RIKEN
Center for
Computational Science

2024年6月26日

有限要素解析のための並列ソルバーに関するスクール 2024

疎行列に対する Krylov 部分空間法

鈴木 厚[1]

[1] 理研計算科学研究センター 大規模並列数値計算技術研究チーム
atsushi.suzuki.aj@a.riken.jp

偏微分方程式から得られる疎行列からなる連立一次方程式

疎行列 $A \in \mathbb{R}^{N\times N}$ と右辺ベクトル $\vec{b} \in \mathbb{R}^N$ から成る連立一次方程式

$$\text{次を満す}\quad \vec{x} \in \mathbb{R}^N \ \text{を見付けよ}\quad A\vec{x} = \vec{b}$$

は偏微分方程式を有限差分法, 有限体積法, 有限要素法により離散化して得られる.
Laplace 方程式

$$-\triangle u = -\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right) = f \text{ in } \Omega, \quad u = 0 \text{ on } \partial\Omega$$

領域 $\Omega = (0,1)\times(0,1)$ とその境界

$$\begin{aligned}\partial\Omega =&\{(x,0)\,;\,0\le x\le 1\}\cup\{(1,y)\,;\,0\le y\le 1\}\cup\\ &\{(x,1)\,;\,0\le x\le 1\}\cup\{(0,y)\,;\,0\le y\le 1\}\end{aligned}$$

を等間隔メッシュ $\Delta x = \Delta y = h$ で離散化する. 幅は $(n+1)h = 1$ を満す.

$$\frac{-u_{i-1,j} + 2u_{i,j} - u_{i+1,j}}{\Delta x^2} + \frac{-u_{i,j-1} + 2u_{i,j} - u_{i,j+1}}{\Delta y^2} = f_{i,j}$$

ここで座標 $(x,y) = (i\Delta x, j\Delta y)$ での未知数を $u_{i,j} \sim u(x,y)$ と表す. 2 次元での格子点の番号付け $\lambda : \{1,\cdots,n\}\times\{1,\cdots,n\} \to \{1,\cdot n^2\}$ を $\lambda(i,j) = i + n\,j$ とする.

差分法 5 点ステンシルでの疎行列

$$
\begin{matrix}
2 & -1 & & & & & -1 & & & & & \\
-1 & 4 & -1 & & & & & -1 & & & & \\
& -1 & 4 & -1 & & & & & -1 & & & \\
& & \ddots & \ddots & \ddots & & & & & \ddots & & \\
& & & -1 & 4 & -1 & & & & & -1 & \\
& & & & -1 & 2 & & & & & & -1 \\
-1 & & & & & & 2 & -1 & & & & \\
& -1 & & & & & -1 & 4 & -1 & & & \\
& & -1 & & & & & -1 & 4 & -1 & & \\
& & & \ddots & & & & & \ddots & \ddots & \ddots & \\
& & & & -1 & & & & & -1 & 4 & -1 \\
& & & & & -1 & & & & & -1 & 2
\end{matrix}
$$

5 重対角行列 $N = n^2$, $\mathtt{nnz} = (3n-2)n + 2n(n-1) = 5n^2 - 4n$

- 5 点ステンシルの構造を維持する
- 一般的な疎行列データ構造を利用する

連立一次方程式と変分問題：1/2

$A \in \mathbb{R}^{N\times N}$: 疎行列, $\vec{b} \in \mathbb{R}^N$

$$\text{次を満す } \vec{x} \in \mathbb{R}^N \text{ を見付けよ } \quad A\vec{x} = \vec{b} \text{ in } \mathbb{R}^N$$

テストベクトルを $\vec{y} \in \mathbb{R}^N$ とする変分問題

$$\text{次を満す } \vec{x} \in \mathbb{R}^N \text{ を見付けよ } \ (A\,\vec{x} - \vec{b},\, \vec{y}) = 0 \quad \forall \vec{y} \in \mathbb{R}^N$$

内積 $(\vec{x}, \vec{y}) = \sum_{1\leq i\leq N} [\vec{x}]_i [\vec{y}]_i = \vec{x}^T \vec{y}$

ℓ^2-ノム $||\vec{x}|| = \sqrt{(\vec{x}, \vec{x})} = \left\{ \sum_{1\leq i\leq N} [\vec{x}]_i^2 \right\}^{1/2}$

- $A\vec{x} - \vec{b} = \vec{0} \ \Rightarrow \ (A\vec{x} - \vec{b}, \vec{y}) = 0$
- $(A\vec{x} - \vec{b},\, \vec{y}) = 0 \ \forall \vec{y} \ \Rightarrow$ この時 $\vec{y} = \vec{e}_i \ 1 \leq \forall i \leq N$ と選ぶと
  $[A\vec{x} - \vec{b}]_i = 0 \Rightarrow A\vec{x} - \vec{b} = \vec{0}$

部分空間 $V \subset \mathbb{R}^N$ に対して

$$\text{次を満す } \vec{x} \in V \text{ を見付けよ } (A\,\vec{x} - \vec{b},\, \vec{y}) = 0 \quad \forall \vec{y} \in V$$

$$\vec{r} = \vec{b} - A\,\vec{x} \perp V \quad \Leftrightarrow \quad \text{残差は } V \text{ に直交する}$$

問題

- 行列 A は部分空間 V で正則か? $\Leftarrow A$: 強圧性
- 部分空間 V をどうやって生成するか？ $\Leftarrow$ 前処理付き Krylov 部分空間法

$A \in \mathbb{R}^{N\times N}$ が部分空間 V で強圧的 $\Leftrightarrow \exists \alpha > 0 \ \forall \vec{x} \in V \ (A\vec{x}, \vec{x}) \geq \alpha ||\vec{x}||^2$

連立一次方程式と変分問題：2/2

定理

行列 $A \in \mathbb{R}^{N\times N}$：は空間 V で強圧的 $\exists\alpha > 0\ \forall\vec{x} \in V\ (A\vec{x}, \vec{x}) \geq \alpha||\vec{x}||^2$
$\Rightarrow \quad (A\vec{x} - \vec{b}, \vec{y}) = 0\ \forall\vec{y} \in V$ を満たす $\vec{x}$ が存在する

A の V での全単射性はつぎから分かる

- 単射性
  $(A\vec{x}, \vec{y}) = 0\ \forall\vec{y} \in V \ \Rightarrow \vec{x} = \vec{0}$, ここで $\vec{y} = \vec{x}$ と置くと
  $0 = (A\vec{x}, \vec{x}) \geq \alpha||\vec{x}||^2 \geq 0 \ \Rightarrow \vec{x} = \vec{0}$
- 全射性
  次元定理 $\mathrm{dim}V = \mathrm{rank}A + \mathrm{dimKer}A$ を用いると単射性より $\mathrm{dimKer}A = 0$ となることより, $\mathrm{dim}V = \mathrm{rank}A$.
  あるいは V の直和分解 $V = \mathrm{Im}A|_V \oplus \mathrm{Ker}A|_V$ から $\mathrm{Ker}A|_V = \{\vec{0}\}$ を示す.

