GMRES(m) 法の変形版とその収束性について

佐藤 洋平　　野寺 隆
慶應義塾大学理工学部

1 はじめに

GMRES 法や FOM(Full Orthogonalization Method) 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

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

を解くための反復解法の1つである．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，FOM(m) 法を用いることが多い．

一般に，GMRES(m) 法のリスタート周期 m は経験によって決められており, 現在のところ最適な m を決定する最良な方法はない．そこで，本稿では残差ノルムとクリロフ部分空間の関係を用いてリスタート周期を変動させて決めることを提案する．また，GMRES 法の残差ノルムを最小にする性質と FOM 法の残差ベクトルの完全直交性に注目し，この2つを組み合わせた解法についても述べる．

2 従来からの解法

この節ではすでに確立されている2つの解法について述べる．

2.1 GMRES(m) 法

GMRES(m) 法は，クリロフ部分空間:

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

上で，m 次元の正規直交基底:

$$V_m = (v_1, v_2, \ldots, v_m) \tag{3}$$

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 H_m が得られる．ただし，H_m の ij 成分は $h_{i,j}$ とする．H_m の最後の行を取り除いた上ヘッセンベルグ行列を $\overline{H}_m$ とし，アーノルディ原理を行列表現形すると次式が成り立つ．

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

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

$$\min_{y} \|b - Ax_m\|_2 = \min_{y} \|\beta e_1 - H_m y\|_2$$

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．また，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．

2.2 FOM 及び FOM(m) 法

FOM 法は GMRES 法と同様に正規直交基底をアーノルディ原理によって生成し，ガレルキン条件

$$r_m \perp K_m(A, r_0) \tag{4}$$

を用いると

$$y_m = \overline{H}_m^{-1}\|r_0\|V_m^T v_1 \Leftrightarrow y_m = \|r_0\|\overline{H}_m^{-1}e_1$$

となり y_m が決定される．この解法も記憶容量が大きくなるのを防ぐ1つの方法として GMRES(m) 法と同様に直交ベクトルの本数を m 本に制限することでリスタートしたものが FOM(m) 法である．FOM 法はガレルキン条件よりリスタートしたときでも $r_m \perp v_1$ が成立する．

3 新しい2つの解法

ここでは前節で述べた解法を用いて新たな解法を提案する．

3.1 GMRES($\alpha \le m \le \beta$) 法

最初に GMRES(m) 法の m を自動的に決めることを試みる．まず，ここで次の定理を用いる．

定理 1. ([2]) $\|\boldsymbol{b}\|$=1，$\boldsymbol{x}_0 = 0$($\boldsymbol{x}_0$ は初期値) とした時，$\forall m > 0$ に対して

$$\cos^2(\boldsymbol{r}_m^G, \boldsymbol{v}_1) = \|\boldsymbol{r}_m^G\|^2 = \frac{1}{1 + \|\hat{H}_m^{-T}\boldsymbol{h}\|^2}$$

ただし $\boldsymbol{r}_m^G$ は GMRES 法の m 回反復後の残差ベクトル，$\hat{H}_m^{-T}$ は $H_m = \begin{bmatrix} \boldsymbol{h}^T \\ \hat{H}_m \end{bmatrix}$ で表される $\hat{H}_m$ の転置逆行列，$\boldsymbol{h}^T \in R^m$ とする．

もし $\cos(\boldsymbol{r}_m^G, \boldsymbol{v}_1) = 1$ であるならば $K_m(A, \boldsymbol{r}_0) \equiv K_m(A, \boldsymbol{v}_1)$ がリスタート後に生成され停滞することになる．よって，これより残差ノルムが減少しなければ $\cos(\boldsymbol{r}_m^G, \boldsymbol{v}_1)$ が大きく，リスタートはほとんど新しい情報を生まなくなることになる．そこでリスタート間で

$$\|\boldsymbol{r}_m^{(i+1)}\| / \|\boldsymbol{r}_m^{(i)}\| \geq 1 - \varepsilon \qquad (5)$$

になった時はそのリスタート周期では新しい情報を生まないものとみなし，リスタート周期を一定数あげる．ただし，$\|\boldsymbol{r}_m^{(i)}\|$ は i 回リスタート後の GMRES 残差，ε は小さな正数とする．それを繰り返すことによって最適な係数 m にする．また，初期リスタート周期 α は通常小さいものにする．β は記憶容量上制限する上限のリスタート周期である．

3.2 FOM(m) 法+GMRES(m) 法

ここでは FOM(m) 法と GMRES(m) 法を組み合わせた方法について考える．GMRES(m) 法は残差ノルムが振動することはないが停滞する．逆に FOM(m) 法は停滞はしないが振動し，問題によっては発散する．

しかし，FOM(m) 法はガレルキン条件より，クリロフ部分空間と残差ベクトルが直交するので

$$\boldsymbol{v}_1^{(i+1)} \perp K_m(A, \boldsymbol{r}_0^{(i)})$$

が成立し，FOM(m) 法を実行した後 GMRES(m) 法を行うと少なくとも FOM(m) 法から GMRES(m) 法へ切り替わった最初のリスタートでは部分空間がうまく生成され残差も減少する．しかし，GMRES(m) 法は停滞しない場合には優れた解法であるので，停滞しない場合には GMRES(m) 法をそのまま使いたい．そこで定理 1 の関係も踏まえて GMRES(m) 法が停滞し新しいクリロフ部分空間が生成されなくなった時に FOM(m) 法を実行する．具体的には (5) 式を用いて GMRES(m) 法から FOM(m) 法への切替えを行う．そして

$$\|\boldsymbol{r}_m^{(i)G}\| > \|\boldsymbol{r}_m^{(i_0)F}\|$$

になったら再び GMRES(m) 法を実行する．ただし，$\|\boldsymbol{r}_m^{(i_0)F}\|$ は $\|\boldsymbol{r}_m^{(i)G}\|$ を用いて FOM(m) 法を i_0 回実行した後の残差．i_0 は FOM(m) 法のリスタートを行った回数とする．$\|\boldsymbol{r}_m^{(i)G}\| > \|\boldsymbol{r}_m^{(i_0)F}\|$ で切替える理由は，最初の数回は FOM(m) 法の残差ノルムが振動するため，残差ノルムが大きくなるからである．しかし，FOM(m) 法を実行した後は GMRES(m) 法の収束が良くなるので，こうすることによって GMRES(m) 法の停滞を防ぐことができ残差ノルムも減少する．

注目すべき所は FOM(m) 法か GMRES(m) 法のどちらかで解くことのできる問題は ε にもよるが，ほぼ全て解くことができ，かつ GMRES(m) 法と FOM(m) 法のどれよりも早く収束する場合が多いということである．

4 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，近似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．そこで連立方程式 (1) の係数行列を良いスペクトル特性をもつ行列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が今回は右側前処理

$$AM\boldsymbol{y} = \boldsymbol{b}, \quad \boldsymbol{x} = M\boldsymbol{y} \quad (M \approx A^{-1})$$

を用いる．M は前処理行列と呼ばれ，数値実験では不完全 LU 分解によって M を生成する事にする．

5 おわりに

当日ではここで述べた方法のアルゴリズムと前処理を行った場合とそうでない場合の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. Comput., 7(1986), pp. 856-869.

[2] V. Simoncini: On the convergence of restarted krylov subspace method, SIAM J. Matrix Anal Appl., 22, 2(2000), pp. 430–452.

[3] Y. Saad: Krylov subspace methods for solving large unsymmetric linear systems, Math. Comp., 37(1981), pp. 105–125.