

早期リスタートによる GMRES(m) 法の高速化

津野直人[†] 野寺隆^{††}

偏微分方程式の境界値問題を有限差分法や有限要素法を用いて離散化すると、大規模かつ疎で正則な係数行列を持つ連立1次方程式が生じる。これらの連立1次方程式は一般に反復法を用いて解くことが多い。本稿では Krylov 部分空間法の1つである GMRES 法について考える。GMRES 法は各反復で残差ノルムを最小にする算法である。しかし、必要とする計算時間と記憶容量が反復回数とともに増加してしまうため、通常はリスタート型の GMRES(m) 法が使われる。この GMRES(m) 法に対してリスタート周期 m の適切な設定が問題となる。リスタート周期を短く設定すると、収束するまでの反復回数が膨大になったり、もしくはまったく収束しないという可能性が高くなる。逆に、リスタート周期を必要以上に長く設定すると、計算時間が膨大になる。本稿ではリスタート周期を自動的に早める手法を提案する。この手法はリスタート周期を早めることで不必要な計算を行わないようにし、計算時間を短縮することである。いくつかの数値実験の結果から、本稿で提案する手法は、問題の規模が大きいほどオーバーヘッドの比率を小さくし、計算時間を短縮する効果を発揮する算法であることを示す。

The Speedup of the GMRES(m) Method Using the Early Restarting Procedure

NAOTO TSUNO[†] and TAKASHI NODERA^{††}

Using a finite difference method or a finite element method to discretize an elliptic boundary value problem of partial differential equation, we obtain systems of linear algebraic equations, where the coefficient matrix is large, sparse, and nonsingular. These systems are often solved by using iterative methods. In this paper, we focussed on the GMRES method, one of the most widely utilized Krylov subspace methods. The GMRES method minimizes residual norms at each iteration step. The major drawback to the GMRES method is that the amount of work and storage required per iteration increases linearly with the iteration count. As a result, the GMRES(m) method, the restarted version of the GMRES method, is used. The difficulty lies in choosing the appropriate restarting frequency m . If m is too small, the GMRES(m) method may be slow to converge, or may fail to converge entirely. A value of m that is larger than necessary involves excessive work. We developed a procedure that automatically conducts the early restarting. The effect of the early restarting is to decrease excessive work. The new method is shown to have good numerical properties for large scale problems.

1. はじめに

偏微分方程式の境界値問題を有限差分法や有限要素法で離散化した場合など、大規模で疎 (sparse) な実行列を係数とする連立1次方程式

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

は理工学のあらゆる分野に現れる。

連立1次方程式 (1) の係数行列が大規模で疎という性質を持つとき、これらの連立1次方程式は反復法を

用いて解くことが多い。代表的な反復法として、係数行列が対称かつ正定値という性質を持つ場合には、共役勾配法 (conjugate gradient method)³⁾ をあげることができる。一方、係数行列が非対称の場合にはいまだ決定的な算法が提案されておらず、さまざまな算法が使用されている¹⁾。

現在までに提案されている反復法の多くは、空間

$$\mathcal{K}_k(A; r_0) := \text{span} \{r_0, Ar_0, \dots, A^{k-1}r_0\}$$

を利用して近似解を求める算法である。ただし、ベクトル r_0 は初期近似解 x_0 に対する残差ベクトル ($r_k := b - Ax_k$) である。この空間 $\mathcal{K}_k(A; r_0)$ を、行列 A とベクトル r_0 による第 k 次の Krylov 部分空間と呼ぶ。特に、近似解 x_k が

[†] 慶應義塾大学大学院理工学研究科

Graduate School of Science and Technology, Keio University

^{††} 慶應義塾大学理工学部

Faculty of Science and Technology, Keio University

$$x_k \in x_0 + \mathcal{K}_k(A; r_0)$$

を満たすような算法を Krylov 部分空間法と呼ぶ。Krylov 部分空間法の残差ベクトル r_k は、行列多項式 $\mathcal{P}_k(A)$ を用いて

$$r_k = \mathcal{P}_k(A)r_0$$

と書くこともできる。この多項式 $\mathcal{P}_k(t)$ は制約条件

$$\mathcal{P}_k(0) = 1$$

を満たす k 次の実係数多項式で、残差多項式と呼ばれる。通常、Krylov 部分空間法の収束は、相対残差ノルム $\|r_k\|/\|r_0\|$ の大きさを判断することが多い。

本稿では、GMRES 法 (generalized minimal residual method)⁸⁾ の変形である GMRES(m) 法⁸⁾ の高速化について考える。GMRES 法は Krylov 部分空間法の 1 つで、各反復で残差ノルムを最小化するように近似解を更新する算法である。この算法はけっしてブレイクダウン (breakdown)^{*} を起こさないという好ましい性質を持っている。しかし、近似解や探索ベクトルを反復回数とともに項数が増加する漸化式で更新するため、反復 1 回あたりの計算量と記憶容量は GMRES 法の反復が進むに従って増加してしまう。そこで、反復 1 回あたりの計算量と記憶容量を抑えた GMRES(m) 法が提案されている。

GMRES(m) 法は、GMRES 法の算法を一定周期でリスタート (restart)^{**} することにより、必要とされる計算時間と記憶容量を抑えている。このリスタート周期を必要以上に長く設定すると、GMRES(m) 法の計算時間は膨大になってしまう。本稿では GMRES(m) 法のリスタート周期を自動的に早める手法を提案する。この手法の目的は、リスタート周期を早めることで不必要な計算を行わないようにし、計算時間を短縮することである。

はじめに、2 章において、GMRES 法の算法について記述する。次に、3 章では、GMRES 法の残差ノルムが収束する原理を、残差多項式のゼロ点分布の観点から考える。その考察に基づいて、4 章でリスタート周期を自動的に早める手法を提案する。実装上の注意は 5 章で述べる。そして 6 章で、ここまでに行った考察の数値例による検証や、我々の手法をいくつかのモデル問題に適用した場合に、その収束状況の比較検討を行う。最後に 7 章で、本稿で提案したリスタート周期を早める手法についての結論を述べる。

```

1: 初期近似解  $x_0$  を与える.
2:  $r_0 = b - Ax_0$ 
3:  $v_1 = r_0/\beta$ ,  $\beta = \|r_0\|$ 
4: for  $k = 1, 2, \dots$ 
  4.1:  $w = Av_k$ 
  4.2:  $h_{i,k} = (w, v_i)$  for  $i = 1, 2, \dots, k$ 
  4.3:  $\hat{v}_{k+1} = w - \sum_{i=1}^k h_{i,k}v_i$ 
  4.4:  $h_{k+1,k} = \|\hat{v}_{k+1}\|$ 
  4.5:  $v_{k+1} = \hat{v}_{k+1}/h_{k+1,k}$ 
  4.6:  $\|r_k\| = \|\beta e_1 - \bar{H}_k y_k\|$  を計算する.
      ただし,  $y_k$  は最小二乗問題
       $\min_y \|\beta e_1 - \bar{H}_k y\|$  の解である.
  4.7:  $\|r_k\|/\|r_0\|$  が十分小なら
      近似解  $x_k = x_0 + V_k y_k$  を計算し,
      終了する.
endifor

```

※ 行列 $\bar{H}_k \in \mathbf{R}^{(k+1) \times k}$ は、非ゼロ要素が $h_{i,j}$ の拡張 Hessenberg 行列. 行列 $V_k \in \mathbf{R}^{n \times k}$ は、第 i 列がベクトル v_i の行列. ベクトル e_1 は $[1\ 0\ 0 \dots 0]^T \in \mathbf{R}^{k+1}$.

図 1 GMRES 法
Fig.1 The GMRES method.