強圧性を持つ係数行列 A からなる連立一次方程式はつぎの方法で解くことができる:

- 逐次に生成される部分空間 $V_1 \subset \cdots \subset V_m$ での反復法
- 軸選択を必要としない直接法 (但し浮動小数点丸め誤差がなく計算が数学的に厳密に行われると仮定して)

強圧的な行列に対する軸選択無しの LU 分解法

行列 A の LU 分解を繰り返し操作と見る

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & A_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & 0 \\ a_{21} & S_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & a_{11}^{-1} a_{12} \\ 0 & I_2 \end{bmatrix}$$

$S_{22} = A_{22} - a_{21} a_{11}^{-1} a_{12}$: rank-1 更新による Schur 補行列の更新

- A が部分空間 $V_1 = \mathrm{span}[\vec{e}_1]$ で強圧的であることより $a_{11} \neq 0$
- S_{22} が部分空間 $V_{m-1} = \mathrm{span}[\vec{e}_2, \vec{e}_3, \cdots, \vec{e}_m]$ で強圧的であることは $\vec{x}_1 = -a_{11}^{-1} a_{12} \vec{x}_2$ と置くことにより得られる

$$\begin{aligned} 0 &\leq \left(A \begin{bmatrix} -a_{11}^{-1} a_{12} \vec{x}_2 \\ \vec{x}_2 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} -a_{11}^{-1} a_{12} \vec{x}_2 \\ \vec{x}_2 \end{bmatrix} \right) \\ &= \left(\begin{bmatrix} a_{11}(-a_{11}^{-1} a_{12} \vec{x}_2) + a_{12} \vec{x}_2 \\ a_{21}(-a_{11}^{-1} a_{12} \vec{x}_2) + A_{22} \vec{x}_2 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} -a_{11}^{-1} a_{12} \vec{x}_2 \\ \vec{x}_2 \end{bmatrix} \right) \\ &= \left((A_{22} - a_{21} a_{11}^{-1} a_{12}) \vec{x}_2, \vec{x}_2 \right) = (S_{22} \vec{x}_2, \vec{x}_2) \end{aligned}$$

行列の強圧性とその他の性質

- 強圧的 : $\exists \alpha > 0\ \forall \vec{x}\ (A\vec{x}, \vec{x}) \geq \alpha ||\vec{x}||^2$.
- 不定値行列は強圧性を満さない. 反例は

$$\left(\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \right) = 0$$

  - 強圧性を満さなくても, A が正則行列であれば連立一次方程式 $A\,x = b$ の解は一意的に存在する. しかしながら直接法解法では軸選択が必要. Krylov 部分空間法の収束証明はない.

- 対角優位 : $|a_{i\,i}| > \sum_{j \neq i} |a_{i\,j}|$
- M-行列 : Z-行列 $\bigwedge \mathrm{Re}\lambda_i > 0\ 1 \leq i \leq N$, λ_i : i-番目の固有値
- Z-行列 $a_{i\,j} < 0\ i \neq j$

M-行列の性質は Laplace 作用素の最大値の原理から得られる. Gauss-Seidel 法の収束は M-行列の性質から証明される.

Krylov 部分空間法の概略

A : 対称

- 正定値 : CG (Conjugate Gradient : 共役勾配法)
- indefinite : SYMMLQ, MINRES

A : 非対称

- 強圧的 : FOM (Full Orthogonization Method)
- 一般の行列 : GMRES (Generalized Minimum RESsidual), Orthmin, GCR (Generalized Conjugate Residual) BiCG(Bi Conjugate Gradient), CGS , BiCGstab QMR, TFQMR

$\vec{r}_0 = b - A\,\vec{x}_0$: 初期推定 x_0 に対する初期残差
部分空間 V と W

find $\vec{x} \in \vec{x}_0 + V \quad (A\vec{x} - \vec{b}, \vec{y}) = 0 \quad \forall \vec{y} \in V$: CG, FOM

find $\vec{x} \in \vec{x}_0 + V \quad (A\vec{x} - \vec{b}, A\,\vec{y}) = 0 \quad \forall \vec{y} \in V$: Orthmin, GCR

find $\vec{x} \in \vec{x}_0 + V \quad ||A\vec{x} - \vec{b}|| \leq ||A\vec{y} - \vec{b}|| \quad \forall \vec{y} \in \vec{x}_0 + V$: MINRES, GMRES

find $\vec{x} \in \vec{x}_0 + V \quad (A\vec{x} - \vec{b}, \vec{y}) = 0 \quad \forall \vec{y} \in W$: BiCG

Krylov 部分空間

$$V = K_n(A, \vec{r}_0) := \mathrm{span}[\vec{r}_0, A\vec{r}_0, A^2\vec{r}_0, \cdots, A^{n-1}\vec{r}_0]$$
$$W = K_n(A^T, \vec{r}_0^*) := \mathrm{span}[\vec{r}_0^*, A^T\vec{r}_0^*, (A^T)^2\vec{r}_0^*, \cdots, (A^T)^{n-1}\vec{r}_0^*]$$

Krylov 部分空間と線形方程式の解：1/2

- $A \in \mathbb{R}^{N\times N}$, 正則 (逆を持つ), $\vec{b} \in \mathbb{R}^N$,
- $\vec{x}_0$: 初期推定,
- $\vec{r}_0 := \vec{b} - A\vec{x}_0$: 初期残差.

Krylov 部分空間

$$K_n(A,\vec{r}_0) := \mathrm{span}[\vec{r}_0, A\vec{r}_0, A^2\vec{r}_0, \cdots, A^{n-1}\vec{r}_0]$$

命題 $A^n\vec{r}_0 \in K_{n+1}(A,\vec{r}_0)$ が次の条件を満すとき

$$A^n\vec{r}_0 \in K_n(A,\vec{r}_0) \;\Rightarrow\; A^{n+m}\vec{r}_0 \in K_n(A,\vec{r}_0) \quad \forall m > 0$$

数学的帰納法による証明: $A^{n+m}\vec{r}_0 \in K_n(A,\vec{r}_0) \quad m \geq 0$ を仮定する

$$\begin{aligned} A^{n+m}\vec{r}_0 &= \textstyle\sum_{k=0}^{n-1}\alpha_k A^k\vec{r}_0 \\ A^{n+m+1}\vec{r}_0 &= \textstyle\sum_{k=0}^{n-2}\alpha_k A^{k+1}\vec{r}_0 + \alpha_{n-1}A^n\vec{r}_0 \\ &= \textstyle\sum_{k=0}^{n-2}\alpha_k A^{k+1}\vec{r}_0 + \alpha_{n-1}\sum_{k=0}^{n-1}\beta_k A^k\vec{r}_0 \in K_n(A,\vec{r}_0)\,. \end{aligned}$$

行列 A と初期残差 $\vec{r}_0$ によって生成される最大の Krylov 部分空間の次元を n_0 とする

- $n_0 := \min_n\{K_n(A,\vec{r}_0) = K_{n+1}(A,\vec{r}_0)\}$

$K_1(A,\vec{r}_0) \subset K_2(A,\vec{r}_0) \subset \cdots \subset K_{n_0}(A,\vec{r}_0) = K_{n_0+1}(A,\vec{r}_0) = K_{n_0+2}(A,\vec{r}_0) = \cdots$

$\mathrm{dim}K_l(A,\vec{r}_0) = l \quad 1 \leq l \leq n_0$

Krylov 部分空間と線形方程式の解：2/2

定理

$\vec{x}$: を線形方程式 $A\vec{x} = \vec{b}$ の解とする $\Rightarrow \vec{x} \in \vec{x}_0 + K_{n_0}(A, \vec{r}_0)$.

