

## クリロフ部分空間法のための新しい射影法について

熊谷 暁了<sup>†1</sup> 野寺 隆<sup>†2</sup>

数値計算における一般的な射影法とは線形システムを解く場合に広く用いられる前処理の1つである。本稿では、この前処理を用いることにより係数行列の有する固有値のいくつかの値を変化させて、正確な解法について考える。また、この射影をマルチレベルに使用する新しい射影法を導出し、クリロフ部分空間法に適用する手法について述べる。

### New Adaptive Projection Technique for Krylov Subspace Method

AKINORI KUMAGAI<sup>†1</sup> and TAKASHI NODERA<sup>†2</sup>

Generally projection technique in the numerical operation is one of the preconditioning commonly used when the linear system is solved. In this paper, we describe the method that the value of some eigenvalues to the coefficient matrix by using this preconditioning is shifted. Moreover, a new projection technique that uses this projection at the multi-level is derived, and the technique for applying to the Krylov subspace method is given.

#### 1. はじめに

Krylov 部分空間法の収束は、次のような線形システム

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

に対する係数行列  $A$  のスペクトラムに依存している。ただし行列  $A$  は SPD (対称正定値) であるとする。式 (1) の解  $x$  を近似的に求める際の不正確さは次の条件数で与えられる。

$$\kappa(A) = \frac{\lambda_{max}(A)}{\lambda_{min}(A)} \quad (2)$$

ただし、 $\lambda_{max}(A)$  と  $\lambda_{min}(A)$  は  $A$  の最大固有値と最小固有値である。一般の行列においては、クラスタされたスペクトラムを持つ行列  $A$  の場合には、Krylov 部分空間法は早く収束する。しかし、時々値が 0 に近い固有値が存在するだけで収束は悪くなる。これは行列  $A$  が SPD であっても変わらない。通常、この収束を良くするために前処理が使われる。前処理は条件数  $\kappa(M^{-1}A)$  を 1 に近付けるように  $M$  を選ぶ。故に、当然のことであるが、 $M^{-1}A \approx I$  ( $I$ : 単位行列) が成立していることになる。これらは不完全 LU 分解や不完全 Cholesky 分解、近似逆行列などに用いられる。しかし、これらの手法は行列  $A$  のスペクトラム情報の詳細を利用することはできない。

固有値のうちいくつかの値が 0 に近い場合には、それらの固有値が条件数の値を大きくし、収束を悪くする原因となる。Nicolaides<sup>4)</sup> では最小固有値に関するいくつかのベクトルを追加することにより、CG 法の収束性を向上させた。Krylov 部分空間法に対しては Morgan が Augmented GMRES 法<sup>5)</sup> を提案した。この方法では小さい固有値に対する固有ベクトルを用いて Krylov 部分空間を改良する。これらの固有ベクトルは最小残差ベクトルの成分ではなくなるのでより早い収束が望める。同様のアプローチでデフレーションに似た射影作用素を用いる方法<sup>6)</sup> が提案されている。今、射影作用素を

$$P_N = P_D + \lambda_N Z E^{-1} Y^T, \quad E = Y^T A Z \\ P_D = I - A Z E^{-1} Y^T$$

と定義する。ここで、 $Z, Y \in R^{n \times r}$ 、 $Z, Y; \text{rank}(r)$  であるとする。ここで  $Z$  は、デフレーション部分空間と呼ばれる。また、行列  $A$  が SPD でかつ  $Z = Y$  のとき実際に行列  $A$  に対して  $P_N, P_D$  を用いた前処理を施すと以下が成り立つ。

$$\sigma(P_N A) = \{\lambda_1, \dots, \lambda_n, \lambda_{r+1}, \dots, \lambda_n\}. \\ \sigma(P_D A) = \{0, \dots, 0, \lambda_{r+1}, \dots, \lambda_n\}.$$

