

## Ritz 値を使った GMRES 法の収束性の評価について

張 臨 傑<sup>†</sup> 野 寺 隆<sup>††</sup>

GMRES 法は大型で疎な非対称行列を係数行列として持つ連立 1 次方程式を解くための反復法の 1 つである。Ritz 値と調和 Ritz 値は係数行列の近似固有値である。Arnodi 法を利用した GMRES 法において、Ritz 値と調和 Ritz 値は低いコストで求められる。しかも、GMRES の収束性は Ritz 値と調和 Ritz 値の関係から評価できる。本稿では、Ritz 値を使った GMRES 法の収束性の評価について述べる。

### Evaluation of the Convergence of GMRES method by using Ritz Values

LINJIE ZHANG<sup>†</sup> and TAKASHI NODERA<sup>††</sup>

GMRES is one of the Krylov subspace iterative methods for solving nonsymmetric linear systems. The Ritz values and the Harmonic Ritz values are approximate eigenvalues, which can be computed cheaply within the GMRES iterations. Also, we can use the difference between the Ritz values and the Harmonic Ritz values to evaluate the convergence of the GMRES. In this paper, we will evaluate the convergence of GMRES by using the relation of Ritz values and harmonic Ritz values.

#### 1. はじめに

GMRES 法は、楕円型偏微分方程式の境界値問題等を有限要素法や有限差分法によって離散化して得られる大型で疎な非対称正規行列を係数に持つ連立 1 次方程式

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

を解くための反復法の 1 つである。

通常では、計算量や記憶容量などの面からリスタート版の GMRES( $m$ ) 法を用いることが多い。一般に GMRES( $m$ ) のリスタート周期  $m$  は経験に決められている。リスタート周期を決定するさまざまな手法が提案されているが、現在のところ  $m$  を決定する最適な方法は見つかっていない。

Ritz 値と調和 Ritz 値は行列の近似固有値である。Arnodi 法を利用した GMRES 法において、方程式 (1) の係数行列  $A$  の Ritz 値と調和 Ritz 値は簡単に求められる。本稿では、Ritz 値と調和 Ritz 値との関係から、GMRES の収束性を評価することについて述べる。

まず 2 章でクリロフ部分空間を構成する Arnodi 法について述べる。3 章では GMRES 法について述べる。4 章では、Ritz 値と調和 Ritz 値と GMRES 法の収束性との関係について述べる。5 章では、Ritz 値を使った GMRES 法の収束性の評価を数値的に示す。最後に 6 章においてまとめと結論を述べる。

#### 2. Arnodi 法

方程式 (1) を解くための様々な反復法と固有値問題の解法として、クリロフ部分空間法はよく使われている。クリロフ部分空間は与えられた行列  $A \in R^{n \times n}$  とベクトル  $r_0 \in R^n$  に対して、次のように定義されたものである

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

一般的に、クリロフ部分空間の正規直交基底は Arnodi 法により求められる。Arnodi 正規直交基底  $\{v_1, v_2, \dots, v_m\}$  は、クリロフ部分空間の基底  $\{r_0, Ar_0, A^2r_0, \dots, A^{(m-1)}r_0\}$  を正規直交化した基底である。Arnodi 法のアルゴリズムを図 1 に示す。

Arnodi 過程で得られたベクトル列  $(v_1, v_2, \dots, v_m)$  は、クリロフ部分空間  $K_m(A, r_0)$  の正規直交基底である。スカラー  $h_{i,j}$  は上ヘッセンベルグ行列  $H_m \in R^{m \times m}$  の第  $(i, j)$  番目の要素である。

<sup>†</sup> 慶應義塾大学大学院理工学研究科  
Graduate School of Science and Technology, Keio University