証明

$\vec{r}_0, A\vec{r}_0, A^2\vec{r}_0, \cdots, A^{n_0-1}\vec{r}_0$: は一次独立であることに注意する

▷ $A^{n_0}\vec{r}_0 = \sum_{k=0}^{n_0-1} \alpha_k A^k \vec{r}_0$ を満たす $\alpha_0 \neq 0$ が存在する

$\alpha_0 = 0 \;\Rightarrow\; A^{n_0}\vec{r}_0 = \sum_{k=1}^{n_0-1}\alpha_k A^k \vec{r}_0,$

左から A^{-1} を掛けると

$A^{n_0-1}\vec{r}_0 = \sum_{k=1}^{n_0-1}\alpha_k A^{k-1}\vec{r}_0,$

$\Rightarrow \quad \vec{r}_0, A\vec{r}_0, A^2\vec{r}_0, \cdots, A^{n_0-1}\vec{r}_0$: が一次独立であることに矛盾

▷ 解を Krylov 部分空間のベクトルの一次結合で表わす

$$\alpha_0\vec{r}_0 + \sum_{k=1}^{n_0-1}\alpha_k A^k\vec{r}_0 - A^{n_0}\vec{r}_0 = \vec{0} \;\Leftrightarrow\; \vec{r}_0 + \sum_{k=1}^{n_0-1}\frac{\alpha_k}{\alpha_0}A^k\vec{r}_0 - \frac{1}{\alpha_0}A^{n_0}\vec{r}_0 = \vec{0}$$

$$\Leftrightarrow \left(\vec{b} - A\vec{x}_0\right) + \sum_{k=1}^{n_0}\gamma_k A^k\vec{r}_0 = \vec{0} \;\Leftrightarrow\; A\left(\vec{x}_0 - \sum_{k=1}^{n_0}\gamma_k A^k\vec{r}_0\right) = \vec{b}.$$

$\vec{x}' = \vec{x}_0 - \sum_{k=1}^{n_0}\gamma_k A^k\vec{r}_0 \in \vec{x}_0 + K_{n_0}(A, \vec{r}_0)$ と $A\vec{x} = \vec{b}$ の解が一意的であることから

Krylov 部分空間と線形方程式の変分問題の解

定理

次の変分問題 (vP) を考える

$\vec{x} \in \vec{x}_0 + K_{n_0}(A, \vec{r}_0)$ は次を満たす $(A\vec{x} - \vec{b}, \vec{y}) = 0 \quad \forall \vec{y} \in K_{n_0}(A, \vec{r}_0)$

この問題は一意的な解を持ち, 連立一次方程式の解 $A\vec{x} = \vec{b}$ に等しい

証明

- $\vec{x}_* \in \vec{x}_0 + K_{n_0}(A, \vec{r}_0)$: を (V) での解とする.
- $\vec{x}_1$ を変分問題 $(A\vec{x} - b, \vec{y}) = 0 \quad \forall \vec{y} \in \mathbb{R}^N$ の解とする
  $\Rightarrow \vec{x}_1 \in \vec{x}_0 + K_{n_0}(A, \vec{r}_0)$
  $(A\vec{x}_1 - b, \vec{y}) = 0 \quad \forall \vec{y} \in K_{n_0}(A, \vec{r}_0) \subset \mathbb{R}^N \Rightarrow \vec{x}_1$ は (vP) での解

一意性を確かめる $(A(\vec{x}_0 - \vec{x}_*), \vec{y}) = 0 \quad \forall \vec{y} \in K_{n_0}(A, \vec{r}_0) \overset{?}{\Rightarrow} \vec{x}_0 - \vec{x}_* = \vec{0}$

行列 A が $K_{n_0}(A, \vec{r}_0)$ で 1 対 1 であることは

$\vec{z} \in K_{n_0}(A, \vec{r}_0)$ を次を満すものとする $(A\vec{z}, \vec{y}) = 0 \quad \forall \vec{y} \in K_{n_0}(A, \vec{r}_0)$

$$\Rightarrow A\vec{z} \in (K_{n_0}(A, \vec{r}_0))^{\perp} \vee \vec{z} \in \ker A$$

$$\left.\begin{array}{rcl} \vec{z} \in K_{n_0}(A, \vec{r}_0) & \Rightarrow & A\vec{z} \in K_{n_0}(A, \vec{r}_0) \\ \exists A^{-1} & \Rightarrow & \ker A = \{\vec{0}\} \end{array}\right\} \Rightarrow \vec{z} = \vec{0}.$$

変分問題の解を続けて計算する

do $m = 1, 2, \cdots, n_0$

find $\vec{x} \in \vec{x}_0 + K_m(A, \vec{r}_0) \quad (A\vec{x} - \vec{b}, \vec{y}) = 0 \quad \forall \vec{y} \in K_m(A, \vec{r}_0)$

- Conjugate Gradient (CG) 法 $\Leftarrow A$: 正定値対称
- Full Orthogonization Method (FOM) $\Leftarrow A$: 強圧的

Arnoldi プロセス

$$\|\vec{v}_1\| = 1,$$

$$\{\vec{v}_1, A\vec{v}_1, A^2\vec{v}_1, \cdots, A^{m-1}\vec{v}_1\} \to \text{Gram-Schmidt 法による } \{\vec{v}_1, \vec{v}_2, \cdots, \vec{v}_m\}$$

正規直交基底

アルゴリズム (Arnoldi プロセス)

do $j = 1, 2, \cdots, m$

$$h_{i,j} = (A\vec{v}_j, \vec{v}_i) \quad 1 \le i \le j$$

$$\vec{w}_j = A\vec{v}_j - \sum_{i=1}^{j} h_{i,j}\vec{v}_i$$

$$h_{j+1,j} = \|\vec{w}_j\|^2$$

$$\vec{v}_{j+1} = \frac{\vec{w}_j}{h_{j+1,j}}$$

最終行より

$$h_{j+1,j}\vec{v}_{j+1} = A\vec{v}_j - \sum_{i=1}^{j} h_{i,j}\vec{v}_i,$$

$$A\vec{v}_j = \sum_{i=1}^{j+1} h_{i,j}\vec{v}_i.$$

$$[A\vec{v}_1, \cdots, A\vec{v}_m] = [\vec{v}_1, \cdots, \vec{v}_m, \vec{v}_{m+1}] \begin{bmatrix} h_{1,1} & h_{1,2} & \cdots & h_{1,m-1} & h_{1,m} \\ h_{2,1} & h_{2,2} & \cdots & h_{2,m-1} & h_{2,m} \\ & h_{3,2} & \cdots & h_{3,m-1} & h_{3,m} \\ & & \ddots & \vdots & \vdots \\ & & & h_{m,m-1} & h_{m,m} \\ & & & & h_{m+1,m} \end{bmatrix}$$

$$AV_m = V_{m+1}\overline{H}_m \qquad \overline{H}_m \in \mathbb{R}^{(m+1)\times m} \text{ : Hessenberg 行列,}$$

$$V_m^T A V_m = H_m \quad \Leftarrow V_m^T V_m = I_m \Leftrightarrow (\vec{v}_j, \vec{v}_i) = \delta_{i\,j} \; 1 \le i, j \le m$$

Full Orthogonizatien 法

- $A \in \mathbb{R}^{N\times N}$, 正則 (逆を持つ), $\vec{b} \in \mathbb{R}^N$,
- $\vec{x}_0$: 初期推定,
- $\vec{r}_0 := \vec{b} - A\vec{x}_0$: 初期残差,
- $K_n(A,\vec{r}_0) :=$ span$[\vec{r}_0, A\vec{r}_0, A^2\vec{r}_0, \cdots, A^{n-1}\vec{r}_0]$: Krylov 部分空間

Arnoldi プロセスによる Krylov 部分空間の基底の生成

$\vec{v}_1 = \vec{r}_0/\beta, \beta = \|\vec{r}_0\|$ から始めて

$$
\begin{aligned}
AV_m &= V_{m+1}\overline{H}_m \\
V_m^T AV_m &= H_m \\
V_m^T \vec{r}_0 &= V_m^T \beta\vec{v}_1 = \beta\vec{\epsilon}_m^{(1)}, \quad [\vec{\epsilon}_m^{(1)}]_i = \delta_{i\,1}\ 1 \le i \le m
\end{aligned}
$$