2. GMRES 法

GMRES 法の算法を図 1 に示す。この算法に現れる最小二乗問題の解法など、実装に関する詳細については、文献 8) に詳しく述べられている。GMRES 法は Krylov 部分空間法の 1 つで、探索ベクトルどうしの正規直交関係を保ち、残差ノルムを最小化するように近似解を構成する。すなわち、探索ベクトル v_i が

$$\text{span}\{v_1, v_2, \dots, v_k\} = \mathcal{K}_k(A; r_0),$$

$$(v_i, v_j) = \begin{cases} 0 & (i \neq j) \\ 1 & (i = j) \end{cases}$$

を満たし、近似解 $x_k = x_0 + V_k y_k$ が³

$$\|r_k\| = \min_y \|\|r_0\|e_1 - \bar{H}_k y\| \tag{2}$$

を満たすように計算を行う。GMRES 法は、近似解の構成に最小二乗問題 (2) の解 y_k を利用していることから、けっしてブレイクダウンを起こさない堅実な算法である。また、探索ベクトルの直交化にハウスホルダー (Householder) 変換を利用することで数値的安定性を考慮した実装も提案されている⁹⁾。

GMRES 法を厳密に実行することを考えると、新しい探索ベクトルの構成でそれ以前のすべての探索ベクトルに対する直交化を行う必要がある。このことから問題が大規模なとき、GMRES 法の厳密な実行は、計算時間と記憶容量の面から事実上不可能になる。

GMRES(m) 法は GMRES 法の算法を m 回の反復

^{*} 算法中で分母が 0 や 0 に非常に近い値をとり、計算ができなくなること。破綻ともいう。
^{**} その時点で得られている近似解を新たに初期近似解とし、算法を始めから適用すること。再出発ともいう。

を周期としてリスタートを行う算法である。リスタートを行うことで、必要となる計算時間と記憶容量を抑えている。GMRES(m)法の問題はリスタート周期 m の選択にある。リスタート周期を短く設定すると、反復1回あたりの計算量と必要となる記憶容量は少なくて済む。しかし、残差ノルムが収束するまでに必要な反復回数が増加したり、もしくは残差ノルムがまったく収束せずに停滞 (stagnate) したりすることもある。逆に、リスタート周期を使用可能な記憶容量の範囲内で長く設定すると、反復1回あたりの計算量が多くなり、残差ノルムが収束するまでに必要な反復回数は減少しても、計算時間が増加することになる。

GMRES(m)法はリスタート周期の設定に関して問題があるが、GMRES法が持つ残差ノルムの最小性やブレイクダウンを起こさないという性質をそのまま引き継ぐため、一般に使用頻度が高い非定常反復法の1つである。

3. GMRES法の収束原理

本章では、GMRES法の残差ノルムが収束する原理を、残差多項式のゼロ点分布の観点から考察する。

3.1 残差多項式のゼロ点

GMRES法を含む Krylov 部分空間法が理想とする残差多項式 $p^{\text{ideal}}(t)$ を

$$p^{\text{ideal}}(t) := \prod_j \left(1 - \frac{1}{\lambda_j^{\text{ideal}}} t\right)$$

とする。ただし、 λ_j^{ideal} は係数行列 A の固有値である。ここで、 λ_j^{ideal} どうしは互いに重複しておらず、対応する固有ベクトルが初期残差ベクトル r_0 を構成しているものに限る。これ以下、残差多項式 $p^{\text{ideal}}(t)$ のゼロ点 λ_j^{ideal} を、理想的なゼロ点と呼ぶことにする。

GMRES法の k 回目の反復で構成される k 次の残差多項式 $p_k^{\text{GMRES}}(t)$ は

$$p_k^{\text{GMRES}}(t) := \prod_{j=1}^k \left(1 - \frac{1}{\lambda_j^{(k)}} t\right)$$

と定義できる。この残差多項式のゼロ点 $\lambda_j^{(k)}$ は残差ベクトル $r_k = p_k^{\text{GMRES}}(A)r_0$ のノルムを最小化するように計算される。固有値の近似、つまり理想的なゼロ点の近似を目的としているわけではないことを注意しておく。

次に、残差多項式のゼロ点が残差ノルムの収束に対して果たす役割を考える。前述のように、残差多項式のゼロ点は理想的なゼロ点を近似するようには選ばれない。しかし、選ばれたゼロ点の近傍にたまたま理想

的なゼロ点が存在することも考えられる。このとき、初期残差ベクトルの中でその理想的なゼロ点に対応する固有ベクトル成分は、選ばれたゼロ点と理想的なゼロ点との距離に応じて減少する。したがって、残差ノルムがゼロに収束するためには、残差多項式のゼロ点による分布が理想的なゼロ点分布の近似となる必要がある。

Krylov 部分空間法の収束性は残差多項式のゼロ点分布が大きく影響している。また、残差ノルムがゼロに収束するために必要な反復回数とは、理想的なゼロ点分布を近似するのに十分な残差多項式のゼロ点の個数ということになる。

3.2 GMRES(m)法の残差多項式

GMRES(m)法の残差多項式を考える。GMRES(m)法は、 m 回の反復を周期としてその時点で得られている近似解を新たに初期近似解とし、算法をリスタートする^{*}。したがって、GMRES(m)法の k 回目の反復で構成される k 次の残差多項式 $p_k^{\text{GMRES}(m)}(t)$ は

$$p_k^{\text{GMRES}(m)}(t) = p_{k'}^{\text{GMRES}}(t) \prod_{j=1}^i p_m^{(j)}(t),$$

$$k = im + k'$$

と表すことができる。ただし、 $p_{k'}^{\text{GMRES}}(t)$ は直前のリスタートより後に構成された k' ($\leq m$) 次多項式で、 $p_m^{(j)}(t)$ は直前のリスタートより前に構成された m 次多項式である。このように、GMRES(m)法の残差多項式はいくつかの m 次多項式と1つの k' 次多項式による積で表すことができる。

さて、係数行列が非対称のときは理想的なゼロ点が複素数になる可能性がある。したがって、Krylov 部分空間法の残差多項式も複素数のゼロ点を持つ必要がある。多項式は2次以上でそのゼロ点に複素数をとることができる。つまり、理論上は2次多項式の積による残差多項式、すなわち GMRES(2)法で残差ノルムを0にできる。

しかし、GMRES(2)法のようなリスタート周期の短い方法を用いると、経験的に残差ノルムがゼロに収束するまでに必要な反復回数が増加する可能性が高くなる。また、残差ノルムがゼロにまったく収束せずに停滞することもある。逆に、リスタート周期を長くすると収束するまでに必要な反復回数が少なくて済むことが多い。これは、リスタート周期が短いとき、反復を繰り返して残差多項式の次数を上げても、そのゼロ

^{*} 実際には、残差ベクトルの定義 ($r_k := b - Ax_k$) に従って再計算を行う。

点分布が理想的なゼロ点分布の近似とならないことに原因がある。リスタート周期が長いときには、残差多項式が高次多項式の積で構成されるため、そのゼロ点分布が理想的なゼロ点分布の近似となりやすいのである。しかし、リスタート周期を長くすると反復 1 回あたりの計算時間が増加する。結果として、収束するまでに必要な反復回数が減少しても、その計算時間が増加することがある。問題を効率良く解くためのリスタート周期の設定は、ユーザの経験に頼らざるをえないというのが現状である。

4. GMRES($\leq m_{\max}$) 法

本章で提案する GMRES($\leq m_{\max}$) 法は、リスタート周期を自動的に早める GMRES(m) 法の変形版である。リスタート周期は固定でないで、最大リスタート周期 m_{\max} 内で残差多項式のゼロ点分布に応じて決定される。リスタート周期を変化させる目的は、リスタートのタイミングを早めることで不必要な直交化の計算を行わないようにし、残差ノルムが収束するまでの計算時間を短くすることである。

4.1 GMRES($\leq m_{\max}$) 法の残差多項式

GMRES($\leq m_{\max}$) 法の残差多項式も GMRES(m) 法の残差多項式と同様である。すなわち、GMRES($\leq m_{\max}$) 法の k 回目の反復で構成される k 次の残差多項式 $\mathcal{P}_k(t)$ は

$$\mathcal{P}_k(t) = \mathcal{P}_{k'}^{\text{GMRES}}(t) \prod_{j=1}^i \mathcal{P}_{m_j}^{(j)}(t),$$

$$k = \sum_{j=1}^i m_j + k'$$

と表すことができる。ただし、 $\mathcal{P}_{k'}^{\text{GMRES}}(t)$ は直前のリスタートより後に構成された k' ($\leq m_{\max}$) 次多項式で、 $\mathcal{P}_{m_j}^{(j)}(t)$ は直前のリスタートより前に構成された m_j ($\leq m_{\max}$) 次多項式である。ここで、多項式の次数 m_j はその時点でのリスタート周期を意味し、GMRES(m) 法と異なり一定の値ではない。以下では、GMRES($\leq m_{\max}$) 法の全体的な反復回数を k 、その中で直前のリスタートより後に行われた反復の回数を k' で表す。

