FGMRES 法の収束性について*

1U－4

重富 剛志　稲津 隆敏　野寺 隆†
慶應義塾大学理工学部

1 はじめに

GMRES 法 [1] や FGMRES 法 [2] は, 大型の疎行列を係数とする連立一次方程式

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

の近似解 x を求めるための反復解法であり, クリロフ (Krylov) 部分空間法の仲間である。ただし, 方程式 (1) の係数行列 A は, 非対称な正則行列 $(n \times n)$ とする。

GMRES 法は, アーノルディ(Arnordi) 過程を用い, ヘッセンベルグ (Hessenberg) 形式の行列に変換し, このヘッセンベルグ行列を係数とする連立 1 次方程式をの解を求めていくアルゴリズム (算法) である。また, GMRES 法は, ステップごとに残差ベクトルを最小にするので, 残差ノルムは増加しないことが保証されている。

FGMRES 法 (Flexible Generalized Minimal RESidual Method) は, 前処理をより柔軟に行なうために GMRES アルゴリズムの変形版の一つである。その結果, FGMRES 法は一般的な GMRES 法には使用しない前処理を併用することが可能である。例えば, GMRES 法自身を用いた前処理や, 共役勾配法に基づく CGNR 法 (または, CGNE 法) などのいかなる反復法も, FGMRES 法の前処理として用いることができる。なお, FGMRES 法は, クリロフ部分空間において, 標準的な GMRES 法のアルゴリズムが持つ前処理された残差ノルムを最小にする性質と同様な性質を持つことが言える。

2 クリロフ部分空間法の前処理

クリロフ部分空間法を使って連立 1 次方程式 (1) の近似解を求めることは, 前処理された次の方程式の近似解を求めればよいことになる。

$$AM^{-1}(Mx) = b \tag{2}$$

通常, この方程式の係数行列 AM^{-1}を直接計算するのではなく, 連立 1 次方程式 $My = z$ を解くことに帰着される。即ち, 任意のベクトル z に対して, $M^{-1}z$が簡単に計算可能であればよいことになる。これは問題に依存するのだが, ある場合では行列 M を係数とする連立 1 次方程式の近似解の計算は, 緩和法を利用すれば 1 回から数回の反復で計算できることもある。すなわち, 前処理行列を係数とする方程式の近似解の計算にも反復法が利用可能である。言うなれば, 前処理された方程式 (2) を内部反復 (inner) と外部反復 (outer) という概念でとらえることができるからである。このように考えると, 前処理に別の Krylov 部分空間法を用いたり, 前処理行列を持つ方程式の解法に正規方程式を利用するアルゴリズムを使うことも考えられる。しかし, このようなアプローチをとると, 元のアルゴリズムの持つ収束性と同様の正しい収束性が保証されるかどうかという問題が生まれることも事実である。

3 GMRES のアルゴリズム

最初に, 右側から前処理した連立 1 次方程式 (2) の近似解を求めるための標準的な GMRES 法と FGMRES 法のアルゴリズムについて簡単に述べる。

3.1 GMRES(m) 法 (right preconditiong)

[1] スタート
初期値 x_0と m 次のクリロフ部分空間を選び, $(m+1)\times m$ 行列$\bar{H}_m$を定義し, この行列のすべての要素を $h_{ij}=0$ とする.

[2] アーノルディ過程

a. $r_0 = b - Ax_0$, $\beta = \|r_0\|_2$, $v_1 = r_0/\beta$を計算する。

b. $j = 1, \ldots, m$ に対して,

- $z_j := M^{-1}v_j$
- $\omega := Az_j$

---

*The Convergence Properties of FGMRES Method

†T. Shigetomi, T. Inadu and T. Nodera
Keio University, Department of Mathematics
3-14-1 Hiyoshi, Kouhoku, Yokohama,
Kanagawa, 223, Japan

- $i = 1, \ldots, j$に対して, 次式を計算する.

$$\begin{cases} h_{i,j} := (\omega, v_i) \\ \omega := \omega - h_{i,j} v_i \end{cases}$$

- $h_{j+1,j} = \|\omega\|_2$
- $v_{j+1} = \omega / h_{j+1,j}$

c. $V_m := [v_1, \ldots, v_m]$ とする。

[3] **近似解の計算**

$x_m = x_0 + M^{-1} V_m y_m$ を計算する。ただし, $y_m = \min_y \|\beta e_1 - \bar{H}_m y\|_2$, $e_1 = [1, 0, \ldots, 0]^T$ とする。