次を満す $\vec{x}_m \in \vec{x}_0 + K_m(A,\vec{r}_0)$ を見付けよ

$(A\vec{x}_m - \vec{b}, \vec{y}) = 0 \quad \forall \vec{y} \in K_m(A,\vec{r}_0)$

$$
\begin{aligned}
\vec{x}_m &= \vec{x}_0 + V_m\vec{\eta}_m \\
A\vec{x}_m - \vec{b} &= A\vec{x}_0 - \vec{b} + AV_m\vec{\eta}_m \\
&= -\vec{r}_0 + AV_m\vec{\eta}_m \\
V_m^T(A\vec{x}_m - \vec{b}) &= -V_m^T\vec{r}_0 + V_m^T AV_m\vec{\eta}_m \\
&= -\beta\vec{\epsilon}_m^{(1)} + H_m\vec{\eta}_m, \\
\vec{\eta}_m &= H_m^{-1}(\beta\vec{\epsilon}_m^{(1)})
\end{aligned}
$$

H_m : は逆を持つか? A が強圧的 $\Rightarrow$ yes

Generalized Minimal Residual (GMRES / 一般化最小残差) 法: 1/3

- $A \in \mathbb{R}^{N\times N}$, 正則 (逆を持つ), $\vec{b} \in \mathbb{R}^N$,
- $\vec{x}_0$: 初期推定,
- $\vec{r}_0 := \vec{b} - A\vec{x}_0$: 初期残差,
- $K_n(A, \vec{r}_0) :=$ span$[\vec{r}_0, A\vec{r}_0, A^2\vec{r}_0, \cdots, A^{n-1}\vec{r}_0]$: Krylov 部分空間

Arnoldi プロセスにより Krylov 部分空間の基底を構築する
$\vec{v}_1 = \vec{r}_0/\beta, \beta = \|\vec{r}_0\|$ から開始する

$$AV_m = V_{m+1}\overline{H}_m,$$

$$\vec{r}_0 = \beta\vec{v}_1 = \beta V_{m+1}\vec{\epsilon}^{\,(1)}_{m+1}, \quad [\vec{\epsilon}^{\,(1)}_{m+1}]_i = \delta_{i\,1}\ 1 \le i \le m+1$$

次を満す $\vec{x}_m \in \vec{x}_0 + K_m(A, \vec{r}_0)$ を見付けよ

$$\|\vec{b} - A\vec{x}_m\| \le \|\vec{b} - A\vec{y}\| \quad \forall\vec{y} \in \vec{x}_0 + K_m(A, \vec{r}_0)$$

$$\vec{y} = \vec{x}_0 + V_m\vec{\eta}_m$$

$$\begin{aligned}\vec{b} - A\vec{y} &= \vec{b} - A\vec{x}_0 - AV_m\vec{\eta}_m \\ &= \vec{r}_0 - AV_m\vec{\eta}_m \\ &= V_{m+1}\left(\beta\vec{\epsilon}^{\,(1)}_{m+1} - \overline{H}_m\vec{\eta}_m\right)\end{aligned}$$

$$\|\vec{b} - A\vec{y}\| = \|\beta\vec{\epsilon}^{\,(1)}_{m+1} - \overline{H}_m\vec{\eta}_m\| \qquad \Leftarrow V^T_{m+1}V_{m+1} = I_{m+1}.$$

$\vec{x}_m = \vec{x}_0 + V_m\vec{\eta}_m,\ \vec{\eta}_m = \underset{\vec{\eta}_m}{\mathrm{argmin}}\|\beta\vec{\epsilon}^{\,(1)}_{m+1} - \overline{H}_m\vec{\eta}_m\|$ はどんな $\overline{H}_m$ に対しても最小二乗解を持つ.

Generalized Minimal Residual (GMRES / 一般化最小残差) 法: 2/3

最小化問題を Givens 回転による QR-分解で解く

Givens 回転行列 $\Omega_i \in \mathbb{R}^{(m+1)\times(m+1)}$

$$\Omega_1 := \begin{bmatrix} c_1 & s_1 & \\ -s_1 & c_1 & \\ & & I_{m-1} \end{bmatrix}, \quad c_1 := \frac{h_{1\,1}}{\sqrt{h_{1\,1}^2 + h_{2\,1}^2}}, \; s_1 := \frac{h_{2\,1}}{\sqrt{h_{1\,1}^2 + h_{2\,1}^2}}.$$

$$\Omega_1 \overline{H}_m = \begin{bmatrix} h_{1,1}^{(1)} & h_{1,2}^{(1)} & \cdots & h_{1,m-1}^{(1)} & h_{1,m}^{(1)} \\ 0 & h_{2,2}^{(1)} & \cdots & h_{2,m-1}^{(1)} & h_{2,m}^{(1)} \\ & h_{3,2} & \cdots & h_{3,m-1} & h_{3,m} \\ & & \ddots & \vdots & \vdots \\ & & & h_{m,m-1} & h_{m,m} \\ & & & & h_{m+1,m} \end{bmatrix}, \; \beta\Omega_1 \vec{e}_{m+1}^{\,(1)} = \beta\Omega_1 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \beta \begin{bmatrix} c_1 \\ -s_1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$Q_m := \Omega_m \Omega_{m-1} \cdots \Omega_1 \in \mathbb{R}^{(m+1)\times(m+1)},$$

$$Q_{m-1}\overline{H}_m = \begin{bmatrix} h_{1,1}^{(1)} & h_{1,2}^{(1)} & h_{1,3}^{(1)} & \cdots & h_{1,m-1}^{(1)} & h_{1,m}^{(1)} \\ 0 & h_{2,2}^{(2)} & h_{2,3}^{(2)} & \cdots & h_{2,m-1}^{(2)} & h_{2,m}^{(2)} \\ & 0 & h_{3,3}^{(3)} & \cdots & h_{3,m-1}^{(3)} & h_{3,m}^{(3)} \\ & & & \ddots & \vdots & \vdots \\ & & & \ddots & h_{m-1,m-1}^{(m-2)} & h_{m,m-1}^{(m-2)} \\ & & & & 0 & h_{m,m}^{(m-1)} \\ & & & & 0 & h_{m+1,m} \end{bmatrix} \quad \beta \begin{bmatrix} c_1 \\ -c_2 s_1 \\ c_3 s_2 s_1 \\ \vdots \\ \gamma_{m-2} \\ \gamma_{m-1} \\ -s_{m-1}\gamma_{m-1} \\ 0 \end{bmatrix}$$

Generalized Minimal Residual (GMRES / 一般化最小残差) 法: 3/3

$$Q_m\overline{H}_m = \begin{bmatrix} h_{1,1}^{(1)} & h_{1,2}^{(1)} & h_{1,3}^{(1)} & \cdots & h_{1,m-1}^{(1)} & h_{1,m}^{(1)} \\ 0 & h_{2,2}^{(2)} & h_{2,3}^{(2)} & \cdots & h_{2,m-1}^{(2)} & h_{2,m}^{(2)} \\ & 0 & h_{3,3}^{(3)} & \cdots & h_{3,m-1}^{(3)} & h_{3,m}^{(3)} \\ & & 0 & \ddots & \vdots & \vdots \\ & & & \ddots & h_{m-1,m-1}^{(m-1)} & h_{m,m-1}^{(m-1)} \\ & & & & 0 & h_{m,m}^{(m)} \\ & & & & 0 & 0 \end{bmatrix}, \ \beta Q_m \vec{\epsilon}_{m+1}^{(1)} = \beta \begin{bmatrix} c_1 \\ -c_2 s_1 \\ c_3 s_2 s_1 \\ \vdots \\ \gamma_{m-1} \\ \gamma_m \\ -s_m \gamma_m \end{bmatrix}$$

$\overline{R}_m := Q_m \overline{H}_m$: 上三角行列,

$\vec{\gamma}_{m+1} := \beta Q_m \vec{\epsilon}_{m+1}^{(1)} = [\gamma_1, \ \gamma_2, \ \cdots, \ \gamma_{m+1}]^T = [\vec{\gamma}_m^T, \ \gamma_{m+1}]^T$,

$\min \|\beta \vec{\epsilon}_{m+1}^{(1)} - \overline{H}_m \vec{\eta}\| = \min \|Q_m^{-1}(\vec{\gamma}_{m+1} - \overline{R}_m \vec{\eta})\| = |\gamma_{m+1}| = |s_1 s_2 \cdots s_m|\beta$.

