1K-3

複素行列に対するRL-GMRES法の有効性について

上中 貴統 [1]，野寺 隆 [2]

[1] 慶應義塾大学大学院理工学研究科，[2] 慶應義塾大学理工学部

lost_prophecy.1109@a8.keio.jp[1], nodera@math.keio.ac.jp[2]

1 はじめに

$\mathbb{R}$-linear GMRES法 (RL-GMRES法) は，複素行列を係数として持つ以下の連立1次方程式 (1) の解法として，Eirora [1] によって提案された手法である．

$$(\kappa I + M\tau)\, z = b \tag{1}$$

ただし，$\kappa \in \mathbb{C}$，$b, z \in \mathbb{C}^n$，$M \in \mathbb{C}^{n\times n}$ であり，I は n 次の単位行列で，τ は $\mathbb{C}^n$ 上の共役演算子である．ここで，$\mathcal{M}_\kappa = \kappa I + M\tau$ とする．次に，z_0 を初期ベクトルとし，$r_0 = b - \mathcal{M}_\kappa z_0$ を残差ベクトルとする．このような連立1次方程式を解く方法の1つとして，複素数の実部と虚部をそれぞれ表現するために，複素行列の大きさを2倍にして実行列とする等価な書き換えを行うことができる．この書き換えによって，実行列に対するKrylov部分空間法を適用しても問題を解くことができる．この考え方を用いた手法の1つがRL-GMRES法である．このとき，RL-GMRES法における i 回目の反復から得られる解ベクトル z_i は，次式を満足する．

$$\|b - \mathcal{M}_\kappa z_i\|_2 = \min_{w \in z_0 + \mathcal{K}_i(\mathcal{M}_\kappa, r_0)} \|b - \mathcal{M}_\kappa w\|_2 \tag{2}$$

ただし，$z_i \in z_0 + \mathcal{K}_i(\mathcal{M}_\kappa, r_0)$ である．ここで，$\mathcal{K}_i(\mathcal{M}_\kappa, r_0)$ は，$\mathcal{M}_\kappa$ と r_0 から生成されるRL-GMRES法の i 回目の反復で用いる次のようなKrylov部分空間である．

$$\mathcal{K}_i(\mathcal{M}_\kappa, r_0) = \mathrm{span}\{r_0, \mathcal{M}_\kappa, \ldots, \mathcal{M}_\kappa^{i-1} r_0\}$$

この手法と比較するもう1つの方法として，Huhtanen ら [2] が提案した式 (1) に対する前処理行列 $\bar{\kappa} I - M\tau$ を用いることで，次のような $\mathbb{C}$-linear な方程式を得ることができる．

$$|\kappa|^2 w - M\bar{M} w = b \tag{3}$$

この前処理を行うと，どのような複素行列に対しても少なくとも主対角成分は必ず実数となる．式 (3) を解くことができれば，$z = \bar{\kappa} w - Mw$ からただちに解ベクトル z を求めることができる．発表では，式 (1) にRL-GMRES法を用いた場合の方が，式 (3) にGMRES法を用いた場合よりも有利な点を示す．

2 RL-GMRES法

本節では，複素線形問題の実部と虚部を分けて考えることによって，実線形問題として扱うことができるその等価な変換の中からNevanlinna ら [3] で示されている $\mathbf{R}_2$ 公式を用いて，式 (1) を解くことを考える．まず最初に，複素ベクトルを実部と虚部に分割するような写像 $\phi : \mathbb{C}^n \to \mathbb{R}^{2n}$ を次式で定義する．

$$\phi(z) = \begin{bmatrix} \mathrm{Re}(z) \\ \mathrm{Im}(z) \end{bmatrix}$$

次に，Krylov部分空間を次のように定義する．

$$\mathcal{K}_i(\mathcal{M}_\kappa, b) := \mathrm{span}\{b, \mathcal{M}_\kappa b, \ldots, \mathcal{M}_\kappa^{i-1} b\} \subset \mathbb{C}^n$$

さらに，

$$\begin{aligned} &\mathcal{K}_i^{\mathbb{R}}(\mathbf{R}_2, \phi(b)) \\ &\quad := \mathrm{span}^{\mathbb{R}}\{\phi(b), \ldots, \mathbf{R}_2^{i-1}\phi(b)\} \subset \mathbb{R}^{2n} \end{aligned}$$

を定義する．記号 $\mathrm{span}^{\mathbb{R}}\{\ldots\}$ はカッコ内の成分の実線形結合からなる空間を表している．今定義したKrylov部分空間と，もう1つ別のKrylov部分空間 $\mathcal{K}_i(\mathcal{M}_\kappa, b)$ との関係は，Du ら [3] のLemma3.1に示されている．このLemma3.1を用いて2つのKrylov部分空間の関係を考えると，$\mathcal{K}_i^{\mathbb{R}}(\mathbf{R}_2, \phi(b))$ は $\mathbb{R}^{2n}$ の線形部分空間であり，$\mathcal{M}_\kappa(\mathcal{K}_i(\mathcal{M}_\kappa, b))$ は $\mathbb{C}^n$ の $\mathbb{R}$-linear な部分空間であることがわかる．そのため，Arnoldi過程により $\mathcal{K}_i(\mathcal{M}_\kappa, b)$ のArnoldi基底を生成することができる．