このように行列  $A$  の固有値のはじめの  $r$  個がそれぞれ  $\lambda_n, 0$  となるため、 $r$  ( $Z$  の大きさ) が大きくなるにつれて条件数 (2) の値は減少していく。故に、より大きなデフレーション部分空間  $Z$  を用いれば、Krylov 部分空間法の収束は格段に良くなる。しかし、そのためには  $E^{-1}$  を計算する必要があるため、大きなデフレーション部分空間  $Z$  を用いれば、それに伴ってより多くの計算コストがかかることになる。また、Krylov 部分空間法の収束は  $E^{-1}$  の精度にとっても敏感である。それ故、 $E^{-1}$  の計算は正確に計算しなくてはならない。

本稿では、 $E = Y^T A Z$  を “ Galerkin 行列 ”、また Galerkin 行列に対する “ Galerkin シ

<sup>†1</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>†2</sup> 慶應義塾大学理工学部, Faculty of Science and Technology, Keio University

システム”と呼ぶことにする<sup>1)</sup>。このように大きなデフレーション部分空間を利用した新しい射影法について述べることにする。この新しい方法は Galerkin システムを解く場合と同じ形式の射影を使用することになる。具体的には Krylov 部分空間法の反復時にその射影を係数行列が十分に小さくなるまで、何回か (“ Multi-level ”に) 行って解いていくことになる。この解法を “ Multi-level projection Krylov method ”と呼ぶことにする。次に、この Krylov 部分空間法についてを述べ、射影とデフレーションの関係、および新しい射影法を用いた GMRES 法について順に述べることにする。

## 2. Krylov 部分空間法

$n$  次元正方向行列  $A$ ,  $n$  次元ベクトル  $b$  により生成される Krylov 部分空間  $K_n$  を次のように定義する。

$$K_n = \text{span}\{b, Ab, A^2b, \dots, A^{n-1}b\}$$

大規模疎行列の 1 個または少数の固有値の計算や、大規模な連立 1 次方程式の求解に用いられる反復法では、行列  $\times$  行列を計算する代わりに行列をベクトルに作用させ、得られるベクトルを利用する。 $b$  を初期ベクトルとすると、次に  $Ab$  を計算し、さらに  $A$  を掛けて  $A^2b$  を得るといった方法を取る。このようなアルゴリズムを総称して、Krylov 部分空間法と呼ぶ。

Krylov 部分空間法には、エルミート行列に対して、Lanczos 法、エルミートでない行列に対して、Arnoldi 法などの直交化手法がある。主な Krylov 部分空間法としては、Arnoldi 法、Lanczos 法、GMRES 法 (generalized minimum residual), BiCGSTAB 法 (stabilized biconjugate gradient) などが挙げられる。

今回提案する新しい解法 “ Multilevel projection Krylov method ”では最終的に非対称行列を係数行列とする線形システムを解いていくことになるので、非対称行列にも対応する GMRES 法を利用する。

### 2.1 GMRES 法

GMRES 法では、残差ベクトル  $r_n = Ax_n - b$  のノルムを最小化するベクトル  $x_n \in K_n$  によって、 $Ax = b$  の厳密解を近似する。

Krylov 部分空間  $K_n = \text{span}\{b, Ab, A^2b, \dots, A^{n-1}b\}$  は線形従属に近づいていくため、これらを用いる代わりに、Arnoldi 法を用いて  $K_n$  の基底を構成する正規直交ベクトル列

$$\{q_1, q_2, \dots, q_n\}$$

を計算する。つまり、 $x_n \in K_n$  は、 $y_n \in R_n$  を用いて  $x_n = Q_n y_n$  と記述することができる。ただし、 $Q_n$  は  $q_1, q_2, \dots, q_n$  により構成される  $m \times n$  行列とする。Arnoldi 過程では

$$AQ_n = Q_{n+1}H_n$$

を満たす  $(n+1) \times n$  次 Hessenberg 行列  $H_n$  が生成される。 $Q_n$  は直交行列なので、 $e_1 = (1, 0, 0, \dots, 0)$  を標準基底  $R^{n+1}$  のベクトルとして

$$\|Ax_n - b\| = \|H_n y_n - e_1\|$$

が成り立つ。従って、 $x_n$  は次の残差ノルムを最小化することによって計算できる。

$$\|r_n\| = \|H_n y_n - e_1\|$$

これまでに述べてきた GMRES 法を簡単にまとめると以下のようなになる。

- (1) アーノルディ法を 1 ステップ計算する
- (2)  $\|r_n\|$  を最小化する  $y_n$  を見つける
- (3)  $x_n = Q_n y_n$  を計算する
- (4) 残差が十分小さくなるまでこれを繰り返す