$\vec{\eta}_m = R_m^{-1}\vec{\gamma}_m$ は最小値を達成する

- A が逆を持つと $\exists R_m^{-1}$ $(1 \le m \le n_0)$ $\Leftarrow h_{j+1,j} > 0$ $(1 \le j < n_0)$
- 残差 $\|\vec{r}_m\| = \|\vec{b} - A\vec{x}_m\|$ は s_m のおかげで 単調に減少する.
- $h_{m,m}^{(m-1)} = 0 \Rightarrow Q_{m-1}H_m$: 特異, FOM は破綻する.
  $\Rightarrow c_m = 0, s_m = 1$, m-ステップで GMERS は停滞する.
- $\vec{r}_m^{\text{GMRES}} = s_m^2 \vec{r}_{m-1}^{\text{GMRES}} + c_m^2 \vec{r}_m^{\text{FOM}}$ $\quad s_{n_0} = 0, c_{n_0} = 1 \Leftarrow h_{n_0+1,n_0} = 0.$

Conjugate Gradient (共役勾配) 法：1/3

- $A \in \mathbb{R}^{N\times N}$, 対称正定値, $\vec{b} \in \mathbb{R}^N$,
- $\vec{x}_0$: 初期推定,
- $\vec{r}_0 := \vec{b} - A\vec{x}_0$: 初期残差,
- $K_n(A, \vec{r}_0) := \mathrm{span}[\vec{r}_0, A\vec{r}_0, A^2\vec{r}_0, \cdots, A^{n-1}\vec{r}_0]$: Krylov 部分空間

アルゴリズム (CG)

$\vec{p}_0 = \vec{r}_0$.
do $m = 0, 1, \ldots$
  $\alpha_m = \|\vec{r}_m\|^2/(A\vec{p}_m, \vec{p}_m)$,
  $\vec{x}_{m+1} = \vec{x}_m + \alpha_m\vec{p}_m$,
  $\vec{r}_{m+1} = \vec{r}_m - \alpha_m A\vec{p}_m$,
  if $\|\vec{r}_{m+1}\| < \epsilon$ exit loop.
  $\beta_m = \|\vec{r}_{m+1}\|^2/\|\vec{r}_m\|^2$,
  $\vec{p}_{m+1} = \vec{r}_{m+1} + \beta_m\vec{p}_m$.

命題 $1 \le m \le n_0$ に対して次が成り立つ

- $(\vec{r}_m, \vec{z}) = 0 \quad \forall\vec{z} \in K_m(A, \vec{r}_0)$
- $(A\vec{p}_m, \vec{z}) = 0 \quad \forall\vec{z} \in K_m(A, \vec{r}_0)$
- $\mathrm{span}[\vec{r}_0, \vec{r}_1, \cdots, \vec{r}_m] = \mathrm{span}[\vec{p}_0, \vec{p}_1, \cdots, \vec{p}_m] = K_{m+1}(A, \vec{r}_0)$

変分問題の解を続けて計算する

do $m = 1, 2, \cdots, n_0$
  find $\vec{x} \in \vec{x}_0 + K_m(A, \vec{r}_0) \quad (A\vec{x} - \vec{b}, \vec{y}) = 0 \quad \forall\vec{y} \in K_m(A, \vec{r}_0)$

Conjugate Gradient (共役勾配) 法：2/3

命題の数学的帰納法による証明

$m = 1$ の時

(1) $$(\vec{r}_1, \vec{r}_0) = (\vec{r}_0 - \alpha_0 A\vec{p}_0, \vec{r}_0) = (\vec{r}_0, \vec{r}_0) - \frac{\|\vec{r}_0\|}{(A\vec{p}_0, \vec{p}_0)}(A\vec{p}_0, \vec{p}_0) = 0$$

(2) $$(A\vec{p}_1, \vec{r}_0) = (\vec{r}_1 + \beta_0\vec{p}_0, A\vec{p}_0) \quad A \text{ が対称であることより}$$
$$= (\vec{r}_1 + \beta_0\vec{p}_0, \frac{1}{\alpha_0}(\vec{r}_0 - \vec{r}_1)) = -\frac{1}{\alpha_0}(\vec{r}_1, \vec{r}_1) + \frac{\beta_0}{\alpha_0}(\vec{p}_0, \vec{r}_0) = 0$$

(3) $$\text{span}[\vec{r}_0, \vec{r}_1] = \text{span}[\vec{p}_0, \vec{p}_1] = K_2(A, \vec{r}_0) \ \Leftarrow \alpha_0 \neq 0$$

$m = k$ の時, $\vec{z} \in K_{k+1}(A, \vec{r}_0)$ は $\vec{z} = \vec{z}_0 + \gamma_k\vec{p}_k$, $\vec{z}_0 \in K_k(A, \vec{r}_0)$ と分解される

(1) $$(\vec{r}_{k+1}, \vec{z}_0) = (\vec{r}_k - \alpha_0 A\vec{p}_k, \vec{z}_0) = (\vec{r}_k, \vec{z}_0) - \alpha_k(A\vec{p}_k, \vec{z}_0) = 0$$
$$(\vec{r}_{k+1}, \vec{p}_k) = (\vec{r}_k, \vec{p}_k) - \alpha_k(A\vec{p}_k, \vec{p}_k)$$
$$= (\vec{r}_k, \vec{r}_k + \beta_{k-1}\vec{p}_{k-1}) - \|r_k\|^2 = \beta_{k-1}(\vec{r}_k, \vec{p}_{k-1}) = 0$$

(2) $$(A\vec{p}_{k+1}, \vec{z}_0) = (A(\vec{r}_{k+1} + \beta_k\vec{p}_k), \vec{z}_0) = (\vec{r}_{k+1}, A\vec{z}_0) + \beta_k(A\vec{p}_k, \vec{z}_0) = 0$$
$$(A\vec{p}_{k+1}, \vec{p}_k) = (\vec{r}_{k+1}, A\vec{p}_k) + \beta_k(A\vec{p}_k, \vec{p}_k)$$
$$= (\vec{r}_{k+1}, \frac{1}{\alpha_k}(\vec{r}_k - \vec{r}_{k+1})) + \beta_k(A\vec{p}_k, \vec{p}_k)$$
$$= -\frac{1}{\alpha_{k+1}}\|\vec{r}_{k+1}\|^2 + \|\vec{r}_{k+1}\|^2\frac{(A\vec{p}_k, \vec{p}_k)}{\|\vec{r}_k\|^2} = 0$$

(3) $$\text{span}[\vec{r}_0, \cdots, \vec{r}_k, \vec{r}_{k+1}] = \text{span}[\vec{r}_0, \cdots, \vec{r}_k, \vec{r}_k - \alpha_k A\vec{p}_k] = K_{k+2}(A, \vec{r}_0)$$