次に，$\tilde{I}_i$ を $i \times i$ の単位行列の下に全ての成分が0からなる行を1行加えたものとする．また，e_1 は，最初の成分が1であり，残りは全て0のベクトルとする．さらに，$H_{i+1,i}$ をArnoldi過程から生成される上Hessenberg行列とする．このとき，z_i は式 (2) を満たすことから，次式を満足する．

$$\begin{aligned} &\|b - \mathcal{M}_\kappa z_i\| \\ &\quad = \min_{s \in \mathbb{C}^i} \big\| \|r_0\| e_1 - \kappa \tilde{I}_i s - H_{i+1,i}\bar{s} \big\| \end{aligned} \tag{4}$$

1. $r_0 = b - \mathcal{M}_\kappa z_0$ を計算する．z_0 は初期値.
2. Arnoldi 基底と $H_{i+1,i}$ を生成する．

```
v_1 = r_0/||r_0|| ;
for j=1,2,..., do
  w = M v̄_j ;
  for i=1 to j do
    h_ij = v_i^* w ;
    w = w - h_ij v_i ;
  end for
  h_{j+1,j} = ||w|| ;
  v_{j+1} = w/h_{j+1,j} ;
  (4) 式の右辺を s について解く
  z_i = z_0 + V_i s ;
  r_i = b - M_κ z_i ;
  終了条件を満たしたら離脱して終了
```

図 1. RL-GMRES 法のアルゴリズム

式 (4) の右辺は，Eirora ら [1] で示されている $\mathbb{R}$-linear QR 分解を利用して解くことができる．ここで，RL-GMRES 法のアルゴリズムを図 1 に示す．図 1 に示したアルゴリズムの 2 番の操作において Arnoldi 法を実行すると，次式を満足する．

$$\mathcal{M}_\kappa V_i = V_{i+1}(\kappa \tilde{I}_i + H_{i+1,i}) \tag{5}$$

ただし，$V_i = [v_1, v_2, \ldots, v_i]$ であり，$V_i^* V_i = I$ を満たしている．また，V_i の各列は，Krylov 部分空間 $\mathcal{K}_i(\mathcal{M}_\kappa, b)$ の正規直交基底である．式 (5) で表わされる Arnoldi 法は，m 回目の反復において $h_{m+1,m} = 0$ のときに反復が終了する．これは GMRES 法で起こる反復が終了するときの目印であり，このときに RL-GMRES 法でも正しい答えが得られている．その理由を簡単に述べると，次のようになる．H_m を $H_{m+1,m}$ の $m \times m$ の部分行列とすると，もし $h_{m+1,m} = 0$ ならば，次式が成立する．

$$\mathcal{M}_\kappa V_m = V_m(\kappa I + H_m)$$

さらに，

$$\dim(\mathcal{K}_{m+1}(\mathcal{M}_\kappa, b)) = \dim(\mathcal{K}_m(\mathcal{M}_\kappa, b)) = m$$

であるので，写像 ϕ を Krylov 部分空間に作用させせると，その次元数は $2m$ となる．よって，$\mathbf{R}_2$ が正則行列であるならば，$\mathbf{R}_2$ を作用させたときも同様に次元数は $2m$ となる．これら事柄と，Nevanlinna ら [3] の Lemma 3.1 より

$$\mathrm{span}(b) \subseteq \mathcal{M}_\kappa(\mathcal{K}_m(\mathcal{M}_\kappa, b))$$

が成立することから，次式が成り立つ．

$$||r_m|| = ||b - \mathcal{M}_\kappa z_m|| = 0$$

次に，GMRES 法と RL-GMRES 法の数学的な性質について考える．Nevanlinna ら [3] の命題 3.6 から命題 3.8 にかけて式 (1) に RL-GMRES 法を用いたときの残差ノルムと式 (3) に GMRES 法を用いたときの残差ノルムの対比が示されている．ここで r_i を前者の残差ベクトル，r_i^G を後者の残差ベクトルとすると，これらの命題から残差ベクトルに関して比較を行うと，次式が成立する．

$$||r_{2i}|| \le ||r_i^G|| \tag{6}$$

このことから，RL-GMRES 法を式 (1) に用いた方が収束性がよいことがわかる．この事実に関して数値実験を交えながら当日発表する．

3　おわりに

$\mathbf{R}_2$ 公式を用いて式 (1) の $\mathbb{R}$-linear な系に RL-GMRES 法を適用して解いた場合と，式 (3) の $\mathbb{C}$-linear な系に GMRES 法を適用した場合の比較を行った．定理や系から考えていくと，式 (6) から収束は前者の方が優れていることがわかる．よって，RL-GMRES 法は，ある種の複素行列からなる線形方程式の計算を行う場合に，効率のよい方法の 1 つであると言える．

参考文献

[1] Eirora, T., Huhtanen, M, and von Pfaler, J., *"Solution Methods for $\mathbb{R}$-Linear Problems in $\mathbb{C}^n$,"* SIAM J. on Matrix Anal. and Appl., 2004, pp. 804–828.

[2] Huhtanen, M., and Perämäki A. *"Numerical Solution of the $\mathbb{R}$-linear Beltrami Equation,"* Math. of Comput., 2011, to appear.

[3] Du, K., and Nevanlinna, O., *"Minimal Residual Methods for Solving a Class of $\mathbb{R}$-linear Systems of Equations,"* Helsinki Univ. of Tech. Inst. of Math. Res. Rep. A586, 2010.