4.2 リスタートの性質

GMRES($\leq m_{\max}$) 法が利用するリスタートの性質として、以下の 2 つをあげることができる。

4.2.1 計算時間の抑制

リスタートの後の反復で構成される探索ベクトルは、リスタート前の探索ベクトルとの直交化を行わない。GMRES 法の反復 1 回で必要とされる計算時間の大部分は、行列とベクトルとの積 (Av) およびベクトルの内積が占める。内積計算は探索ベクトルの正規直交化で生じる。したがって、リスタートを行うことで内積計算の数を減らすことができ、反復 1 回あたりの計算時間を抑制することができる。

4.2.2 残差多項式のゼロ点の固定

ある時点で構成されている残差多項式は、リスタートを行うことで、それ以後の残差多項式の因子となる。したがって、そのゼロ点は以後の反復で不変となる。

4.3 リスタート周期の決定法

3 章で述べたように、残差ノルムが収束するためには残差多項式のゼロ点分布による理想的なゼロ点分布の近似が必要である。最良のリスタートは、残差多項式のゼロ点が理想的なゼロ点に等しいときに行うものである。しかし、理想的なゼロ点分布をあらかじめ知ることは困難である。そこで、残差多項式のゼロ点を複素平面上でなるべく集中させないことで、未知の理想的な分布に重ねるように試みることを、リスタートの現実的な目標とする。すなわち、残差多項式のゼロ点を集中しないように分布させることで、残差多項式のゼロ点分布が未知である理想的なゼロ点分布に重ねる可能性を高めることがリスタートの目標である。

GMRES($\leq m_{\max}$) 法の残差多項式のゼロ点には次の 2 つの種類がある。

- (1) 多項式 $\mathcal{P}_{k'}^{\text{GMRES}}(t)$ のゼロ点
- (2) 多項式 $\prod_{j=1}^i \mathcal{P}_{m_j}^{(j)}(t)$ のゼロ点

最初に、(1) のゼロ点はそのまま反復を続けると値が変わるゼロ点である。一方、(2) のゼロ点是对応する多項式が残差多項式の因子として確定されており、値が変わることのないゼロ点である。以下では、(1) のゼロ点を直前のリスタートより後に構成されたという意味で新しいゼロ点と呼び、(2) のゼロ点を固定されたゼロ点と呼ぶ。

ここで、 k 個のゼロ点がつくる分布の幅が実軸方向に関して M_{re} 、虚軸方向に関して M_{im} であるとする。このとき、すべてのゼロ点の実軸に関して均一に分布しているとする、その間隔は $M_{\text{re}}/(k-1)$ である。虚軸方向に関しても同様のことがいえる。ここで、任意に選ぶ 2 つのゼロ点 λ' 、 λ'' に対して、条件

$$|\Re(\lambda' - \lambda'')| < \frac{M_{\text{re}}}{(k-1)}$$

が成り立つとき、この 2 つのゼロ点は実軸方向に関して間隔が狭い。さらに、これらのゼロ点 λ' 、 λ'' が虚軸方向に関する条件

$$|\Im(\lambda' - \lambda'')| < \frac{M_{\text{im}}}{(k-1)}$$

も満たすときに、この2つのゼロ点は複素平面上で間隔が狭いと判断することにする。

本章で提案する GMRES($\leq m_{\max}$) 法は、新しいゼロ点が固定されたゼロ点分布の中で間隔が狭い領域に位置しないようリスタートを調整する。以下に、そのリスタートのタイミングを示す。

4.3.1 リスタートのタイミング

新しいゼロ点 $\lambda_j^{(k')}$ すべてが、それぞれを中心とする長方形領域

$$\Gamma(\lambda_j^{(k')}) := \left\{ z \in \mathbf{C} \mid \begin{aligned} \left| \Re(\lambda_j^{(k')} - z) \right| &< \frac{1}{2} \frac{M_{\text{re}}}{(k-1)}, \\ \left| \Im(\lambda_j^{(k')} - z) \right| &< \frac{1}{2} \frac{M_{\text{im}}}{(k-1)} \end{aligned} \right\}$$

に固定されたゼロ点を含まないとき、算法をリスタートする。ただし、すべてのゼロ点がつくる分布の幅 M_{re} , M_{im} は0でないことを仮定している。どちらかが0のときには長方形領域を線分に置きかえて考える。

上の条件を満たす新しいゼロ点は、固定されたゼロ点分布の中で間隔が狭い領域には位置していない。したがって、新しいゼロ点すべてがこの条件を満たすとき、それらはゼロ点分布の集中を防ぐという目標にかなっている。そこで、リスタートによりそれらのゼロ点を固定する。

係数行列が実行列のとき、残差多項式の係数はすべて実数である。このとき、理想的なゼロ点分布は複素平面上で実軸に関して対称である。この対称性を利用して条件判定の対象を実軸を含む複素上半平面のゼロ点分布に限ることで、計算コストを減らすことができる。さらに、リスタートの判断は反復回数が偶数、すなわち多項式の次数が偶数のときのみ行う。多項式の次数が奇数のときには少なくとも1つのゼロ点を実数となる。理想的なゼロ点すべてが複素数の場合に、実数のゼロ点は意味を持たないと考えられるためである。また、本稿で示したリスタートのタイミングは、新しいゼロ点と固定されたゼロ点の位置関係を利用している。しかし、算法を開始した直後は固定されたゼロ点が存在しないので、第1回目のリスタートのタイミングを決定することができない。そこで、本稿では第1回目のリスタートを $k=2$ のときに行うことにする。 $k=2$ という値は、反復回数が偶数の中から計算時間が最も短くなる値を選んだ結果である。GMRES($\leq m_{\max}$) 法の算法は次章で示す。

5. 実装

4章で述べたリスタートの判断を行うためには、残差多項式のゼロ点を計算する必要がある。本章では、残差多項式の算法など、GMRES($\leq m_{\max}$) 法の実装について述べる。

5.1 残差多項式の計算

GMRES法の算法では残差多項式を具体的に計算することはない。ここでは、GMRES法の算法の中で残差多項式の係数を得る方法を示す。ここで示す手法は、Nachtigalら⁶⁾に記載されている方法と同じものである。計算誤差の安定性に関する研究は行われていないが、数値的には十分機能する方法である。

Nachtigalらの論文6)では、補助的な行列 $C_{k'}$ を用いて、次のように残差多項式の係数の計算を行っている。この補助行列 $C_{k'}$ は

$$C_{k'} = \begin{bmatrix} c_{11} & \cdots & c_{1k'} \\ & \ddots & \vdots \\ & & c_{k'k'} \end{bmatrix} \in \mathbf{R}^{k' \times k'}$$

という上三角行列で、その要素は漸化式

$$\begin{bmatrix} c_{1,k'+1} \\ c_{2,k'+1} \\ \vdots \\ c_{k'+1,k'+1} \end{bmatrix} = h_{k'+1,k'}^{-1} \left(\begin{bmatrix} 0 \\ c_{1,k'} \\ \vdots \\ c_{k',k'} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} C_{k'} h_{\cdot,k'} \\ \hline 0 \end{bmatrix} \right) \quad (3)$$

によって計算される。ただし、 $c_{1,1} = 1/\|r_{k-k'}\|$ である。なお、スカラー $h_{k'+1,k'}$ は GMRES法の算法から得られる値で、ベクトル $h_{\cdot,k'}$ は

$$h_{\cdot,k'} = [h_{1,k'} \ h_{2,k'} \ \cdots \ h_{k',k'}]^T$$

である。

ここで、Krylov部分空間 $\mathcal{K}_{k'}(A; r_{k-k'})$ を張る正規直交基底を $v_1, v_2, \dots, v_{k'}$ とする。これらの基底は GMRES法の算法から得られる。そして、2つの行列 $K_{k'}$, $V_{k'}$ を

$$\begin{aligned} K_{k'} &:= [r_{k-k'} \ Ar_{k-k'} \ \cdots \ A^{k'-1} r_{k-k'}] \in \mathbf{R}^{n \times k'} \\ V_{k'} &:= [v_1 \ v_2 \ \cdots \ v_{k'}] \in \mathbf{R}^{n \times k'} \end{aligned}$$