Conjugate Gradient (共役勾配) 法：3/3

Lanczos プロセスとの関係

$A = A^T$：対称

$$[A\vec{v}_1, \cdots, A\vec{v}_m] = [\vec{v}_1, \cdots, \vec{v}_m, \vec{v}_{m+1}] \begin{bmatrix} h_{1,1} & h_{1,2} & & & \\ h_{2,1} & h_{2,2} & \ddots & & \\ & h_{3,2} & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & h_{m,m-1} \\ & & & h_{m,m-1} & h_{m,m} \\ & & & & h_{m+1,m} \end{bmatrix}$$

$$AV_m = V_{m+1}\overline{T}_m \qquad \overline{T}_m \in \mathbb{R}^{(m+1)\times m} \text{：三重対角行列}, \ T_m \text{：対称}$$

$$V_m^T A V_m = T_m \quad \Leftarrow V_m^T V_m = I_m \ \Leftrightarrow (\vec{v}_j, \vec{v}_i) = 0 \ 1 \leq i, j \leq m$$

find $\vec{x}_m \in \vec{x}_0 + K_m(A, \vec{r}_0) \quad (A\vec{x}_m - \vec{b}, \vec{y}) = 0 \quad \forall \vec{y} \in K_m(A, \vec{r}_0)$

$$\vec{x}_m = \vec{x}_0 + V_m\vec{\eta}_m$$

$$\begin{aligned} 0 = V_m^T(A\vec{x}_m - \vec{b}) &= -V_m^T\vec{r}_0 + V_m^T A V_m \vec{\eta}_m \\ &= -\beta\vec{\epsilon}_m^{(1)} + T_m\vec{\eta}_m, \end{aligned}$$

- A：正定値対称 $\Rightarrow T_m$ は軸選択なしに分解可能
- 共役勾配法は $\vec{x}_m$ を三重対角行列の分解操作を陽に実行しないで計算

Bi-Conjugate Gradient (双共役勾配) 法: 1/3

- $A \in \mathbb{R}^{N\times N}$: 正則 (逆を持つ), $\vec{b} \in \mathbb{R}^N$,
- $\vec{x}_0$: 初期推定,
- $\vec{r}_0 := \vec{b} - A\vec{x}_0$: 初期残差, $\vec{r}_0^{\,*}$: 影の残差
- $K_n(A, \vec{r}_0) :=$ span$[\vec{r}_0, A\vec{r}_0, A^2\vec{r}_0, \cdots, A^{n-1}\vec{r}_0]$, $\quad K_n(A^T, \vec{r}_0^{\,*})$

アルゴリズム (Bi-CG)

$\vec{p}_0 = \vec{r}_0, \quad \vec{p}_0 = \vec{r}_0.$

do $m = 0, 1, \ldots$

$\alpha_m = (\vec{r}_m, \vec{r}_m^{\,*})/(A\vec{p}_m, \vec{p}_m^{\,*}),$

$\vec{x}_{m+1} = \vec{x}_m + \alpha_m \vec{p}_m,$

$\vec{r}_{m+1} = \vec{r}_m - \alpha_m A\vec{p}_m, \quad \vec{r}_{m+1}^{\,*} = \vec{r}_m^{\,*} - \alpha_m A^T \vec{p}_m^{\,*},$

if $\|\vec{r}_{m+1}\| < \epsilon$ exit loop.

$\beta_m = (\vec{r}_{m+1}, \vec{r}_{m+1}^{\,*})/(\vec{r}_m, \vec{r}_m^{\,*}),$

$\vec{p}_{m+1} = \vec{r}_{m+1} + \beta_m \vec{p}_m, \quad \vec{p}_{m+1}^{\,*} = \vec{r}_{m+1}^{\,*} + \beta_m \vec{p}_m^{\,*},$

命題 $1 \le m \le n_0$ に対して破綻しなければ

- $(\vec{r}_m, \vec{z}) = 0 \quad \forall \vec{z} \in K_m(A^T, \vec{r}_0^{\,*})$
- $(A\vec{p}_m, \vec{z}) = 0 \quad \forall \vec{z} \in K_m(A^T, \vec{r}_0^{\,*})$
- span$[\vec{r}_0, \vec{r}_1, \cdots, \vec{r}_m] =$ span$[\vec{p}_0, \vec{p}_1, \cdots, \vec{p}_m] = K_{m+1}(A, \vec{r}_0)$
- span$[\vec{r}_0^{\,*}, \vec{r}_1^{\,*}, \cdots, \vec{r}_m^{\,*}] =$ span$[\vec{p}_0^{\,*}, \vec{p}_1^{\,*}, \cdots, \vec{p}_m^{\,*}] = K_{m+1}(A^T, \vec{r}_0^{\,*})$

変分問題の解を続けて計算する

do $m = 1, 2, \cdots, n_0$

find $\vec{x} \in \vec{x}_0 + K_m(A, \vec{r}_0) \quad (A\vec{x} - \vec{b}, \vec{y}) = 0 \quad \forall \vec{y} \in K_m(A^T, \vec{r}_0^{\,*})$

Bi-Conjugate Gradient (双共役勾配) 法: 2/3

Lanczos 双直交化プロセスとの関係

$$[A\vec{v}_1, \cdots, A\vec{v}_m] = [\vec{v}_1, \cdots, \vec{v}_m, \vec{v}_{m+1}] \begin{bmatrix} \alpha_1 & \beta_2 & & & \\ \delta_2 & \alpha_2 & \ddots & & \\ & \delta_3 & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & \beta_m \\ & & & \delta_m & \alpha_m \\ & & & & \delta_{m+1} \end{bmatrix}$$

$$\begin{aligned} AV_m &= V_m T_m + \delta_{m+1} \vec{v}_{m+1} \vec{\epsilon}_m^{(m)\ T} \\ A^T W_m &= W_m T_m^T + \beta_{m+1} \vec{w}_{m+1} \vec{\epsilon}_m^{(m)\ T} \\ W_m^T A V_m &= T_m \qquad \Leftarrow W_m^T V_m = I_m : \text{双直交性} \end{aligned}$$

双直交 Lanczos アルゴリズム
Petrov-Galerkin 型の変分問題

find $\vec{x} \in \vec{x}_0 + K_m(A, \vec{r}_0) \quad (A\vec{x} - \vec{b}, \vec{y}) = 0 \quad \forall \vec{y} \in K_m(A^T, \vec{r}_0^{\,*})$

基底ベクトルを取り替えると

find $\vec{x}_m = \vec{x}_0 + V_m \vec{\eta}_m,$ は $T_m \vec{\eta}_m = \beta \vec{\epsilon}_m^{(1)}$ を解くことによって定まる.

破綻の二つの可能性

- $(A\vec{p}_m, \vec{p}_m^{\,*}) = 0 \;\Rightarrow\; T_m$ は特異になる
- $(\vec{r}_m, \vec{r}_m^{\,*}) = 0 \;\Rightarrow\;$ Lanczos 双直交化プロセスが破綻する

Bi-Conjugate Gradient (双共役勾配) 法: 3/3

Composite step biconjugate gradient method Bank-Chan 1993
三重対角行列 T_m の 2×2 ブロック軸選択による安定した分解

Quasi-Minimal Residual (QMR) method Freund-Nachtigal 1991
look-ahead (先読み付き) Lanczos プロセスにより V_m を生成 Parlett-Taylor-Liu 1985

$$\vec{x}_m = \vec{x}_0 + V_m \vec{\eta}_m$$

$$\begin{aligned} \vec{b} - A\vec{x}_m &= \vec{r}_0 - AV_m \vec{\eta}_m \\ &= V_{m+1}(\beta \vec{\epsilon}^{(1)}_{m+1} - \overline{T}_m \vec{\eta}_m). \end{aligned}$$

$V^T_{m+1} V_{m+1} \neq I_{m+1}$ in general.
find $\vec{\eta}_m \in \mathbb{R}^m \quad \|\beta \vec{\epsilon}^{(1)}_{m+1} - \overline{T}_m \vec{\eta}_m\| \leq \|\beta \vec{\epsilon}^{(1)}_{m+1} - \overline{T}_m \vec{\eta}\| \quad \forall \vec{\eta} \in \mathbb{R}^m$