<sup>††</sup> 慶應義塾大学理工学部  
Faculty of Science and Technology, Keio University

1. Start with  $A$  and  $r_0$
2.  $v_1 = r_0$
3. for  $j = 1, 2, \dots, m-1$
4.  $\bar{v} = Av_j$
5. for  $i = 1, 2, \dots, j-1$
6.  $h_{i,j} = v^H \bar{v}$
7.  $\bar{v} = \bar{v} - h_{i,j} v_i$
8.  $h_{j+1,j} = \|\bar{v}\|_2$
9.  $v_{j+1} = \frac{\bar{v}}{h_{j+1,j}}$

図1 Arnoldi 法

$$H_m = \begin{pmatrix} h_{1,1} & h_{1,2} & \dots & h_{1,m-1} & h_{1,m} \\ h_{2,1} & h_{2,2} & \dots & h_{2,m-1} & h_{2,m} \\ & h_{3,2} & \dots & h_{3,m-1} & h_{3,m} \\ & & \ddots & \vdots & \vdots \\ & & & h_{m,m-1} & h_{m,m} \end{pmatrix}$$

ここで、行列  $V_m = (v_1, v_2, \dots, v_m) \in R^{n \times m}$  の列ベクトルはクリロフ部分空間の正規直交基底なので、行列  $V_m$  は正規直交行列である。ヘッセンベルグ行列  $H_m$  と行列  $V_m$  は式 (3) の関係を満たす。

$$AV_m = V_m H_m + h_{m+1,m} v_{m+1} e_m^H = V_{m+1} \bar{H}_m \quad (3)$$

ただし、 $\bar{H}_m$  は上ヘッセンベルグ行列  $H_m$  にベクトル  $(0 \dots 0 \ h_{m+1,m})$  を加えた  $R^{(m+1) \times m}$  行列である。さらに、式 (3) の両端に  $V_m$  をかけると、次の式 (4) が得られる。

$$H_m = V_m^H AV_m \quad (4)$$

式 (3) と式 (4) の行列  $H_m$  は、4 章で述べる Ritz 値と調和 Ritz 値を求めるために使われる。

### 3. GMRES 法

GMRES 法は、連立 1 次方程式を解くクリロフ部分空間法の 1 つである。1986 年に Y. Saad ら<sup>1)</sup> によって提案された。最初に初期近似解を  $x_0$  とする。初期残差ベクトルを  $r_0 = b - Ax_0$  とした時に第  $i$  回目の反復における残差ノルムは次式で決定される。

$$\min_{z \in K_i} \|b - A(x_0 + z)\|_2 = \min_{z \in K_i} \|r_0 - Az\|_2$$

ただし、 $z$  はクリロフ部分空間  $K_i(A, r_0)$  上の正規直交ベクトル列  $V_i = \{v_1, v_2, \dots, v_i\}$  を使って  $z = V_i y$  と表され、 $y$  はその時の残差ノルムを最小にするように選ばれる。つまり、次式の最小二乗問題を解くことになる。

$$\begin{aligned} J(y) &= \|\beta v_1 - AV_i y\|_2 \\ &= \|V_{i+1}(\beta e_1 - H_i y)\|_2 \\ &= \|\beta e_1 - H_i y\|_2 \end{aligned} \quad (5)$$

ただし、 $\beta = \|r_0\|_2$ 、 $e_1 = (1, 0, \dots, 0)^T$  であり、 $H_i$  は Arnoldi 過程から得られる上ヘッセンベルグ行列である。式 (5) は一般に  $H_i$  をギブンス回転行列で QR 分解することによって求めることができる。こうして得られた  $y$  を使うことによって第  $i$  回目の近似解は、 $x_i = x_0 + V_i y$  で求められる。図 2 に GMRES 法のアルゴリズムを示す。