と定義する。行列 $K_{k'}$, $V_{k'}$ には補助行列 $C_{k'}$ を用いて

$$V_{k'} = K_{k'} C_{k'} \quad (4)$$

という関係が成り立つ。

GMRES($\leq m_{\max}$) 法の k 回目の反復における近似解 x_k は

$$\begin{aligned} x_k &= x_{k-k'} + V_{k'} y_{k'} \\ &= x_{k-k'} + Q_{k'-1}^{\text{GMRES}}(A) r_{k-k'} \end{aligned} \quad (5)$$

と構成される。ただし、 $Q_{k'-1}^{\text{GMRES}}(t)$ は $k'-1$ 次多項式である。この近似解に対応する残差多項式 $P_{k'}^{\text{GMRES}}(t)$ は

$$P_{k'}^{\text{GMRES}}(t) = 1 - t Q_{k'-1}^{\text{GMRES}}(t) \quad (6)$$

である。ここで、式(4)により

$$V_{k'} y_{k'} = K_{k'} C_{k'} y_{k'}$$

であるから

$$C_{k'} y_{k'} = [\alpha_0 \ \alpha_1 \ \dots \ \alpha_{k'-1}]^T \quad (7)$$

とおくと、式(5)から

$$Q_{k'-1}^{\text{GMRES}}(t) = \alpha_0 + \alpha_1 t + \dots + \alpha_{k'-1} t^{k'-1}$$

となる。したがって、式(6)から

$$P_{k'}^{\text{GMRES}}(t) = 1 - \alpha_0 t - \alpha_1 t^2 - \dots - \alpha_{k'-1} t^{k'}$$

を得る。漸化式(3)の導出など、詳細は文献(6)に述べられている。

GMRES($\leq m_{\max}$) 法の算法を図2および図3に示す。これらの図において、下線で記したステップが GMRES($\leq m_{\max}$) 法に特有のステップである。その他のステップは GMRES(m) 法と同じであり、実装上の注意も文献(8)に従う。

5.2 リスタート判断に必要な計算

リスタートの判断を行うのに必要な計算は、主に以下の3つである。

- 残差多項式の係数計算
- 残差多項式のゼロ点計算
- 条件の判定

これらの計算が、GMRES($\leq m_{\max}$) 法の GMRES(m) 法に対するオーバーヘッドとなる。これらの計算量はすべて問題の規模とは独立しており、直前のリスタートより後の反復回数と、全ゼロ点の個数に依存していることを注意しておく。また、残差多項式のゼロ点計算は、その解法によって計算量が変わってくる。ゼロ点の計算法は数多くある。しかし、GMRES($\leq m_{\max}$) 法は計算結果のゼロ点を利用するだけなので、その計算法は規定しない。

6. 数値例

本節では、GMRES(m) 法と GMRES($\leq m_{\max}$) 法の収束性を数値例により示す。また、残差多項式のゼロ点分布や、GMRES($\leq m_{\max}$) 法の GMRES(m) 法

```

1: 初期近似解  $x_0$  を与える。全体的な反復回数  $k = 0$  を
   セット。
2:  $r_k = b - Ax_k$ 
3:  $v_1 = r_k / \beta$ ,  $\beta = \|r_k\|$ 
4:  $c_{1,1} = 1/\beta$ 
5: for  $k' = 1, 2, \dots, m_{\max}$ 
5.1:  $k = k + 1$ 
5.2:  $w = Av_{k'}$ 
5.3:  $h_{i,k'} = (w, v_i)$  for  $i = 1, 2, \dots, k'$ 
5.4:  $\hat{v}_{k'+1} = w - \sum_{i=1}^{k'} h_{i,k'} v_i$ 
5.5:  $h_{k'+1,k'} = \|\hat{v}_{k'+1}\|$ 
5.6:  $v_{k'+1} = \hat{v}_{k'+1} / h_{k'+1,k'}$ 
5.7: 補助行列  $C_{k'}$  の要素を漸化式(3)で計算する。
5.8:  $\|r_k\| = \|\beta e_1 - \bar{H}_{k'} y_{k'}\|$  を計算する。
   ただし、 $y_{k'}$  は最小二乗問題  $\min_y \|\beta e_1 - \bar{H}_{k'} y\|$ 
   の解である。
5.9:  $\|r_k\| / \|r_0\|$  が十分小なら
   近似解  $x_k = x_{k-k'} + V_{k'} y_{k'}$  を計算し、終了する。
5.10: if  $k' \bmod 2 = 0$  then
5.10.1: 式(7)を計算し、残差多項式の係数を
   求める。
5.10.2: 残差多項式のゼロ点を計算する。
5.10.3: ステップ 5.10.2 で求めたゼロ点に関して、
   実部の最大値  $\gamma_{\max}^{\text{new}}$  と最小値  $\gamma_{\min}^{\text{new}}$ 、
   虚部の最大値  $\delta_{\max}^{\text{new}}$  と最小値  $\delta_{\min}^{\text{new}}$  を求める。
5.10.4:  $M_{\text{re}} = \max(\gamma_{\max}^{\text{new}}, \gamma_{\max}^{\text{fixed}})$ 
    $\quad - \min(\gamma_{\min}^{\text{new}}, \gamma_{\min}^{\text{fixed}})$ 
5.10.5:  $M_{\text{im}} = \max(\delta_{\max}^{\text{new}}, \delta_{\max}^{\text{fixed}})$ 
    $\quad - \min(\delta_{\min}^{\text{new}}, \delta_{\min}^{\text{fixed}})$ 
5.10.6:  $k = 2$  ならばリスタートする。
5.10.7: 新しいゼロ点  $\lambda_j^{(k')}$  すべてについて長方形
   領域  $\Gamma(\lambda_j^{(k')})$  の中に固定されたゼロ点
   が存在しないとき、リスタートする。
endif
endfor
6: リスタートする。

```

※ 下線で記したステップは GMRES($\leq m_{\max}$) 法に特有のステップである。その他のステップは GMRES(m) 法と同じである。

※ リスタートの際は図3の算法を実行する。

※ k は全体的な反復回数を表す。その他の表記は図1や本文と同じである。

図2 GMRES($\leq m_{\max}$) 法
Fig.2 The GMRES($\leq m_{\max}$) method.

に対するオーバーヘッドも計測する。

6.1 残差ノルムの収束と残差多項式のゼロ点分布

3章で述べたように、残差ノルムの収束と残差多項式のゼロ点分布には密接な関係がある。そこで、GMRES(m) 法と GMRES($\leq m_{\max}$) 法の収束性と残差多項式のゼロ点分布を調べる。

各実験に共通する条件は次のとおりである。

- 収束条件: $\|r_k\| / \|r_0\| < 1.0 \times 10^{-12}$
- 初期近似解: $x_0 = [0 \ 0 \ \dots \ 0]^T$

```

R1: 近似解  $x_k = x_{k-k'} + V_{k'} y_{k'}$  を計算する.
R2: 新しいゼロ点  $\lambda_j^{(k')}$  すべてを, 固定された
    ゼロ点として保存する.
R3: if  $k = 2$  then
    R3.1:  $\gamma_{\max}^{\text{fixed}} = \gamma_{\max}^{\text{new}}, \gamma_{\min}^{\text{fixed}} = \gamma_{\min}^{\text{new}}$ 
    R3.2:  $\delta_{\max}^{\text{fixed}} = \delta_{\max}^{\text{new}}, \delta_{\min}^{\text{fixed}} = \delta_{\min}^{\text{new}}$ 
    else
    R3.3:  $\gamma_{\max}^{\text{fixed}} = \max(\gamma_{\max}^{\text{new}}, \gamma_{\max}^{\text{fixed}}),$ 
         $\gamma_{\min}^{\text{fixed}} = \min(\gamma_{\min}^{\text{new}}, \gamma_{\min}^{\text{fixed}}),$ 
    R3.4:  $\delta_{\max}^{\text{fixed}} = \max(\delta_{\max}^{\text{new}}, \delta_{\max}^{\text{fixed}}),$ 
         $\delta_{\min}^{\text{fixed}} = \min(\delta_{\min}^{\text{new}}, \delta_{\min}^{\text{fixed}})$ 
    endif
R4: 図 2 のステップ 2 へ飛ぶ.
    * 表記などは図 2 と同じである.
    
```

図 3 GMRES($\leq m_{\max}$) 法のリスタート
Fig. 3 The restarting procedure of the GMRES($\leq m_{\max}$) method.