## 3. 新しい射影法と GMRES 法

本章では、新しい射影法について述べることにする。そのためにまず式 (1) に表される線形システムをより一般的な表記を用いて次のように表す。

$$\hat{A}\hat{u} = \hat{b}$$

ただし、 $\hat{A}$  は正則で非対称な行列である。式 (3) は、 $\hat{A} = M^{-1}A$ ,  $\hat{u} = u$ ,  $\hat{b} = M^{-1}b$  を満たす前処理済の連立 1 次方程式である。今、係数行列  $\hat{A}$  のスペクトラムを

$$\sigma(\hat{A}) = \{\lambda_1, \dots, \lambda_n\}, \lambda_i \leq \lambda_{i+1}, \forall i \in N$$

とする。

### 3.1 デフレーション

まず最初に、デフレーションの概要について述べる。デフレーションの過程を次のように定義する。

$$A_{1,\gamma} = \hat{A} - \gamma_1 z_1 y_1^T, \quad y_1^T z_1 = 1, \gamma \in R.$$

ここで、簡単な計算から次の 3 つの方程式が得られる。

$$y_i^T A_{1,\gamma} = y_i^T (\hat{A} - \gamma_1 z_1 y_1^T) = \lambda_i z_1 y_i^T$$

$$\begin{aligned}\hat{A}_{1,\gamma}y_i &= (\hat{A} - \gamma_1 z_1 y^T) y_i \\ &= \hat{A}y_i - \gamma_1 z_1 y^T y_i \\ &= \lambda_i y_i \\ \hat{A}_{1,\gamma}z_1 &= (\hat{A} - \gamma_1 z_1 y^T) z_1 \\ &= \hat{A}z_1 - \gamma_1 z_1 y^T z_1 \\ &= (\lambda_1 - \gamma_1) z_1\end{aligned}$$

これらの3つの方程式を用いると、

$$\sigma(\hat{A}_{1,\gamma}) = \{\lambda_1 - \gamma_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n\}$$

が成立する。ここで、 $\gamma_1 = \lambda_1$  とすると次式が成立する。

$$\sigma(\hat{A}_{1,\gamma}) = \{0, \lambda_2, \dots, \lambda_n\}$$

$\gamma_1 = \lambda_1 - \lambda_n$  とすると、次式が成立する。

$$\sigma(\hat{A}_{1,\gamma}) = \{\lambda_n, \lambda_2, \dots, \lambda_n\}$$

つまりこの式において、 $\gamma_1 z_1 y^T$  を引くことによって最小の固有値  $\lambda_1$  の値が  $\gamma_1$  の値だけ減っていることが分かる。

これら一連の作用がデフレーションの基本である。固有値の値を適宜操作してもとの線形システムの条件数を減らし、より解きやすい形式にすることが1つの目的である。同様にして、 $r$  個の最小固有値を  $\lambda_n$  または 0 にデフレーションすることを考える。そこで次のように定義する。

$$\hat{A}_r = \hat{A} - Z\Gamma_r Y^T, \quad Y^T Z = 1$$

ただし、 $Z = [z_1, \dots, z_r]$ ,  $\Gamma = \text{diag}(\gamma_1, \dots, \gamma_r)$  である。以下のように上記と同様の計算をすると、

$$\begin{aligned}\hat{A}_r z_i &= (\hat{A} - Z\Gamma_r Y^T) z_i \\ &= \hat{A}z_i - [z_1, \dots, z_r] \text{diag}(\gamma_1, \dots, \gamma_r) [y_1, \dots, y_r]^T z_i \\ &= \lambda_i z_i - \gamma_i z_i \\ &= (\lambda_i - \gamma_i) z_i.\end{aligned}\tag{3}$$