1. choose an initial guess  $x_0$
2. set  $r_0 = b - Ax_0, \gamma = \|r_0\|_2$
3.  $v_1 = r_0/\gamma$
4. for  $n = 1, 2, \dots$
5.  $\hat{v} = Av_n$
6. for  $i = 1, 2, \dots, n$
7.  $h_{i,n} = (\hat{v}, v_i)$
8.  $\hat{v} = \hat{v} - h_{i,n} v_i$
9. end
10.  $h_{n+1,n} = \|\hat{v}\|_2$
11.  $v_{n+1} = \hat{v}/h_{n+1,n}$
12. end
13.  $y = \min_y \|\gamma e_1 - \bar{H}_m y\|_2$
14.  $x_m = x_0 + V_m y, r_m = b - Ax_m$
15. if  $r_m/\gamma < \epsilon$  then
16. stop iteration
17. endif

図2 GMRES 法

GMRES 法は、高々  $n$  回の反復で解を求めることが可能である。しかし、GMRES 法は非対称行列を扱うため、CG 法のように簡単な 3 項漸化式で書き表すことができない、反復回数が増えるたびに、ベクトル列  $(v_1, v_2, \dots, v_n)$  と上ヘッセンベルグ行列  $\bar{H}_m$  を保存しておく必要がある。これは、計算容量および記憶容量の点から実用的であるとは言えない。そこで、直交ベクトルの本数を  $m \ll n$  に制限し、そのときの近似解を新たな新規近似解として次の反復を行う GMRES( $m$ ) 法がよく使われる。 $m$  はリスタート周期と呼ばれる。GMRES( $m$ ) 法は、計算量と記憶容量の面でもより有効な方法である。しかし、適当な  $m$  を決めるのは難しい。一般的には経験によって決められているが、現在のところ  $m$  を決定する最良の方法はない。

リスタート周期  $m$  を固定する方法と異なる周期を変動させる GMRES( $m$ ) 法もある。

#### 4. Ritz 値, 調和 Ritz 値と GMRES 法の収束性との関係

##### 4.1 Ritz 値

定義 1 (G. L. G. Sleijpen ら<sup>4)</sup>): ある線形部分空間  $W_k \in C^n$  に対して, 下記の式 (6) を満たすベクトル  $x$  は行列  $A$  の部分空間  $W_k$  に関連する Ritz ベクトル, スカラー  $\mu$  は  $x$  に関連する Ritz 値である.

$$x \in W_k, \quad x \neq 0, \quad (Ax - \mu x) \perp W_m \quad (6)$$

この定義に従って, 第 2 章で述べた Arnoldi 法を使って生成したクリロフ部分空間  $\mathcal{K}_m(A, r_0)$  から, 固有方程式の残差ベクトル  $Ax - \mu x$  は,  $\mathcal{K}_m(A, r_0)$  と直交するように  $A$  の近似固有ベクトル  $x = V_m y_m$  を選ぶ.  $V_m$  の列ベクトルは Arnoldi 正規直交基底である.

$$(Ax - \mu x) \perp \mathcal{K}_m(A, r_0) \quad (7) \\ \Leftrightarrow V_m^H (AV_m y_m - \mu V_m y_m) = 0$$

式 (7) に式 (4) を代入すると, 式 (8) になる.

$$H_m y_m = \mu y_m \quad (8)$$

従って, クリロフ部分空間  $\mathcal{K}_m(A, r_0)$  から選んだ Ritz ベクトルと対応する Ritz 値は行列  $H_m = V_m^H A V_m$  の固有値である.

##### 4.2 調和 Ritz 値

定義 2 (G. L. G. Sleijpen ら<sup>4)</sup>): ある線形部分空間  $W_k \in C^n$  に対して, もし  $\bar{\mu}^{-1}$  がこの部分空間に関連する行列  $A^{-1}$  の Ritz 値なら,  $\bar{\mu}$  は部分空間  $W_k$  に関連する行列  $A$  の調和 Ritz 値とある.

S. Goossens ら<sup>2)</sup> は, 定義 2 から次の定理 1 を証明した.

定理 1 (S. Goossens ら<sup>2)</sup>): 調和 Ritz 値は固有値方程式の残差ノルムを最小にするようにクリロフ部分空間から選んだ近似固有ベクトルと対応する近似固有値である.