- 計算機：分散メモリ型並列計算機 AP3000
- プロセッサ：8 台の UltraSPARC (U300)
- 計算精度：倍精度
- 時間計測：シングルジョブ環境で 3 回の実験を行った結果の平均値

本章の数値例では、行列とベクトルの乗算 (Av) など、算法の演算レベルで並列計算を行った。また、GMRES($\leq m_{\max}$) 法で必要な残差多項式のゼロ点は、QR 法を利用して計算機精度で求めた。すなわち、特性多項式のゼロ点が考えている残差多項式のゼロ点と等しい行列を生成し、その行列の固有値として残差多項式のゼロ点を計算した。このゼロ点の計算方法の詳細は付録に示すことにする。これは、残差多項式の係数が 1 から 10^{13} 以上までと大きく変化し、かつ近接根の問題も生じて、我々の計算環境では DKA 法^{(10),(11)} の精度が十分に上がらなかったためである。

実験 1：Toeplitz 行列

$$\begin{bmatrix} 2 & 1 & & & \\ 0 & 2 & 1 & & \\ \gamma & 0 & 2 & 1 & \\ & \gamma & 0 & 2 & \ddots \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \end{bmatrix} \in \mathbf{R}^{16384 \times 16384}$$

を連立 1 次方程式 (1) の係数行列 A とし、右辺は $b = [1 \ 1 \ \dots \ 1]^T \in \mathbf{R}^{16384}$ とする²⁾。この問題を係数行列の対角要素が 1 になるように対角スケーリングを行い、GMRES(m) 法と GMRES($\leq m_{\max}$) 法で解く。

実験の結果、収束条件を満たすまでに要した反復回数と計算時間を表 1 に示す。GMRES($\leq m_{\max}$) は収束条

件を満たすために $m = m_{\max}$ の GMRES(m) よりも多くの反復を必要としている。しかし、GMRES(≤ 10) 法と GMRES(≤ 20) 法は、それぞれ GMRES(10) 法と GMRES(20) 法よりも短い時間で収束条件を満たしている。一方、GMRES(≤ 4) 法はもともとリスタート周期が短いため、リスタートのタイミングを早めることで得られる時間的メリットが少ない。結果として、反復回数の増加やリスタート判断のオーバーヘッドが原因となり、GMRES(4) 法よりも計算時間が遅くなっている。

次に、 $\gamma = 1.0$ の場合に係数行列の疑似固有値^{*}が存在する範囲と、各算法で 50 回の反復を行ったときの残差多項式のゼロ点の様子を図 4 に示す。理想的なゼロ点は疑似固有値が存在する範囲内に位置する。図 4 を見ると、リスタート周期の短い GMRES(2) 法のゼロ点の一部に偏った分布をしていることが分かる。この分布の状況が、GMRES(2) 法が収束条件を満たすために他の算法と比べて非常に多くの反復回数を必要としていることの原因である。一方、リスタート周期 m が 4 以上の GMRES(m) 法では、そのゼロ点分布が疑似固有値の存在範囲内に広がっており、理想的なゼロ点分布を近似していると考えられる。したがって、リスタート周期の長短にかかわらずほぼ同じ反復回数で収束条件が満たされている。これに対し、GMRES(≤ 20) 法のゼロ点は GMRES(20) 法のゼロ点よりもさらに広範囲に分布している。その分布は疑似固有値の存在範囲外にも及んでおり、その分、収束条件を満たすために必要な反復回数が GMRES(20) 法よりも多くなっていると考えられる。

実験 2：正方形領域 $\Omega = [0, 1] \times [0, 1]$ における偏微分方程式の境界値問題

$$-u_{xx} - u_{yy} + \alpha u_x = f(x, y)$$

$$u(x, y)|_{\partial\Omega} = 1 + xy$$

を考える^{4),5)}。ただし、右辺の関数 $f(x, y)$ は厳密解が $u(x, y) = 1 + xy$ となるように定めるものとする。この問題を 5 点中心差分法を使ってメッシュ数 256×256 で離散化し、連立 1 次方程式 (1) を作る。ここでメッシュ幅を h とおく。さらに、係数行列の対角要素が 1 になるように対角スケーリングを行い、GMRES(m) 法と GMRES($\leq m_{\max}$) 法で解く。

* 行列 $A \in \mathbf{C}^{n \times n}$ とある正の数 ϵ に対して、行列 A の ϵ -疑似固有値 $\lambda \in \mathbf{C}$ は

$$\left\{ \lambda \in \mathbf{C} \mid \exists u \in \mathbf{C}^n; \|u\| = 1, \|(A - \lambda I)u\| \leq \epsilon \right\}$$

で定義される。疑似固有値の存在範囲を計算する方法など、詳しい性質は文献 7) に示されている。

表 1 実験 1 に対する収束状況
Table 1 The numerical results for experiment 1.

反復回数 (Iterations)		γ の値									
算法	1.0	1.1	1.2	1.3	1.4	1.5	1.6	1.7	1.8	1.9	2.0
GMRES(2)	88	102	119	142	174	218	283	388	576	980	2173
GMRES(4)	53	61	71	83	98	118	146	185	244	342	530
GMRES(10)	51	58	67	78	92	110	133	166	213	286	415
GMRES(20)	51	58	67	78	91	108	131	161	205	271	383
GMRES(≤ 4)	61	68	78	90	103	129	163	201	322	419	693
GMRES(≤ 10)	56	64	79	87	113	139	156	211	317	433	606
GMRES(≤ 20)	54	64	79	90	106	139	156	211	317	433	606

計算時間 (秒) (Computation time (sec))		γ の値									
算法	1.0	1.1	1.2	1.3	1.4	1.5	1.6	1.7	1.8	1.9	2.0
GMRES(2)	0.33	0.38	0.44	0.53	0.65	0.82	1.15	1.66	2.33	4.20	9.01
GMRES(4)	0.21	0.29	0.31	0.36	0.39	0.47	0.59	0.75	0.95	1.38	2.25
GMRES(10)	0.29	0.32	0.37	0.45	0.62	0.66	0.74	1.14	1.63	1.83	2.68
GMRES(20)	0.40	0.48	0.61	0.85	0.95	1.11	1.19	1.49	1.94	2.65	3.80
GMRES(≤ 4)	0.24	0.27	0.32	0.43	0.44	0.52	0.65	0.78	1.30	1.61	3.10
GMRES(≤ 10)	0.26	0.28	0.31	0.39	0.48	0.54	0.72	0.91	1.22	1.81	2.64
GMRES(≤ 20)	0.35	0.27	0.34	0.45	0.50	0.54	0.64	0.95	1.25	2.01	2.34

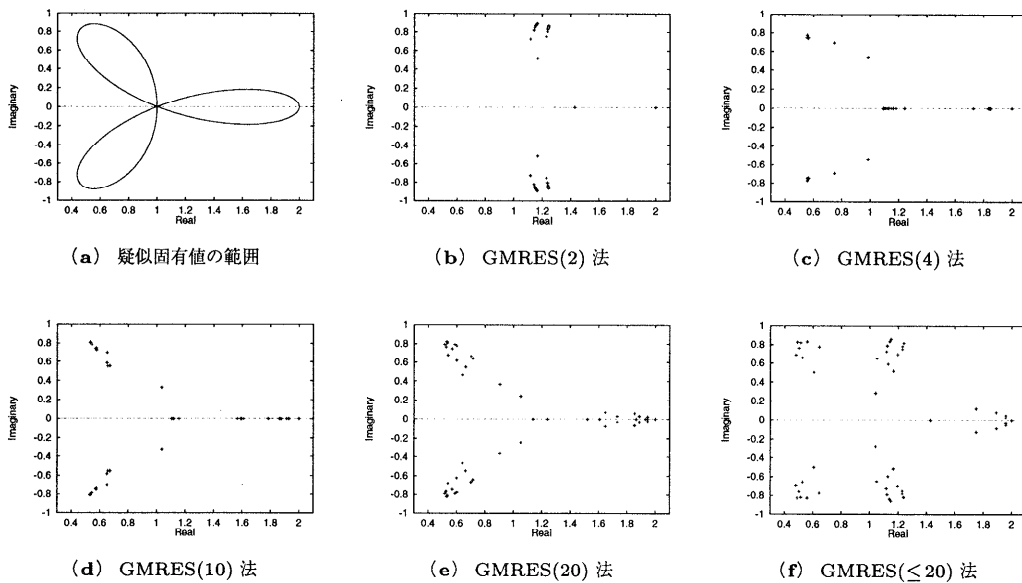


図 4 実験 1 ($\gamma = 1.0$) における残差多項式のゼロ点
Fig. 4 The zeros of residual polynomials for experiment 1 ($\gamma = 1.0$).