となり、 $i = 1, \dots, r$  において  $\hat{A}_r z_i = (\lambda_i - \gamma_i) z_i$  が成立し、 $i = r + 1, \dots, n$  においては、直交性より  $\hat{A}_r z_i = \lambda_i z_i$  が成立する。先程と同様に  $(\gamma_1, \dots, \gamma_r) = (\lambda_1, \dots, \lambda_r)$  とすると

$$\Gamma_r = E = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_r)$$

となる。また  $\hat{A}Z = Z\hat{E}$ 、 $\hat{A}^T Y = Y\hat{E}$  より

$$\begin{aligned}\hat{A}_r &= \hat{A} - Z\hat{E}Y^T \\ &= \hat{A} - Z\hat{E}\hat{E}^{-1}\hat{E}Y^T \\ &= \hat{A} - \hat{A}Z\hat{E}^{-1}Y^T\hat{A}\end{aligned}\tag{4}$$

となる。ゆえに

$$\hat{A}_r = (I - \hat{A}Z\hat{E}^{-1}Y^T)\hat{A} := P_{\hat{D}}\hat{A}\tag{5}$$

$$\hat{A}_r = \hat{A}(I - \hat{A}Z\hat{E}^{-1}Y^T) = \hat{A}Q_{\hat{D}}\tag{6}$$

が成立する。同様に、 $(\gamma_1, \dots, \gamma_r) = (\lambda_1 - \lambda_n, \dots, \lambda_r - \lambda_n)$  とすると

$$\Gamma_r = E = \text{diag}(\lambda_1 - \lambda_n, \dots, \lambda_r - \lambda_n)$$

となり次式が得られる。

$$\hat{A}_{r,\gamma} = (I - \hat{A}Z\hat{E}^{-1}Y^T + \lambda_n Z\hat{E}^{-1}Y^T)\hat{A} = P_{\hat{N}}\hat{A}\tag{7}$$

$$\hat{A}_{r,\gamma} = \hat{A}(I - \hat{A}Z\hat{E}^{-1}Y^T + \lambda_n Z\hat{E}^{-1}Y^T) = \hat{A}Q_{\hat{N}}\tag{8}$$

本稿ではこれら  $P$ (*e.g.*,  $P_{\hat{D}}$ ),  $Q$ (*e.g.*,  $Q_{\hat{D}}$ ) をそれぞれ左右からの射影法による前処理作用素とする。

### 3.2 スペクトラムと条件数

次に、式 (5)、式 (6)、式 (7) および式 (8) に対して、それぞれの行列のスペクトラムについて考える。

$$\sigma(\hat{A}_r) = \sigma(P_{\hat{D}}\hat{A}) = \sigma(\hat{A}Q_{\hat{D}})$$

$$\sigma(\hat{A}_{r,\gamma}) = \sigma(P_{\hat{N}}\hat{A}) = \sigma(\hat{A}Q_{\hat{N}})$$

即ち、次式が得られる。

$$\sigma(P_{\hat{D}}\hat{A}) = \sigma(\hat{A}Q_{\hat{D}}) = \{0, \dots, 0, \lambda_{r+1}, \dots, \lambda_n\}$$

$$\sigma(P_{\hat{N}}\hat{A}) = \sigma(\hat{A}Q_{\hat{N}}) = \{\lambda_n, \dots, \lambda_n, \lambda_{r+1}, \dots, \lambda_n\}$$

元の係数行列  $A$  のスペクトラムにおいて行列  $A$  の最小固有値は  $\lambda_1$  で最大固有値は  $\lambda_n$  である。次に、 $P_{\hat{D}}\hat{A}$  と  $P_{\hat{N}}\hat{A}$  の最小固有値は  $\lambda_{r+1}$  で最大固有値は  $\lambda_n$  となっている。条件数は  $\kappa(A) = \lambda_n/\lambda_1 \geq \lambda_n/\lambda_{r+1} = \kappa(\hat{A}_{r,\gamma})$  という不等式を満たしており、Krylov 部分空間法 (GMRES 法) の収束性が向上していることがわかる。

