ハイブリッド GMRES 法について

6F－5

金子 拓也, 野寺 隆*
慶應義塾大学 理工学部

1 はじめに

疎な大型の行列を係数とする連立１次方程式

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

の解法には, さまざまな算法がある. ただし, A を $n \times n$ の非対称な正則行列, x, b を n 次元ベクトルとする. 本研究では, これらの算法が第２節で述べる２つのカテゴリーに分類できる事を述べ, (i) に属する方法の欠点を (ii) に属する方法の利点で補うハイブリッド GMRES 法について, 様々な数値実験とともに報告する.

2 ハイブリッド法について

ハイブリッド法について, 簡単に説明することにする.

2.1 ハイブリッド法とは

一般に反復解法は以下の２つのカテゴリーに分類できる.

(i) CGN 法, CGS 法, GMRES 法, Arnoldi 法など：係数行列 A に関する事前情報を必要としない方法.

(ii) Richardoson 法, Chebyshev 法 など：係数行列 A に関する事前情報を必要とする方法.

ただし, 事前情報とは係数行列 A の固有値の最大値や, 最小値や固有値の分布に関する事柄とする.

そこで, (i) の方法から得た係数行列 A に関する情報を (ii) の方法に渡し, 効率的に残差ノルムを収束させる方法をハイブリッド法という.

ハイブリッド法は, 以下の２つのフェーズに分割できる.

Phase I: (i) に属する反復法により, 係数行列 A に関する情報を得る.

Phase II: 得られた情報を (ii) に属する反復法に適応する.

通常は, Phase I から Phase II の順で近似解を構成するが, Phase II での反復解法の収束率が悪い場合には, 十分な収束率を得るために Phase II から Phase I に戻ることも可能である. また, 一般的な反復解法をハイブリッド化する理由は, (i) に属する算法は, 反復が進むにつれて (ii) に属する算法よりも１反復あたりの計算量が多くなるからである. 特に, これは GMRES 法などのクリロフ部分空間上で解を構成する反復法にあてはまる. なぜなら, それらの算法は反復回数が増えるにつれて計算量や作業領域が増えてしまう欠点を持つからである. そこで, (i) でその欠点が表れる前に (ii) に切替えることによって, 効率的に近似解を求める算法を考えるこができる.

[一般的なハイブリッド法の算法]

Arnoldi 法 や GMRES 法 などのクリロフ部分空間上で解を構成する方法を用いて, 連立１次方程式 (1) の係数行列 A の固有値を推定し, その推定された固有値を取り囲む多項式を構成する. 次に, 構成された多項式を用いて Arnoldi 法 または Chebyshev 法 で (1) の解を求める.

2.2 固有値について

多くのハイブリッド法は, まず連立１次方程式 (1) の係数行列 A の固有値を推定し, 複素平面上で, それらを取り囲む領域を作り, その領域を示す多項式を構成する. 通常, 係数行列 A の推定固有値は正確な固有値についての十分な情報を含んでいないことや, 係数行列 A の推定固有値を取り囲む領域が, 正確な固有値を取り囲む領域に対して, 必ずしも狭いということはできないことから, 従来の固有値推定を

*Department of Mathematics, Faculty of Science and Technology, Keio University, 3-14-1 Hiyoshi Kohoku Yokohama 223, Japan.

行なう操作が不適切なことがわかる.

それでは.なぜ現存するハイブリッド法で収束できるのか. それは, 推定固有値は正しいスペクトルよりも,疑似スペクトルに近付く傾向があるからである. この場合, 疑似スペクトルが良い反復パラメータを与え,時々正確な固有値よりも,優れた収束率をもたらすからである. しかし.連立1次方程式 (1) の任意な係数行列に対して,上記の事柄がすべて成立しているわけではない.

3 ハイブリッド GMRES 法

ハイブリッド GMRES 法の算法とそれに関連する問題点について述べることにする.

3.1 ハイブリッド GMRES 法の算法

ハイブリッド法の Phase I では, GMRES 法や Arnoldi 法などのようにクリロフ部分空間上において近似解を構成する算法を用いている. しかし, 本発表で提案する算法は, 固有値推定を一切行なわないところが他のハイブリッド法と異なる. もちろん, 係数行列 A の推定固有値を囲い込む領域の計算を行なわず, 複素平面上で推定固有値を求めることもない. つまり, Phase I では, 固有値を推定する操作を含む Arnoldi 法ではなく, GMRES 法が用いられる. これにより, このハイブリッド法は今までに提案されたどんなハイブリッド法よりも簡単な算法になった.

ハイブリッド GMRES 法は, 次の2種類のフェーズに分類できる.

Phase I: 残差ノルムが適当な大きさに収束するまで. GMRES 法を行なう.

Phase II: Phase I の GMRES 法により得られた残差多項式を収束するまで繰り返し Richardson 法へ反復を切替える.

[ハイブリッド GMRES 算法]

連立1次方程式 (1) の解を求めるにあたり, GMRES 法でちょうど良い残差ノルムの収束値 (例えば, 10^{-3}程度の値) が得られるまで反復を繰り返す. Phase II に切り替わる前に得られた残差ベクトルから残差多項式を構成し, Richardson 法へこれを渡し. (1) の残差ノルムが目的の収束条件を満たすまで再び反復を繰り返す.

3.2 ハイブリッド GMRES 法の問題点

ハイブリッド GMRES 法には, 以下にあげる問題点が残されている.

(1) Phase I を終了させるタイミングの決定. すなわち残差ノルムのちょうど良い収束値とはどのような値か.

(2) GMRES 法からどのように残差多項式を構築するのか.

(3) その残差多項式をどのようにして Phase II へ適応するのか.

(4) 収束を確実にするためには, どのような事前策が必要になるか.

(5) この算法の理論的な特性とは何か.

(6) 実際どのようにして, ハイブリッド GMRES 法を実装するのか.

Phase I から Phase II へと切替えるタイミングは, Phase I の仕事量と Phase II の仕事量が等しくなる時に切替えれば良いことが数値実験により確かめられた. 仕事量は, 反復回数と1回の反復で必要な仕事量の積からもとめることができる. また残差多項式は, GMRES 法のなかで得られるヘッセンベルグ行列と残差ベクトルを用いて求めることができる.

4 おわりに

本稿では, GMRES 法を使って新しいハイブリッド法を提案した. この算法では, 発散を避ける為の事前策を構じてはいるものの, まだ全ての問題に対してベストな反復解法であるとは言い難い部分を残している.

さらに詳しい解法と残りの諸問題については, 当日, 様々な数値実験とともに報告する.

参 考 文 献

[1] Noël M. Nachtigal, Lothar Reichel and Lloyd N. Trefethen, *A hybrid algorism for nobsymmetric linear systems*, SIAM J. Matrix Anal Appi., 7(1992), pp. 796-825.

[2] Y .Saad and M. H. Schultz. *GMRES: A generalized minimum residual algorithm for solving nonsymmetric linear system*, SIAM J. Sci. Statist. Comput.,7(1986), pp. 856-869.