実験の結果、収束条件を満たすまでに要した反復回数と計算時間を表 2 に示す。GMRES($\leq m_{\max}$) 法が収束条件を満たすのに必要な反復回数は、 $m = m_{\max}$ の GMRES(m) 法と比べて $\alpha h = 2^4, 2^5$ の場合に増加し、他の場合で減少する傾向がある。一方、計算時間では、最大反復回数内に収束条件を満たすことができた 48 例のうち 33 例で、GMRES($\leq m_{\max}$) 法が $m = m_{\max}$ の GMRES(m) 法よりも高速である。このうち 4 例は GMRES(m) 法が最大反復回数内に収束条件を満たしていない場合である。秒数で最も高速化されたのは $\alpha h = 2^2$ の場合で、GMRES(40) 法が 63.28 秒であるのに対し、GMRES(≤ 40) 法では 8.95 秒である。逆に、秒数で最も遅くなったのは $\alpha h = 2^5$ の場合で、GMRES(10) 法が 13.61 秒であるの対

し、GMRES(≤ 10) 法では 20.56 秒である。

次に、 $\alpha h = 2^0$ の場合に各算法で 500 回の反復を行ったときの残差多項式のゼロ点の様子を図 5 に、そのときの残差ノルムを表 3 に示す。GMRES(m) 法の残差多項式のゼロ点は、リスタート周期が長いほど広範囲に分布している。一方、GMRES(≤ 40) 法の残差多項式のゼロ点は、GMRES(40) 法の残差多項式のゼロ点よりも狭い範囲ではあるが、ある程度分散して存在している。また、残差多項式のゼロ点が高い範囲に分布しているほど残差ノルムが小さくなる傾向がある。

図 6 に、 $\alpha h = 2^2$ の場合の GMRES(10) 法と GMRES(≤ 10) 法が収束する様子を示す。なお、このときの GMRES(≤ 10) 法のリスタート周期を表 4 に示す。両算法ともほぼ同じ回数の反復を行った後、収

表2 実験2に対する収束状況
Table 2 The numerical results for experiment 2.

反復回数 (Iterations)										
算法	αh の値									
	0	2 ⁻³	2 ⁻²	2 ⁻¹	2 ⁰	2 ¹	2 ²	2 ³	2 ⁴	2 ⁵
GMRES(2)	*	*	*	2284	918	783	800	625	967	1466
GMRES(4)	*	*	2549	889	770	767	732	774	609	885
GMRES(10)	*	2125	912	862	909	911	917	865	803	787
GMRES(20)	*	1260	1033	1072	1092	1122	1059	1040	966	912
GMRES(30)	*	1017	1142	1176	1241	1188	1248	1110	1187	1132
GMRES(40)	*	1149	1320	1426	1398	1367	1356	1236	1266	1241
GMRES(<4)	3885	1444	1053	881	787	710	692	718	850	1204
GMRES(<10)	*	1240	920	913	911	786	685	728	1096	1530
GMRES(<20)	*	1132	1017	1191	1017	764	685	728	1107	1497
GMRES(<30)	4165	1077	1239	1292	1148	764	685	728	1104	1258
GMRES(<40)	3242	1078	1260	1417	1052	764	685	728	1298	1432

計算時間 (秒) (Computation time (sec))										
算法	αh の値									
	0	2 ⁻³	2 ⁻²	2 ⁻¹	2 ⁰	2 ¹	2 ²	2 ³	2 ⁴	2 ⁵
GMRES(2)	*	*	*	28.15	11.39	9.98	10.02	7.79	12.28	18.27
GMRES(4)	*	*	32.65	11.75	10.12	10.18	9.19	9.82	8.17	11.63
GMRES(10)	*	38.15	16.46	15.86	15.80	15.72	16.00	15.86	14.24	13.61
GMRES(20)	*	32.28	26.31	26.48	27.90	28.87	26.84	26.29	25.10	23.26
GMRES(30)	*	35.18	39.60	42.46	46.61	42.81	43.48	38.28	40.17	38.73
GMRES(40)	*	50.36	58.44	65.99	64.81	63.74	63.28	53.85	55.83	54.60
GMRES(<4)	57.85	19.74	14.20	12.33	10.80	10.60	8.83	9.40	10.98	15.61
GMRES(<10)	*	23.00	17.23	16.73	16.54	11.20	9.14	9.44	14.84	20.56
GMRES(<20)	*	31.22	27.80	32.70	23.40	10.59	9.10	9.60	15.63	22.84
GMRES(<30)	162.59	38.41	45.25	45.05	28.31	10.98	8.96	9.97	16.50	24.64
GMRES(<40)	141.69	43.87	50.94	53.99	25.31	10.82	8.95	9.75	31.86	35.73

* 最大反復回数 5000 回内で収束条件を満たさず

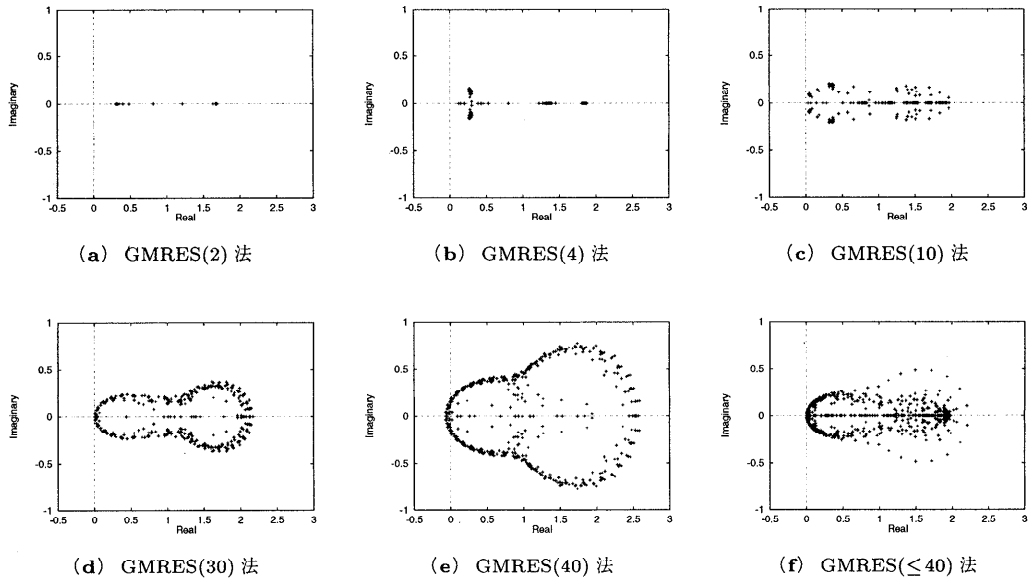


図5 実験2 ($\alpha h = 2^0$) における残差多項式のゼロ点
Fig. 5 The zeros of residual polynomials for experiment 2 ($\alpha h = 2^0$).

表3 実験2 ($\alpha h = 2^0$) における反復500回目の残差ノルム
Table 3 The residual norms at 500 iterations for experiment 2 ($\alpha h = 2^0$).