#### 4. 射影法の GMRES 法への適用

前節で述べた射影法を GMRES 法に適用するために、3つの重要な点について述べる。

##### 4.1 $P_{\hat{N}}, Q_{\hat{N}}$ による前処理の安定性

本節では  $P_{\hat{D}}, Q_{\hat{D}}$  の問題点を挙げ  $P_{\hat{N}}, Q_{\hat{N}}$  の安定性について述べる。 $P_{\hat{D}}, Q_{\hat{D}}$  による前処理では小さい固有値から  $r$  個の固有値を 0 にデフレーションする。だが、実際には Galerkin システムは精確には解かれない。Galerkin 行列を計算する際には浮動小数点演算の性質上、丸め誤差が含まれてしまう。そのためこれらの射影作用素  $P_{\hat{D}}, Q_{\hat{D}}$  にも誤差が含まれてしまう。従って、デフレーションで 0 にするところを 0 には近くなっているが精確には 0 でない値にデフレーションされる可能性がでてくる。例えば、その値を  $0 < |\epsilon| \ll \lambda_1$  とすると、条件数はかなり大きい値となってしまう。よって、 $P_{\hat{D}}, Q_{\hat{D}}$  は使いにくい。一方、 $P_{\hat{N}}, Q_{\hat{N}}$  ではデフレーションが  $\lambda_n$  に向けて行なわれるため、条件数に対する影響はとて小くなる。よって、以降の議論では  $P_{\hat{N}}, Q_{\hat{N}}$  を用いることにする。

##### 4.2 右前処理の有効性

次に、 $P_{\hat{N}}, Q_{\hat{N}}$  のどちらを用いるかについて考える。ここで、 $P_{\hat{N}}, Q_{\hat{N}}$  を用いるとき、それぞれ線形システムが反復中に計算する残差ベクトルは異なるということに注目する。

例えば、 $P_{\hat{N}}$  を用いて左前処理を施した線形システムでは反復中に前処理の施された残差ノルムを計算する。すると反復法では反復中に計算される残差ノルムを基にして収束判定を実行するので、この前処理が施された残差ノルムの値で収束判定を実行することになる。しかし、前処理された残差ノルムが充分小さかったからといって実際の残差ノルムも充分に小さいとは限らない。そのため、収束を待たずに反復を終了してしまう危険性がある。

一方、 $Q_{\hat{N}}$  を用いて右前処理を施した線形システムでは反復中に (前処理の施されていない) 実際の残差ノルムを計算する。よって、内側の反復で計算される  $E$  などは充分正確に

表 1 数値例:  $\lambda_{n,est}$  の値

n	$\lambda_n$	$\lambda_{n,est}$
10	$3.92E+2$	$4.E+2$
50	$9.99E+2$	$1.E+4$
100	$3.99E+2$	$4.E+4$

計算できている。以上より以下の議論では  $Q_{\hat{N}}$  で右前処理をした線形システムについて考える。

##### 4.3 $\lambda_n$ の推定

3.3.2 節より  $Q_{\hat{N}}$  を用いるため、 $\lambda_n$  の値が必要になる。最大固有値  $\lambda_n$  の計算は多大な計算コストが必要であり、避けなければならない。しかし、大抵の場合では、最大固有値  $\lambda_n$  は近似することができる。そのためにゲルシュゴーリンの定理の重要事を以下に示す。

$$\rho(\hat{A}) \leq \max_{i \in N} \sum_{j \in N} |a_{i,j}|$$

ただし、 $\rho(\hat{A})$  は  $\hat{A}$  のスペクトル半径とする。これを用いて

$$\lambda_n \leq \max_{i \in N} \sum_{j \in N} |a_{i,j}| = \lambda_{n,est}.$$

と近似する。以下に 1 次元 Poisson 方程式を例に実際に計算した  $\lambda_n$  の値と式 (3.24) で近似した  $\lambda_{n,est}$  の値を比べた値を表 1 に示す。この表 1 から、 $\lambda_{n,est}$  は真値  $\lambda_n$  の良い近似であると言える。今回の方法ではこの  $\lambda_{n,est}$  を用いる