本稿では, 定理 1 を使って式 (3) から調和 Ritz 値を計算する. クリロフ部分空間  $\mathcal{K}_m(A, r_0)$  から近似固有ベクトル  $x = V_m y_m$  を選ぶ. この場合, 固有値多項式の残差ノルムを最小化するために, 残差ベクトルは  $AK_m(A, r_0)$  と直交することが要求される.

$$(Ax - \mu x) \perp AK_m(A, r_0) \\ \Leftrightarrow (AV_m)^H (AV_m y_m - \mu V_m y_m) = 0$$

ここで, 式 (3) を利用すると, 上記固有値問題は

$$\bar{H}_m^H \bar{H}_m y_m = \mu H_m^H y_m \quad (9)$$

となる. もし  $H_m$  は正規行列なら, 式 (9) は

$$H_m^{-H} \bar{H}_m^H \bar{H}_m y_m = \mu y_m \quad (10)$$

になる. 次に,  $H_m^{-H} \bar{H}_m^H \bar{H}_m$  を整理すると, 式 (11) が得られる.

$$H_m^{-H} \bar{H}_m^H \bar{H}_m = H_m + h_{m+1,m}^2 f_m e_m^H \quad (11)$$

ただし,  $f_m = H_m^{-H} e_m$  とする. すなわち, 行列  $A$  の調和 Ritz 値は,  $H_m + h_{m+1,m}^2 f_m e_m^H$  の固有値となる.

##### 4.3 Ritz 値, 調和 Ritz 値と GMRES 法の収束性との関係

4.1, 4.2 節では, Ritz 値は  $H_m$  の固有値であり, 調和 Ritz 値は  $H_m + h_{m+1,m}^2 f_m e_m^H$  の固有値であることを述べた. この章では, Ritz 値と調和 Ritz 値と GMRES 法の収束性との関係について述べる. 対称行列の場合, Ritz 値と調和 Ritz 値はインターレースすることになる. しかも, 両方とも係数行列の固有値に収束するので, Ritz 値と調和 Ritz 値の差は小さくなると期待できる (C. C. Paige ら<sup>3)</sup> を参照). 本稿では非対称行列の取り扱いについて述べる.

$f_m = H_m^{-H} e_m$  から  $\|f_m\|_2 \leq 1/\sigma_{\min}(H_m)$  は明らかに成立する. ただし,  $\sigma_{\min}(H_m)$  は  $H_m$  の最小の特異値となる.

式 (11) の 2 番目の要素の 2 ノルムの上界は, 次のようになる.

$$\|h_{m+1,m}^2 f_m e_m^H\|_2 \leq \frac{h_{m+1,m}^2}{\sigma_{\min}(H_m)} \quad (12)$$

ここで,  $h_{m+1,m} = 0$  の場合, すなわち不変なクリロフ部分空間が得られた場合には, Ritz 値と調和 Ritz 値と一致することになる. ただし,  $h_{m+1,m}$  の値が大きい, 又は  $\sigma_{\min}(H_m)$  の値が小さい場合には, Ritz 値と調和 Ritz 値の差は大きくなる. これは GMRES 法が停滞する条件と一致する. すなわち, GMRES 法が停滞する際に, Ritz 値と調和 Ritz 値の差は大きくなる. これに対して, GMRES 法が収束する際には, Ritz 値と調和 Ritz 値の差は小さくなる. この事実を 5 章の数値例で示すことにする.

#### 5. 数値実験

本稿の 4.3 節で述べた事柄を数値例で明らかにするために, 数値実験を行った.

数値実験は以下の環境で行なった.

- 計算機: DELL
- OS: Red Hat Linux7.2
- CPU: Intel 2.4GMHz
- メモリ: 1Gb

数値実験は以下の条件のもとで行なった.