算法	GMRES(2) 法	GMRES(4) 法	GMRES(10) 法
$\ r_{500}\ $	4.66×10^{-2}	4.81×10^{-2}	3.91×10^{-2}

算法	GMRES(30) 法	GMRES(40) 法	GMRES(<40) 法
$\ r_{500}\ $	1.79×10^{-2}	1.53×10^{-2}	3.81×10^{-3}

束が加速している。これを計算時間で見ると、リスタートを早めたことによって、GMRES(<10) 法の方が GMRES(10) 法よりも先に収束の加速が始まって

いる。

実験3: 正方形領域 $\Omega = [0, 1] \times [0, 1]$ における偏微分方程式の境界値問題

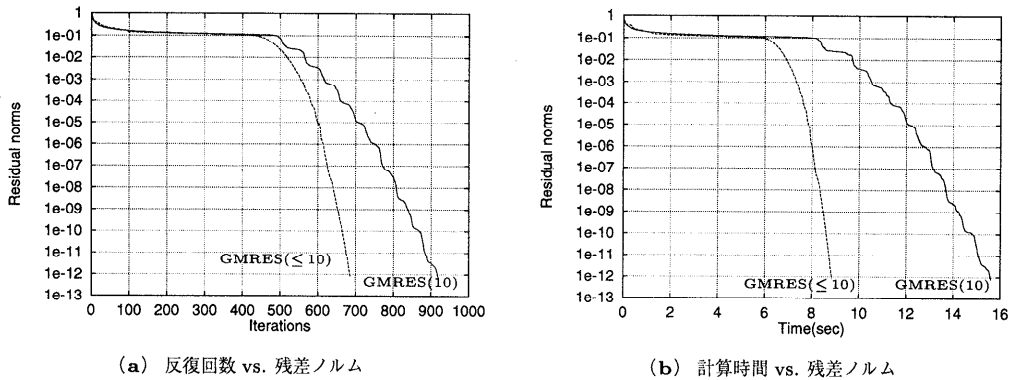
$$-u_{xx} - u_{yy} + \alpha\{g_1(x, y)u_x + g_2(x, y)u_y\} = f(x, y),$$

$$g_1(x, y) = y - \frac{1}{2},$$

$$g_2(x, y) = \left(x - \frac{1}{3}\right) \left(x - \frac{2}{3}\right)$$

$$u(x, y)|_{\partial\Omega} = 1 + xy$$

を考える⁴⁾。ただし、右辺の関数 $f(x, y)$ は厳密解が



(a) 反復回数 vs. 残差ノルム

(b) 計算時間 vs. 残差ノルム

図 6 実験 2 ($\alpha h = 2^2$) における収束の様子

Fig. 6 The convergence behavior for experiment 2 ($\alpha h = 2^2$).

表 4 実験 2 ($\alpha h = 2^2$) における GMRES(≤ 10) 法のリスタート周期

Table 4 The restart frequency of the GMRES(≤ 10) method for experiment 2 ($\alpha h = 2^2$).

リスタート周期 (m)	2	4	6	8	10
出現回数	281	18	7	1	0

$u(x, y) = 1 + xy$ となるように定めるものとする。この問題を 5 点中心差分法を使ってメッシュ数 128×128 で離散化し、連立 1 次方程式 (1) を作る。ここでメッシュ幅を h とおく。さらに、係数行列の対角要素が 1 になるように対角スケーリングを行い、GMRES(m) 法と GMRES($\leq m_{\max}$) 法で解く。

実験の結果、収束条件を満たすまでに要した反復回数と計算時間を表 5 に示す。GMRES($\leq m_{\max}$) 法が収束条件を満たすのに必要な反復回数は、 $m = m_{\max}$ の GMRES(m) 法と比べて多くの場合で減少している。一方、計算時間では、最大反復回数内に収束条件を満たすことができた 33 例のうち 17 例で、GMRES($\leq m_{\max}$) 法が $m = m_{\max}$ の GMRES(m) 法よりも高速である。このうち 7 例は GMRES(m) 法が最大反復回数内に収束条件を満たしていない場合である。秒数が最も高速化されたのは $\alpha h = 0$ の場合で、GMRES(20) 法が 38.21 秒であるのに対し GMRES(≤ 20) 法では 18.57 秒である。逆に、秒数で最も遅くなったのは $\alpha h = 2^{-3}$ の場合で、GMRES(20) 法が 20.23 秒であるのに対し GMRES(≤ 20) 法では 31.64 秒である。

次に、 $\alpha h = 2^0$ の場合に各算法で 500 回の反復を行ったときの残差多項式のゼロ点の様子を図 7 に、そのときの残差ノルムを表 6 に示す。実験 2 の結果と同様、GMRES(m) 法のリスタート周期が長いほど残差多項式のゼロ点が広範囲に分布する傾向がある。しかし、

GMRES(20) 法でもその残差多項式のゼロ点が実軸の近くに偏っており、この問題に対する GMRES(m) 法の収束性の悪さを表している。一方、GMRES(≤ 40) 法の残差多項式のゼロ点は、GMRES(40) 法の残差多項式のゼロ点とほぼ同じ範囲内に分散して存在している。また、実験 2 の結果と同様、残差多項式のゼロ点が高い範囲に分布しているほど、残差ノルムが小さくなる傾向がある。

図 8 に、 $\alpha h = 2^2$ の場合の GMRES(20) 法と GMRES(≤ 20) 法が収束の様子を示す。なお、このときの GMRES(≤ 20) 法のリスタート周期を図 9 にヒストグラムで示す。両算法とも反復回数に関してはほぼ同じ収束性を示している。しかし、GMRES(≤ 20) 法では多くの場合で早めのリスタートが行われているにもかかわらず、期待する計算時間の短縮は得られていない。この結果は問題の規模に原因がある。この実験の問題は実験 2 の問題よりも規模が小さい。したがって、GMRES(≤ 20) 法で行われるリスタート判断のオーバーヘッドが相対的に大きくなり、リスタートを早める効果が失われるのである。

6.2 GMRES($\leq m_{\max}$) 法のオーバーヘッド

GMRES($\leq m_{\max}$) 法の各反復で、リスタートの判断にかかる計算時間を調べる。各実験に共通する条件は次のとおりである。

- 計算機：分散メモリ型並列計算機 AP3000
- プロセッサ：8 台の UltraSPARC (U300)
- 計算精度：倍精度
- 時間計測：シングルジョブ環境で 3 回の実験を行った結果の平均値

実験 4：GMRES($\leq m_{\max}$) 法の反復 1 回にかかる計算時間と、その中でリスタートの判断に要した計算

表5 実験3に対する収束状況
Table 5 The numerical results for experiment 3.

反復回数 (Iterations)		αh の値									
算数	0	2 ⁻³	2 ⁻²	2 ⁻¹	2 ⁰	2 ¹	2 ²	2 ³	2 ⁴	2 ⁵	
GMRES(2)	*	*	*	*	*	*	*	*	*	*	
GMRES(4)	*	*	*	*	*	*	*	*	*	*	
GMRES(10)	*	4249	3269	3939	3095	4440	*	*	*	*	
GMRES(20)	3930	2049	2697	2051	2225	2995	4789	*	*	*	
GMRES(30)	2741	2268	2228	1719	1795	2748	4258	*	*	*	
GMRES(40)	2102	1431	1489	1718	1751	2518	4065	*	*	*	
GMRES(≤4)	2076	2056	1771	1736	2209	4659	*	*	*	*	
GMRES(≤10)	2709	2403	2145	3524	2840	4006	*	*	*	*	
GMRES(≤20)	1539	2376	2124	1996	2146	2795	3982	*	*	*	
GMRES(≤30)	1376	1619	1649	1793	1924	2640	3903	*	*	*	
GMRES(≤40)	1578	1364	1480	1711	1887	2613	3803	*	*	*	

計算時間 (秒) (Computation time (sec))		αh の値									
算数	0	2 ⁻³	2 ⁻²	2 ⁻¹	2 ⁰	2 ¹	2 ²	2 ³	2 ⁴	2 ⁵	
GMRES(2)	*	*	*	*	*	*	*	*	*	*	
GMRES(4)	*	*	*	*	*	*	*	*	*	*	
GMRES(10)	*	27.58	21.52	24.55	20.05	28.34	*	*	*	*	
GMRES(20)	38.21	20.23	26.47	20.22	22.03	29.65	46.91	*	*	*	
GMRES(30)	36.29	30.04	29.45	21.90	23.29	36.37	56.63	*	*	*	
GMRES(40)	34.76	23.94	24.83	29.02	29.40	42.12	67.14	*	*	*	
GMRES(≤4)	10.72	10.67	9.20	9.11	11.80	27.34	*	*	*	*	
GMRES(≤10)	23.12	19.43	17.17	30.83	23.59	34.06	*	*	*	*	
GMRES(≤20)	18.57	31.64	27.59	26.12	27.51	33.65	42.22	*	*	*	
GMRES(≤30)	21.53	25.36	26.57	28.76	30.66	41.84	52.91	*	*	*	
GMRES(≤40)	28.33	24.73	26.13	30.89	32.93	45.96	59.59	*	*	*	