##### 4.4 新しい射影法を用いた GMRES 法

前節の議論から本稿で計算する線形方程式は、以下のような形式となる。

$$\hat{A}Q_{\hat{N}}\hat{u} = \hat{b}, \quad u = Q_{\hat{N}}\hat{u}$$

$$Q_{\hat{N}} = I - ZE^{-1}Y^T\hat{A} + \omega\lambda_{N,est}ZE^{-1}Y^T$$

$$\hat{E} = Y^T\hat{A}Z$$

ただし、 $\omega$  はシフトスケールリングファクターと呼ばれ、 $\lambda_N = \omega\lambda_{N,est}$  を満たすものとする。この線形システムを GMRES 法で解くアルゴリズムを図 1 に示す。このアルゴリズムでは 4 行目で  $x_j := Q_{\hat{N}}v_j$  を計算する必要があるが、一般に  $Q_{\hat{N}}$  は疎行列ではないので  $Q_{\hat{N}}$  を一

1. Choose  $u_0$ ,  $\omega$ , and  $\lambda_{n,est}$ . Compute  $Q_N$ .
2. Compute  $r_0 = b - Au_0$ ,  $\beta = \|r_0\|_2$ , and  $v_1 = \frac{r_0}{\beta}$ .
3. For  $j = 1, \dots, k$
4.  $x_j := Q_N v_j$ ;
5.  $w := AM^{-1}x_j$ .
6. For  $i = 1, \dots, j$
7.  $h_{i,j} = (w, v_j)$ ;
8.  $w := w - h_{i,j}v_i$ .
9. Endfor
10.  $h_{j+1,j} := \|w\|_2$  and  $v_{j+1} = \frac{w}{h_{j+1,j}}$
11. Endfor
12. Set  $X_k := [x_1 \dots x_k]$  and  $\hat{H}_k = \{h_{i,j}\}_{1 \leq i \leq j+1; 1 \leq j \leq k}$
13. Compute  $y_k = \operatorname{argmin}_y \|\beta e_1 - \hat{H}_k y\|_2$   
and  $u_k = u_0 + M^{-1}X_k y_k$

図 1 新しい射影法を用いた GMRES 法

度計算して記憶しておくというのは記憶領域の確保，計算量の観点から得策ではない．従って，実際には， $Q_N$  の計算は，以下のように行なうことになる．

$$\begin{aligned} x_j &= v_j - ZE^{-1}Y^T \hat{A}v_j + \omega \lambda_{N,est} ZE^{-1}Y^T v_j \\ &= v_j - ZE^{-1}Y^T (AM^{-1} - \omega \lambda_{N,est} I)v_j \end{aligned}$$

ここで， $s = AM^{-1}v_j$ ， $\hat{v} = Y^T(s - \omega \lambda_{n,est}v_j)$  とすると， $x_j$  は次のようになる．

$$x_j = v_j - ZE^{-1}\hat{v}$$

また，Galerkin システム  $E^{-1}\hat{v}$  は原則的に近似計算によって解くことができる．

$$\hat{v} = \hat{E}\tilde{v}$$

即ち， $\tilde{v}$  に対する反復を行ない  $\hat{v}$  を決定し， $t := Z\tilde{v}$  を計算していき，最終的に  $x_j := s - t$  を得る．ただし， $Z: R^r \mapsto R^n$ 、 $Y^T: R^n \mapsto R^r$  であるので  $Z$  を延長作用素 (prolongation operator)， $Y^T$  を制限作用素 (restriction operator) と呼ぶ．