- 収束判定条件:  $\|r_k\|_2 / \|r_0\|_2 \leq 1.0 \times 10^{-12}$
- 初期値ベクトル:  $x_0 = (0, 0, \dots, 0)^T$
- プログラム言語: C 言語
- 計算精度: 倍精度

数値実験では GMRES 法の Arnoldi 過程で構成され

る行列の固有値を計算することになる。その際、CLAPACK<sup>5)</sup> のルーチン `dgeev_` を用いる。これは、行列の固有値を計算するルーチンである。

### 5.1 数値実験 1

GMRES が停滞する問題  $A_n x_n = b_n$  を考える。

$$A_n = \begin{pmatrix} 0 & 1 & & & \\ & \ddots & \ddots & & \\ & & 0 & 1 & \\ 1 & & & & 0 \end{pmatrix} \in R^{n \times n},$$

$$b_n = \begin{pmatrix} \varepsilon \\ \vdots \\ \varepsilon \\ 1+\varepsilon \end{pmatrix} \in R^n$$

ただし、 $\varepsilon$  は小さい正数の値である。係数行列  $A_n$  の固有値は  $\lambda^n = 1$  を満たす。従って、行列  $A_n$  の固有値は複素平面上で単位円にある正多角形を形成する。 $\varepsilon = 10^{-6}$ ,  $n = 20$  にして数値実験を行った。19 回反復した後、GMRES の残差ノルムは  $1 - 2.0 \times 10^{-12}$  から  $1 - 3.8 \times 10^{-11}$  までしか減少しなかった。つまり停滞していた。 $m \leq n$  の場合、式 (3) の行列  $\tilde{H}_m$  は次の行列  $\tilde{H}_m^* \in R^{(m+1) \times m}$  で近似できる。

$$\tilde{H}_m^* = \begin{pmatrix} 2\varepsilon & 2\varepsilon & \dots & 2\varepsilon \\ 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & \ddots & \\ & & & 1 \end{pmatrix} \quad (13)$$

この近似から Ritz 値  $|\mu^{(m)}| = O(\sqrt{2\varepsilon})$  の値が明らかになる。この場合  $\sigma_{\min}(H_m) \approx 2\varepsilon$ ,  $h_{ij} \approx 1$ . 式 (12) の右辺、つまり、Ritz 値と調和 Ritz 値の差の上界は  $1/2\varepsilon$  となる。これは、 $\varepsilon$  の値が小さければ小さいほど、Ritz 値と調和 Ritz 値の差の上界は大きくなることを示している。

クリロフ部分空間  $\mathcal{K}_{10}$  から計算した Ritz 値と調和 Ritz 値を図 3 に示す。 $\mathcal{K}_{19}$  から計算した Ritz 値と調和 Ritz 値を図 4 に示す。

GMRES 法が停滞する際には、Ritz 値と調和 Ritz 値は差が大きくなることをこの数値実験は示している。しかも、反復回数が大きくなっても、Ritz 値と調和 Ritz 値の差が減少する傾向はまったく見られなかった。

### 5.2 数値実験 2

矩形領域  $\Omega = [0, 1] \times [0, 1]$  における定常状態の移流拡散問題を取り上げて前処理無しの GMRES 法を使って近似解を求めることを考える。

