}}_m) = \beta_m V_{m+1} \boldsymbol{z}_{m+1} \\ \Leftrightarrow \quad & \hat{\boldsymbol{r}}_0 - \hat{A} V_m \hat{\boldsymbol{y}}_m = V_{m+1} \boldsymbol{z}_{m+1} \beta_m \end{aligned}$$

ここで，シフトした線形システムに対する上ヘッセンベルグ行列 $\hat{H}_m^*$ を定義する．

$$\hat{H}_m^* = H_m^* + \alpha \begin{bmatrix} 1 & & \\ & \ddots & \\ & & 1 \\ 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix} \in \boldsymbol{C}^{(m+1) \times m}$$

これを用いて，$\hat{A} V_m = V_{m+1} \hat{H}_m^*$ より

$$\begin{aligned} \Leftrightarrow \quad & \beta_0 \boldsymbol{r}_0 - V_{m+1} \hat{H}_m^* \hat{\boldsymbol{y}}_m = V_{m+1} \boldsymbol{z}_{m+1} \beta_m \\ \Leftrightarrow \quad & V_{m+1}(\hat{H}_m^* \hat{\boldsymbol{y}}_m + \boldsymbol{z}_{m+1} \beta_m) = \beta_0 \boldsymbol{r}_0 \\ \Leftrightarrow \quad & \hat{H}_m^* \hat{\boldsymbol{y}}_m + \boldsymbol{z}_{m+1} \beta_m = \beta_0 \|\boldsymbol{r}_0\|_2 \boldsymbol{e}_1 \end{aligned}$$

となる．最後の式を行列表現すると,

$$\left[\hat{H}_m^*, \boldsymbol{z}_{m+1}\right] \begin{bmatrix} \hat{\boldsymbol{y}}_m \\ \beta_m \end{bmatrix} = \beta_0 \|\boldsymbol{r}_0\|_2 \boldsymbol{e}_1$$

であり，この式を QR 分解により，解 $\hat{\boldsymbol{y}}_m, \beta_m$ を求める．この解が求まると,

$$\hat{\boldsymbol{x}}_m = \hat{\boldsymbol{x}}_0 + V_m \hat{\boldsymbol{y}}_m$$

から，シフトした線形システムの解 $\hat{\boldsymbol{x}}$ が得られる．

以上の式を従来の GMRES(m) 法のアルゴリズムに組み込めば，簡単に Shifted-GMRES(m) 法のアルゴリズムが得られる．

3.3 収束性

条件 (6) を満たす行列をもつような，式(2) のシフトした線形システムの収束性について考える．なお，通常の式(1) を解く GMRES(m) 法に関する収束性は Y.Saad[4] で保証されている．

2 つの線形システムの残差ノルムは，文面の関係で証明は省略するが,

$$\|\hat{\boldsymbol{r}}_m\|_2 \leq |\beta_0| \|\boldsymbol{r}_m\|_2$$

という関係がある [2]．これにより，通常は初期近似解を $\boldsymbol{x}_0 = \hat{\boldsymbol{x}}_0 = 0$ とするので，式(5) の初期残差についての共線形条件から $\beta_0 = 1$ となり，シフトしたものに対する残差 $\hat{\boldsymbol{r}}$ は常に元の残差 $\boldsymbol{r}$ よりも小さくなる．よって，元の線形システムが収束すれば，シフトした線形システムも収束し，なおかつ速く収束することになる．

4 おわりに

以上で述べてきた Shifted-GMRES(m) 法は従来の GMRES(m) 法よりも速く収束することができる．また，そのアルゴリズムの簡易性も注目すべき点である．その有効性を検証するために，発表当日は，Shifted-GMRES(m) 法と従来の GMRES(m) 法を比較した数値実験の結果を報告する．

参考文献

[1] R. Freund : Solution of shifted linear systems by quasi-minimal residual iterations, *in Numerical Linear Algebra, L. Reichel, A. Ruttan, and R. S. Varga, eds., de Gruyter, Berlin,* pp. 101-121 (1993).

[2] A. Frommer and U.Glässner : Restarted GMRES for shifted linear systems, *SIAM J. Sci. Comput.*, Vol. 19, No. 1, pp. 15-26 (1998).

[3] Y. Saad and M. H. Schultz : GMRES: A generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems. *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, Vol. 7, pp. 856-869 (1986).

[4] Y. Saad : Iterative methods for sparse linear systems, *PWS Publishing, Boston, MA,* (1996).