以上の議論から拡張したアルゴリズムを図 2 に示す．

1. Choose  $u_0$ ,  $\omega$ , and  $\lambda_{n,est}$ .
2. Compute  $r_0 = b - Au_0$ ,  $\beta = \|r_0\|_2$ , and  $v_1 = \frac{r_0}{\beta}$ .
3. For  $j = 1, \dots, k$
4.  $s := AM^{-1}v_j$ .
5. Restriction:  $\hat{v} = Y^T(s - \omega \lambda_{n,est}v_j)$
6. Solve for  $\tilde{v}: \hat{E}\tilde{v} = \hat{v}$
7. Prolongation:  $t := Z\tilde{v}$
8.  $x_j := v_j - t$ .
9.  $w := AM^{-1}x_j$ .
10. For  $i = 1, \dots, j$
11.  $h_{i,j} = (w, v_j)$ ;
12.  $w := w - h_{i,j}v_i$ .
13. Endfor
14.  $h_{j+1,j} := \|w\|_2$  and  $v_{j+1} = \frac{w}{h_{j+1,j}}$
15. Endfor
16. Set  $X_k := [x_1 \dots x_k]$  and  $\hat{H}_k = \{h_{i,j}\}_{1 \leq i \leq j+1; 1 \leq j \leq k}$
17. Compute  $y_k = \operatorname{argmin}_y \|\beta e_1 - \hat{H}_k y\|_2$  and  $u_k = u_0 + M^{-1}X_k y_k$

図 2 新しい射影法を用いた GMRES 法の修正版

## 5. multilevel projection Krylov method

この章では 3 章で述べた Galerkin システム “ $\hat{v} = \hat{E}\tilde{v}$ ” の解法について述べる．これ以降，以下のような表記を用いることにする．

$$A^{(2)} := E = Y^T A^{(1)} Z$$

$$Q_N^{(1)} = I^{(1)} - Z^{(1,2)} A^{(2)-1} Y^{(1,2)T} A^{(1)} + \omega^1 \lambda^{(1)}_{N,est} Z^{(1,2)} A^{(2)-1} Y^{(1,2)T}$$

### 5.1 2-level

新しい表記を用いると，Galerkin システムは次のように書き直すことができる．

$$A^{(2)} Q_N^{(2)} p^{(2)} = \hat{v}^{(2)}, \quad \hat{v}^{(2)} = Q_N^{(2)} p^{(2)}$$

勿論, Galerkin 行列は小さくなっており Krylov 部分空間法の収束は向上している. しかし, “一般に疎行列でない”という事と“ Galerkin システムをできるだけ正確に解く”という事を考慮すると, まだ前処理は完璧とは言えない.

## 5.2 Multi-level

Galerkin 行列は一般的に疎行列ではないのでこの射影法を“ Multi-level ”に使用することによって Krylov 部分空間法の収束を十分に向上させる必要がある. よって, 式 (4,3) の Galerkin システムに繰り返し右前処理を施すと, Galerkin 行列は次のようになる.

$$A^{(l+1)} = Y^{(l,l+1)T} A^{(l)} Z^{(l,l+1)}$$

この場合, 右前処理作用素  $Q_N$  は次のようになる.

$$Q_N^{(l)} = I^{(l)} - Z^{(l,l+1)} A^{(l+1)-1} Y^{(l,l+1)T} A^{(l)} + \omega^{(l)} \lambda^{(l)} N_{,est} Z^{(l,l+1)} A^{(l+1)-1} Y^{(l,l+1)T}$$

即ち,  $l = m$  の時, Galerkin 行列  $A^{(m)}$  は既に十分小さい行列となっているので, Galerkin システムは GMRES 法を用いて正確に計算することが出来る. ここまでの Galerkin システムのアルゴリズムは図 3 のようになる.