[4] **リスタート**

収束していなければ, $x_m \to x_0$ として, [2] に戻る。

アーノルディ過程のループでは, 修正グラム・シュミット法の直交化によって前処理されたクリロフ部分空間

Span $\{r_0, AM^{-1}r_0, \ldots, (AM^{-1})^{m-1} r_0\}$

の直交基底を作っている。

GMRES 法による近似解は, [3] の過程で前処理されたベクトル $z_j = M^{-1} v_j (j = 1, \ldots, m)$ の線形結合として計算できる。

前述のアルゴリズムで, ステップごとに前処理行列を変えてしまうと, [2] の b の過程における $z_j (= M^{-1} v_j)$ も変わってしまう。即ち, z_j を

$$z_j = M_j^{-1} v_j$$

と修正し, これらのベクトルを近似解の計算に用いるものとするアルゴリズムが FGMRES 法である。

3.2 FGMRES(m) 法 (variable preconditioning)

[1] **スタート**

初期値 x_0と m 次のクリロフ部分空間を選び, $(m+1) \times m$ 行列$\bar{H}_m$を定義し, この行列のすべての要素を $h_{ij} = 0$ とする.

[2] **アーノルディ過程**

a. $r_0 = b - Ax_0$, $\beta = \|r_0\|_2$,$v_1 = r_0 / \beta$ を計算する。

b. $j = 1, \ldots, m$ に対して, 次の計算をする.

- $z_j := M_j^{-1} v_j$
- $\omega := Az_j$
- $i = 1, \ldots, j$に対して, 次式を計算する.

$$\begin{cases} h_{i,j} := (\omega, v_i) \\ \omega := \omega - h_{i,j} v_i \end{cases}$$

- $h_{j+1,j} = \|\omega\|_2$
- $v_{j+1} = \omega / h_{j+1,j}$

c. $Z_m := [z_1, \ldots, z_m]$ とする。

[3] **近似解の計算**

$x_m = x_0 + Z_m y_m$ を計算する。ただし, $y_m = \min_y \|\beta e_1 - \bar{H}_m y\|_2$, $e_1 = [1, 0, \ldots, 0]^T$ とする。

[4] **リスタート**

収束していなければ, $x_m \to x_0$ として, [2] に戻る。

FGMRES 法は, GMRES 法のアルゴリズムの [2] の b における前処理行列を $M_j^{-1} (j = 1, \ldots, m)$ とし, [2] の c を

$$Z_m = [Z_1, \ldots, Z_m] \tag{3}$$

とおいて, [3] の近似解を生成する式を,

$$x_m = x_0 + Z_m y_m \tag{4}$$

として計算する。前述の GMRES 法と違うところは, 前処理されたベクトル z_j を解の更新に使うところである。よって, FGMRES 法は GMRES 法より, $z_j (j = 1, \ldots, m)$ を記憶しておく計算機の記憶領域が余分に必要になる。なお, $M_j = M (j = 1, \ldots, m)$ ならば, FGMRES 法は GMRES 法と同じアルゴリズムになることは言うまでもない。

4 数値実験

矩形領域 $\Omega = [0,1] \times [0,1]$ における次のような偏微分方程式のディリクレ境界条件問題を考える。

$$\begin{aligned} u_{xx} + u_{yy} + au_x + bu_y &= f(x,y) \\ u(x,y)\,|_{\partial\Omega} &= g(x,y) \end{aligned}$$

この方程式を 5 点中心差分近似を用いて離散化し, 係数 a 及び b に適当な値を設定して数値実験を行うものとする。

FGMRES(k) に関する詳細な数値実験の結果は, 当日会場にて報告する.

参考文献

[1] Youcef Saad and Martin H. Schultz, "*GMRES For Solving Nonsymmeteric Linear Systems*," SIAM J. Stat. Comput. Vol. 7, No. 3, pp. 856-869, July 1986.

[2] Youcef Saad, "*A Flexible Inner-Outer Preconditioned GMRES Algorithm*," SIAM J. Sci. Comput. Vol. 14, No. 2, pp. 461-469, March 1993.