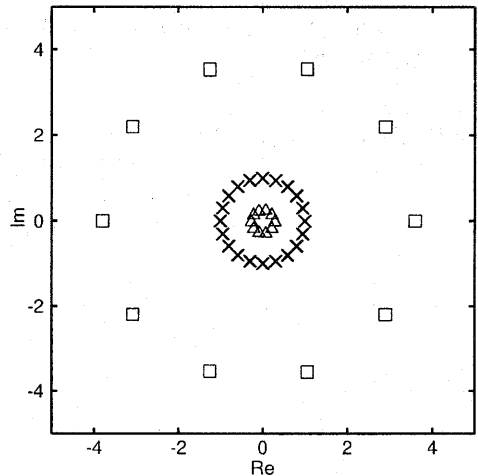


図 3  $\mathcal{K}_{10}$  から計算した Ritz 値 (□) と調和 Ritz 値 (△), (×) は真の固有値である。

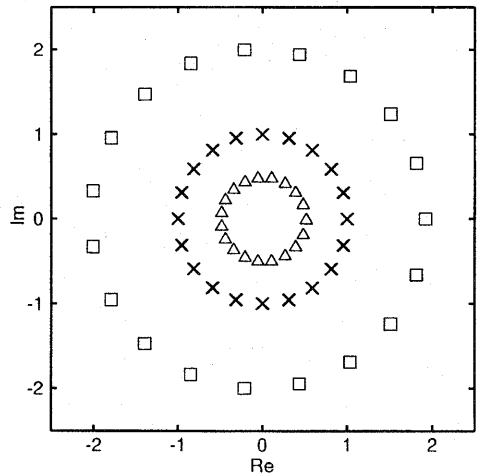


図 4  $\mathcal{K}_{19}$  から計算した Ritz 値 (□) と調和 Ritz 値 (△), (×) は真の固有値である。

$$\begin{aligned} -v \nabla^2 u + \vec{w} \nabla u &= f \text{ in } \Omega \\ u(x, y)|_{\partial\Omega} &= 0 \end{aligned}$$

ただし、 $v = 10^{-6}$ ,  $\vec{w} = (-1/\sqrt{2}, 1/\sqrt{2})$ . この方程式を 5 点中心差分近似を用いて離散化して、真の解を  $u(x, y) = 1 + xy$  と設定して右辺  $f$  を決定した。なお、メッシュ幅は  $h = 1/17$  とした。従って、得られる行列の次元は 256 である。

反復回数と相対残差の推移を図 5 に示す。反復 100 回目から 160 回目まで収束は遅かった、いわゆる残差

ノルムの停滞が起こっていた。また、反復 160 回目から収束は速かった。反復 120 回目と反復 180 回目においてそれぞれの Ritz 値と調和 Ritz 値を図 6 と図 7 に示す。反復 180 回目における Ritz 値と調和 Ritz 値の差は反復 100 回目より遥かに小さい。この結果は 4.3 節で述べたことと一致している。

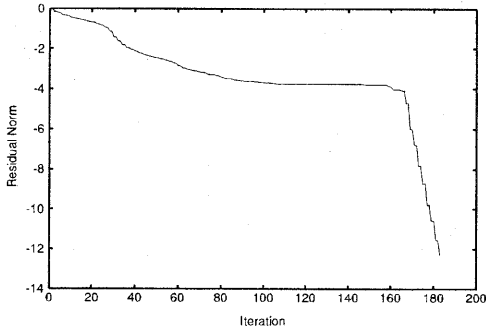


図 5 反復回数と相対残差の推移

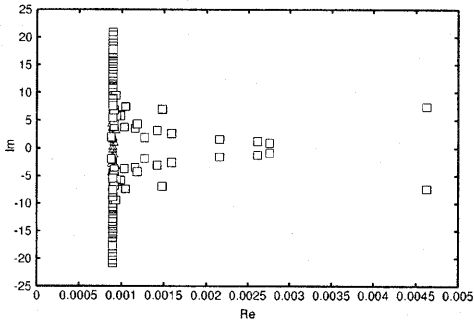


図 6 STEP120 における Ritz 値 (□) と調和 Ritz 値 (△)

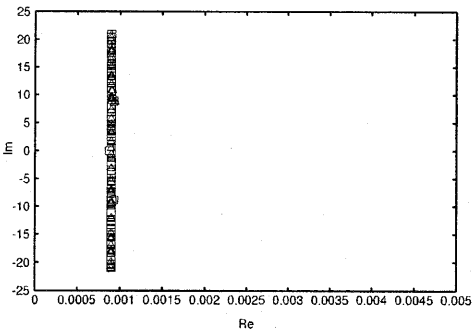


図 7 STEP180 における Ritz 値 (□) と調和 Ritz 値 (△)