## 6. おわりに

本稿では従来一般的な射影とは異なる新しい射影法を提案し, クリロフ部分空間法に適用する手法について述べてきた. この手法は従来のデフレーションと似ている. しかし, デフレーションはいくつかの小さい固有値を 0 にするが, 新しい射影法ではいくつかの小さい固有値を最大の固有値にする. そのため, 丸め誤差による条件数の値の著しい悪化を防ぐことになる. また, この射影法を施した線形システムのスペクトラムは, デフレーションを施した線形システムのスペクトラムと似たものとなる. つまり, クリロフ部分空間法の収束は当然向上することになる. しかし, この射影作用素を生成するために, Galerkin システムを解く必要があるが, 一般に Galerkin 行列は疎行列ではない. 従って, 先に導出した新しい射影法をマルチレベルに施して Galerkin システムを解くことになる.

本稿では新しい射影法の計算に用いるデフレーション部分空間 ( $Z$  と  $Y$ ) と最大固有値 (の近似) は単純な手法で選択を行なった. 違った選択を摸索することによって, また, より良い収束が得られる可能性がある. 詳細な数値実験の結果については, Swopp09 の発表当日に報告する.

```

1.  $l = 1$ .
   With an initial guess  $u_0^{(1)} = 0$ ,
   Solve  $A^{(1)}u^{(1)} = b^{(1)}$  with FGMRES by computing
2.  $s^{(1)} := A^{(1)}M^{(1)-1}v_j^{(1)}$ ;
3. restriction:  $\hat{v}^{(2)} = Y^{(1,2)T}(s^{(1)} - \omega^{(1)}\lambda^{(1)}_{n,est}v_j^{(1)})$ ;
4. if  $l + 1 = m$ 
5. solve exactly  $\hat{A}^{(2)-1}\hat{v}^{(2)} = \tilde{v}^{(2)}$ ;
6. else
7.  $l = l + 1$ .
   With  $\tilde{v}_0^{(2)} = 0$ ,
   solve  $\hat{A}^{(2)}\tilde{v}^{(2)} = \hat{v}^{(2)}$  with FGMRES by computing
8.  $s^{(2)} := \hat{A}^{(2)}v^{(2)}$ ;
9. restriction:  $\hat{v}^{(3)} := Y^{(2,3)T}(s^{(2)} - \omega^{(2)}\lambda^{(2)}_{n,est}v^{(2)})$ ;
10. if  $l + 1 = m$ 
11. solve exactly  $\hat{A}^{(3)-1}\hat{v}^{(3)} = \tilde{v}^{(3)}$ ;
12. else
13.  $l = l + 1$ ;
14. ...
15. endif
16. prolongation:  $t^{(2)} := Z^{(2,3)}\tilde{v}^{(3)}$ ;
17.  $x^{(2)} = v^{(2)} - t^{(2)}$ ;
18.  $w^{(2)} = \hat{A}^{(2)}x^{(2)}$ ;
19. endif
20. prolongation:  $t^{(1)} := Z^{(1,2)}\tilde{v}^{(2)}$ ;
21.  $x^{(1)} = v^{(1)} - t^{(1)}$ ;
22.  $w^{(2)} = A^{(1)}M^{(1)-1}x^{(2)}$ ;

```

図 3 multilevel projection Krylov method

### 参 考 文 献

- 1) Y. A. Erlangga and R. Nabben, “Multilevel projection-based nested Krylov iteration for boundary value problems,” SIAM J.Sci.Comput.,pp.1572-1595,2007.
- 2) D. Day, “An Efficient Implementation Of The Nonsymmetric Lanczos Algorithm,” SIAM J.Matrix Anal.Appl.,18, pp.566-589,1997.
- 3) Y. Saad and M. H. Schultz, “GMRES: A Generalized Minimal Residual Algorithm For Solving Nonsymmetric Linear Systems,” SIAM J.Sci.Comput.,7,pp.856-869, 1986.
- 4) R. A. Nicolaides, “Deflation of conjugate gradients with applications to boundary value problems,” SIAM J.Numer. Anal.,24,pp.355-365,1987.
- 5) R. B. Morgan, “A restarted GMRES method augmented with eigenvectors,” SIAM J.Matrix Anal.Appl.,16,pp. 1154-1171,1995.
- 6) J. Frank and C. Vuik, “On the construction of deflation-based preconditioners,” SIAM J.Sci.Comput.,23,pp. 442-462,2001.