転置行列の演算を避ける目的で
Conjugate Gradient Squared (CGS) method Sonnenveld 1989
BiCG で m 次の多項式を $\vec{r}_m = \phi_m(A)\vec{r}_0, \vec{r}^{\,*}_m = \phi_m(A^T)\vec{r}_0^{\,*}$ を用いる

$$\alpha_m = \frac{(\phi_m(A)\vec{r}_0, \phi_m(A^T)\vec{r}_0^{\,*})}{(A\vec{p}_m, \vec{p}^{\,*}_m)} = \frac{(\phi_m(A)^2\vec{r}_0, \vec{r}_0^{\,*})}{(A\vec{p}_m, \vec{p}^{\,*}_m)}$$

新しい残差 $\vec{r}^{\,\prime}_m = \phi_m(A)^2 \vec{r}_0$ は A^T を直接作用させること無しに求められる
収束の安定化と残差減少の平滑化
Bi-Conjugate Gradient Stabilized (BiCGSTAB) van der Vorst 1992
残差ベクトル $\vec{r}^{\,\prime}_m = \psi_m(A)\phi_m(A)\vec{r}_0$ は m 次の多項式の平滑化により改善される
$\psi_m(t) = (1 - \omega_m t)\psi_{m-1}(t)$: 変数を t とする多項式

前処理付共役勾配法

- $A, Q \in \mathbb{R}^{N\times N}$, 対称正定値, $Q \sim A^{-1}$ $\quad \vec{b} \in \mathbb{R}^N$,
- $\vec{x}_0$: 初期推定,
- $\vec{r}_0 := \vec{b} - A\vec{x}_0$: 初期残差.
- $K_n(QA, Q\vec{r}_0) := \mathrm{span}[Q\vec{r}_0, QAQ\vec{r}_0, (QA)^2Q\vec{r}_0, \cdots, (QA)^{n-1}Q\vec{r}_0]$

アルゴリズム (前処理付き CG 法)

$\vec{p}_0 = Q\vec{r}_0$.
do $m = 0, 1, \ldots$
$\quad \alpha_n = (Q\vec{r}_m, \vec{r}_m)/(A\vec{p}_m, \vec{p}_m)$,
$\quad \vec{x}_{m+1} = \vec{x}_m + \alpha_m \vec{p}_m$,
$\quad \vec{r}_{m+1} = \vec{r}_m - \alpha_m A\vec{p}_m$,
$\quad$ if $\|\vec{r}_{m+1}\| < \epsilon$ exit loop.
$\quad \beta_m = (Q\vec{r}_{m+1}, \vec{r}_{m+1})/(Q\vec{r}_m, \vec{r}_m)$,
$\quad \vec{p}_{m+1} = Q\vec{r}_{m+1} + \beta_m \vec{p}_m$.

命題 $1 \le m \le n_0$ に対して

- $(\vec{r}_m, \vec{z}) = 0 \quad \forall \vec{z} \in K_m(QA, Q\vec{r}_0)$
- $(A\vec{p}_m, \vec{z}) = 0 \quad \forall \vec{z} \in K_m(QA, Q\vec{r}_0)$
- $\mathrm{span}[Q\vec{r}_0, Q\vec{r}_1, \cdots, Q\vec{r}_m] = \mathrm{span}[\vec{p}_0, \vec{p}_1, \cdots, \vec{p}_m] = K_{m+1}(QA, Q\vec{r}_0)$

変分問題の解を続けて計算する

do $m = 1, 2, \cdots, n_0$
$\quad$ find $\vec{x} \in \vec{x}_0 + K_m(QA, Q\vec{r}_0) \quad (A\vec{x} - \vec{b}, \vec{y}) = 0 \quad \forall \vec{y} \in K_m(QA, Q\vec{r}_0)$

前処理付き Kyrlov 部分空間法: 1/2

$Q \in \mathbb{R}^N$: 前処理行列, $Q^{-1} \sim A$.
前処理付共役勾配法は次の変分問題で $A = A^T$ の場合と見做すことができる,
$(V_Q^{(m)})$ find $\vec{x} \in \vec{x}_0 + K_m(QA, Q\vec{r}_0)$ $(A\vec{x} - \vec{b}, \vec{y}) = 0$ $\forall \vec{y} \in K_m(QA, Q\vec{r}_0)$
仮定： A は $K_{n_0}(QA, Q\vec{r}_0)$ で 1 対 1
定理
$K_{n_0}(QA, Q\vec{r}_0)$ での変分問題 $(V_Q^{(n_0)})$ は一意的な解を持ち問題 $A\vec{x} = \vec{b}$ に等しい.

- A, Q : 対称正定値 $\Rightarrow$ 共役勾配法に対する仮定は満される
- A, Q : 強圧的 $\Rightarrow$ FOM に対する仮定は満される

GMRES に対しては元の連立一次方程式を変形する.

- 左前処理 $(Q\,A)\vec{x} = Q\vec{b}$
- 右前処理 $(A\,Q)\vec{z} = \vec{b}$, $\vec{x} = Q\vec{z}$

左前処理付 GMRES
find $\vec{x}_m \in \vec{x}_0 + K_m(QA, Q\vec{r}_0)$

$$\|Q\vec{b} - (QA)\vec{x}_m\| \leq \|Q\vec{b} - (QA)\vec{y}\| \quad \forall \vec{y} \in \vec{x}_0 + K_m(QA, Q\vec{r}_0)$$

$$\begin{aligned} K_m(QA, Q\vec{r}_0) &= \mathrm{span}[Q\vec{r}_0, (QA)Q\vec{r}_0, \cdots, (QA)^{m-1}Q\vec{r}_0] \\ &= Q\mathrm{span}[\vec{r}_0, (AQ)\vec{r}_0, \cdots, (AQ)^{m-1}\vec{r}_0] = QK_m(AQ, \vec{r}_0) \end{aligned}$$

右前処理付 GMRES
find $\vec{x}_m \in \vec{x}_0 + QK_m(AQ, \vec{r}_0) = \vec{x}_0 + K_m(QA, Q\vec{r}_0)$

$$\|\vec{b} - (AQ)Q^{-1}\vec{x}_m\| \leq \|\vec{b} - (AQ)Q^{-1}\vec{y}\| \quad \forall \vec{y} \in \vec{x}_0 + QK_m(AQ, \vec{r}_0)$$

flexible GMRES

Flexible GMRES は右前処理付き GMRES の拡張

- $A \in \mathbb{R}^{N\times N}$: 正則 (逆を持つ)　$\vec{b} \in \mathbb{R}^N$,
- Q_m : m-ステップでの右前処理
- $\vec{x}_0$: 初期推定,
- $\vec{r}_0 := \vec{b} - A\vec{x}_0$: 初期残差, $\beta = \|\vec{r}_0\|$, $\vec{v}_1 = \vec{r}_0/\beta$.

Arnoldi プロセスに修正を加える

アルゴリズム (flexible GMRES)

do $j = 1, 2, \ldots, m$
　$\vec{z}_j = Q_j \vec{v}_j$
　$\vec{w} = A\vec{z}_j$
　do $i = 1, \cdots, j$
　　$h_{i,j} := (\vec{w}, \vec{v}_j)$
　　$\vec{w} := \vec{w} - h_{i,j}\vec{v}_i$
　$h_{j+1,j} := \|\vec{w}\|$
　$\vec{v}_{j+1} = \vec{w}/h_{j+1,j}$
$Z_m := [\vec{z}_1, \cdots, \vec{z}_m]$
$\vec{\eta}_m = \underset{\vec{\eta}}{\mathrm{argmin}} \|\beta\vec{\epsilon}^{(1)}_{(m+1)} - \overline{H}_m\vec{\eta}\|$,
$\vec{x}_m = \vec{x}_0 + Z_m\vec{\eta}_m$.