ただし、図 7 には、いくつかの Ritz 値はほかの点からかなり離れたので、図 7 の表示範囲を超えている。反復するたびに、Ritz 値と調和 Ritz 値の差の変化を分析するために、反復ごとに、複素平面上で各 Ritz 値と一番近い調和 Ritz 値との距離の平均値を計算した。この評価方法を使って偽物の近似固有値に影響されにくくなる。

この評価方法を使って得られた反復回数と Ritz 値を調和 Ritz 値の差の推移を図 8 に示す。

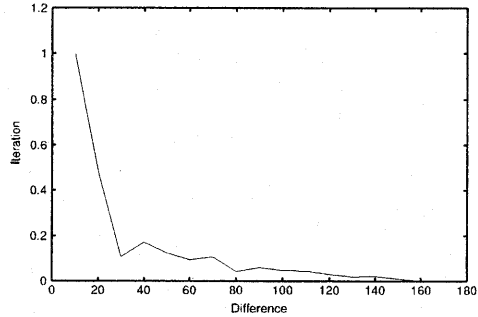


図 8 反復回数と Ritz 値と調和 Ritz 値の差の推移

図 5 と図 8 と比較してみると、図 5 の残差ノルムが停滞している時でも、図 8 での Ritz 値と調和 Ritz 値の差は減少する傾向を変えないことがわかる。これは、リスタート無しの GMRES 法が、反復するたびに、確実により良い部分空間を作れるからである。

## 6. おわりに

**結論:** GMRES 法が停滞する際には、Ritz 値と調和 Ritz 値の差は大きくなる。これに対して、GMRES 法が収束する際には、Ritz 値と調和 Ritz 値の差は小さくなる。

Ritz 値を求めるための行列  $H_m$  と調和 Ritz 値を求めるための行列  $H_m + h_{m+1,m}^2 f_m e_m^H$  は Arnoldi 法を利用した GMRES( $m$ ) 法において、計算コストは  $m$  に依存するので、実際には低い。本稿では、非対称クリロフ部分空間法の収束性を分析する際に、Ritz 値と調和 Ritz 値の値を両方計算することを勧めている。この結論の 1 つの応用として、Ritz 値と調和 Ritz 値の差から GMRES の収束性を予測する新しいリスタート付きの GMRES 法が考えられると思われる。

今後の課題は、リスタート付きの GMRES 法において、本稿で述べた結論の実用性を研究することである。このため、Ritz 値と調和 Ritz 値の差を有効的に評価する方法を探し出すことである。さらに、GMRES( $m$ ) 法と比べて、Ritz 値と調和 Ritz 値を求める計算量は増えるので、この部分の計算時間を減らすために、並

列化を考えることもあげられる。

### 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. Statist. Comput.*, 7, 856-869, 1986.
- 2) S. Goossens and D. Roose: Ritz and harmonic Ritz values and the convergence of FOM and GMRES. *Numer. Linear Algebra Appl.*, 6, 281-293, 1999.
- 3) C. C. Paige, B. N. Parlett and H. A. Van der Vorst: Approximate solutions and eigenvalue bounds from Krylov subspaces. *Num. Lin. Alg. Appl.*, 2: 115-134, 1995.
- 4) G. L. G. Sleijpen and H. A. Van der Vorst: A Jacobi-Davidson iteration method for Richardson's method. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 17, 401-425, 1996.
- 5) E. Anderson et al: LAPACK Users Guide, *SIAM*, Philadelphia (1992), (邦訳: 小国: 「行列演算パッケージ LAPACK 利用の手引」), 丸善 (1996)).