右前処理付 GMRES

$AQ[\vec{v}_1, \vec{v}_2, \cdots, \vec{v}_m] = V_{m+1}\overline{H}_m$

flexible GMRES

$A[Q_1\vec{v}_1, Q_2\vec{v}_2, \cdots, Q_m\vec{v}_m] = V_{m+1}\overline{H}_m$

$$\begin{aligned}\vec{b} - A(\vec{x}_0 + Z_m\vec{\eta}) &= \vec{r}_0 - AZ_m\vec{\eta} \\ &= V_{m+1}(\beta\vec{\epsilon}^{(1)}_{m+1} - \overline{H}_m\vec{\eta})\end{aligned}$$

$V_{m+1}^T V_{m+1} = I_{m+1}$ より残差ベクトルの長さの計算を V_m で変換して

$$\|\vec{b} - A(\vec{x}_0 + Z_m\vec{\eta}_m)\| \leq \|\beta\vec{\epsilon}^{(1)}_{m+1} - \overline{H}_m\vec{\eta}\| \ \forall\vec{\eta} \in \mathbb{R}^m$$

span$[Q_1\vec{v}_1, Q_2\vec{v}_2, \cdots, Q_m\vec{v}_m]$ は Q_j が全て共通して Q である場合を除き, Krylov 部分空間ではない.

共役勾配法の収束評価

- A : 対称正定値, $\exists \alpha > 0\ (A\vec{x}, \vec{x}) \geq \alpha \|\vec{x}\|^2\ \forall \vec{x} \in \mathbb{R}^N$.
- $A = V\Lambda V^T$, Λ : 固有値, V : 固有ベクトル $V^T V = I_N$
- $\vec{x}_*$ を $A\vec{x} = \vec{b}$ の解,　　$\vec{x}_m$ を共役勾配法による近似解とする
- $\mathbb{P}_m$: m-次の多項式

$$
\begin{aligned}
\vec{y}_m - \vec{x}_* &= \vec{x}_0 + q_{m-1}(A)\vec{r}_0 - \vec{x}_* \qquad q_{m-1} \in \mathbb{P}_{m-1} \\
&= \vec{x}_0 + q_{m-1}(A)(\vec{b} - A\vec{x}_0) - \vec{x}_* = (\vec{x}_0 - \vec{x}_*) + q_{m-1}(A)A(\vec{x}_* - \vec{x}_0) \\
&= (I - q_{m-1}(A)A)(\vec{x}_0 - \vec{x}_*) = r_m(A)(\vec{x}_0 - \vec{x}_*) \quad r_m \in \mathbb{P}_m, r(0) = 1.
\end{aligned}
$$

Galerkin 直交性 $(\vec{b} - A\vec{x}_m, \vec{x}_m - \vec{y}_m) = 0 \quad \forall \vec{y}_m \in \vec{x}_0 + K_m(A, \vec{r}_0)$

$$
\alpha \|\vec{x}_m - \vec{x}_*\|^2 \leq (A(\vec{x}_* - \vec{x}_m), \vec{x}_* - \vec{x}_m) \leq \|A\| \|\vec{x}_m - \vec{x}_*\| \|\vec{x}_* - \vec{y}_m\|
$$

$$
\|\vec{y}_m - \vec{x}_*\| = \|r_m(A)(\vec{x}_0 - \vec{x}_*)\| = \|V r_m(\Lambda) V^T (\vec{x}_0 - \vec{x}_*)\| \leq \|r_m(\Lambda)\| \|\vec{x}_0 - \vec{x}_*\|
$$

$$
\begin{aligned}
\min_{r_m \in \mathbb{P}_m, r_m(0)=1} \|r_m(\Lambda)(\vec{x}_0 - \vec{x}_*)\| &\leq \min_{r_m \in \mathbb{P}_m, r_m(0)=1} \max_{\lambda \in [\lambda_{\min}, \lambda_{\max}]} |r_m(\lambda)| \|\vec{x}_0 - \vec{x}_*\| \\
&\leq C_m\left(\frac{\lambda_{\max} + \lambda_{\min}}{\lambda_{\max} - \lambda_{\min}}\right)^{-1} \|\vec{x}_0 - \vec{x}_*\|
\end{aligned}
$$

$C_m(k) = \cosh(k \cosh^{-1}(t))\ |t| \geq 1$: 第一種の Chebyshev 多項式
$\kappa = \lambda_{\max}/\lambda_{\min}$: 条件数

$$
\|\vec{x}_m - \vec{x}_*\| \leq 2\frac{\|A\|}{\alpha} \left(\frac{\sqrt{\kappa} - 1}{\sqrt{\kappa} + 1}\right)^m \|\vec{x}_0 - \vec{x}_*\|
$$

Krylov 部分空間法のまとめ

- CG, FOM, と GMRES は直接法か？ yes でも no でもある
  厳密計算が可能である仮定のもとで, 正定値対称行列に対しての CG と強圧性を持つ非対称行列に対しての FOM は n_0 回の反復の後に厳密解を求めることができる.
- 実際には数値演算誤差により Lanczos プロセスの構成原理の直交性はすぐに失なわれてしまう.
- 通常は近似解が求められれば十分なため, n_0 回の反復の前に適切な停止条件により反復を打ち切ることで Krylov 部分空間法は実用的な解法になる.
- FOM と GMRES は Arnoldi 基底ベクトルを保存する必要があり, Arnoldi プロセスの計算複雑さは大きいが適切な前処理により少ない反復で収束を得ることが可能にになり, 堅牢で実用的な解法になる.
- GMRES の残差は単調に減少するが, 不定値行列に対する収束評価は未だ得られていない.
- BiCG 法のアルゴリズム族は残差が単調に減少することは保障されない. 更に最悪のケースでは look-ahead 技巧を駆使しても双直交 Lanczos プロセスが破綻することがある.

参考文献

- Y. Saad, “Iterative Methods for Sparse Linear Systems, 2nd ed.”, 2003, SIAM
- F. Magoulès, F.-X. Roux, G. Houzeaux, “Parallel Scientific Computing”, 2015, Wiley
- A. Greenbaum, “Iterative Methods solving Sparse Linear Systems”, 1997, SIAM
- J. Málek, Z. Strakoš, “Preconditioningand the Conjugate Gradient Method in the Context of Solving PDEs”, 2015, SIAM
- M. R. Hestenes, E. Stiefel, "Methods of conjugate gradients for solving linear systems". Journal of Research of the National Bureau of Standards. 49 409-435 (1952)
- Y. Saad, "Krylov subspace methods for solving large unsymmetric linear systems", Mathematics of Computation, 37 105-126 (1981)
- Y. Saad, M. H. Schultz, "GMRES: a generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems", SIAM J. Sci. Stat. Comput., 7 856-869 (1986)
- R. E. Bank, T. F. Chan, "An anaylsis of the composite step biconjugate gradient method", Numer Math. 66, 295-320 (1993)
- R. W. Freund, N. M. Nachtigal, "QMR: a quasi-minimal residual method for non-Hermitian linear systems", Numer. Math. 60 315-339 (1991)
- B. N. Parlett, D. R. Taylor, Z. A. Liu, "A look-ahead Lanczos algorithm for unsymmetric matrices", Mathematics of Computation, 44 105-124 (1985)
- P. Sonneveld, CGS, a fast Lanczos-type solver for nonsymmetric linear systems, SIAM J. Sci. Stat. Comput., 10 36-52 (1989)
- H. A. van der Vorst, "Bi-CGSTAB : a fast and smoothly converging variant of Bi-CG for the solution of non-symmetric linear systems", SIAM J. Sci. Stat. Comput., 12 631-644 (1992)