* 最大反復回数 5000 回内で収束条件を満たさず

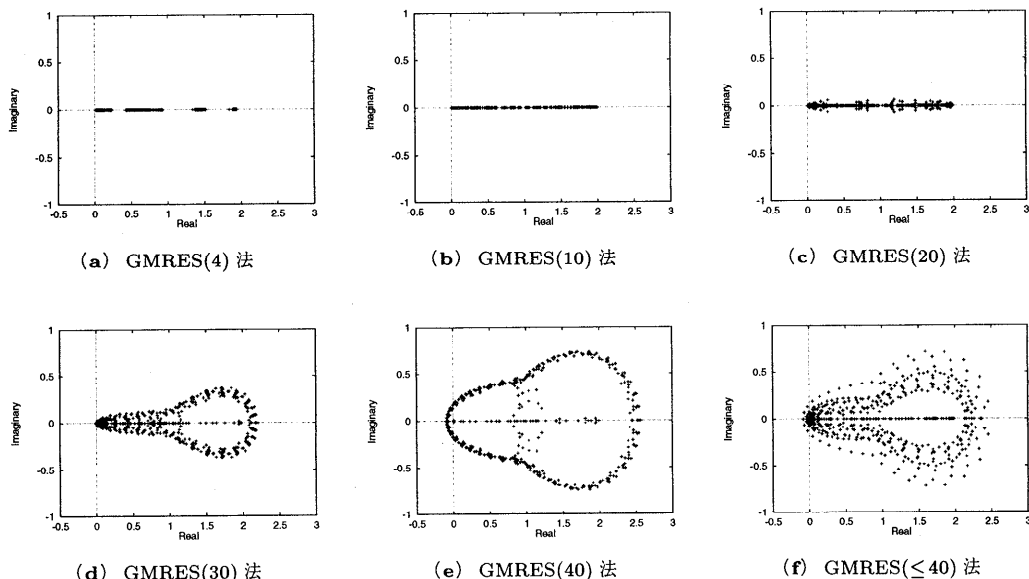


図7 実験3 ($\alpha h = 2^0$) における残差多項式のゼロ点

Fig. 7 The zeros of residual polynomials for experiment 3 ($\alpha h = 2^0$).

表6 実験3 ($\alpha h = 2^0$) における反復500回目の残差ノルム

Table 6 The residual norms at 500 iterations for experiment 3 ($\alpha h = 2^0$).

算数	GMRES(4) 法	GMRES(10) 法	GMRES(20) 法
$\ r_{500}\ $	2.66×10^{-3}	4.51×10^{-4}	4.11×10^{-4}
$\ r_0\ $			

算数	GMRES(30) 法	GMRES(40) 法	GMRES(≤40) 法
$\ r_{500}\ $	2.05×10^{-4}	1.44×10^{-4}	1.96×10^{-4}
$\ r_0\ $			

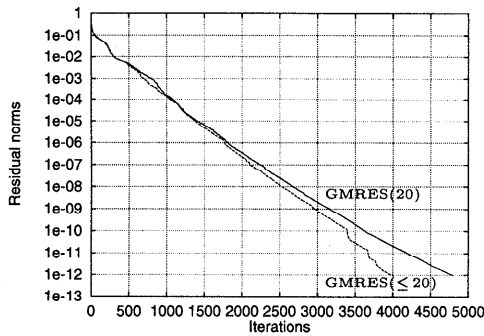
時間を測る。連立1次方程式(1)は実験2と同じものとし、 $\alpha h = 2^0$ とする。問題の規模は65536次元である。また、計測は全体の反復回数が1001回から1050

回するときに行う。

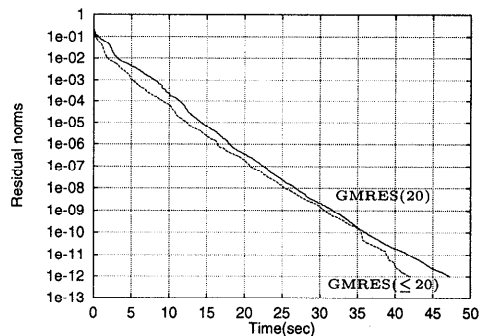
実験結果を図10に示す。計測したオーバーヘッドの内訳は、ほとんどが残差多項式のゼロ点計算によって占められていた。しかし、この計算は偶数ステップのみで実行されており、奇数ステップではほとんどオーバーヘッドがないことに注意しておく。

実験5: 実験4と同様の計測を行う。ただし、連立1次方程式(1)は実験3と同じものとし、 $\alpha h = 2^0$ とする。問題の規模は16384次元である。

実験結果を図11に示す。この実験で用いた問題の



(a) 反復回数 vs. 残差ノルム



(b) 計算時間 vs. 残差ノルム

図 8 実験 3 ($\alpha h = 2^2$) における収束の様子

Fig. 8 The convergence behavior for experiment 3 ($\alpha h = 2^2$).

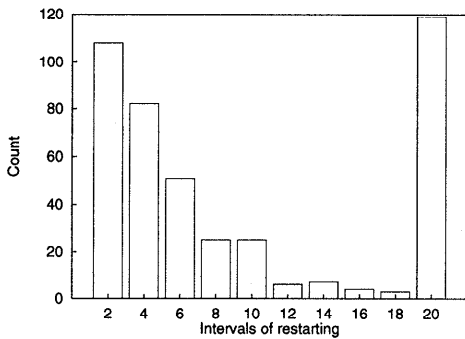


図 9 実験 3 ($\alpha h = 2^2$) における GMRES(≤ 20) 法のリスタート周期

Fig. 9 The restart frequency of the GMRES(≤ 20) method for experiment 3 ($\alpha h = 2^2$).

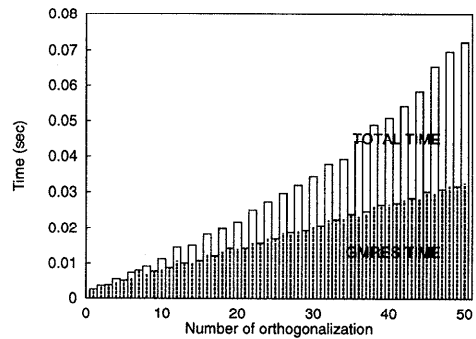


図 11 実験 5 (16384 次元の問題) で計測した GMRES($\leq m_{\max}$) 法のオーバーヘッド

Fig. 11 The overhead time of the GMRES($\leq m_{\max}$) method for experiment 5 (16384 dimension).

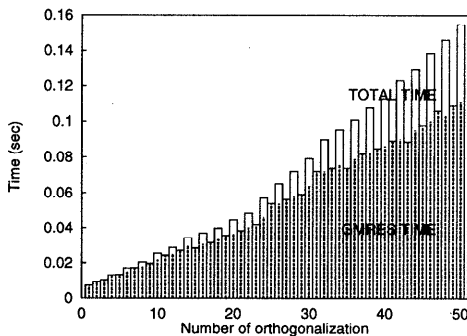


図 10 実験 4 (65536 次元の問題) で計測した GMRES($\leq m_{\max}$) 法のオーバーヘッド

Fig. 10 The overhead time of the GMRES($\leq m_{\max}$) method for experiment 4 (65536 dimension).

規模は、実験 4 で用いた問題の規模の 1/4 である。したがって、通常の GMRES(m) 法で必要とされる計算時間は、図 10 と比べて大幅に短くなっている。一方、

GMRES($\leq m_{\max}$) 法のオーバーヘッドとなるリスタートの判断に必要な計算時間は問題の規模と独立している。したがって、GMRES($\leq m_{\max}$) 法の計算に占めるオーバーヘッドの割合が相対的に大きくなっている。このオーバーヘッドの相対的な大きさが原因となり、リスタートを早めることで得られる GMRES($\leq m_{\max}$) 法の時間的メリットが失われてしまう。結果として、実験 3 のように反復回数が同程度であったり減少したりする場合でも、その計算時間は遅くなってしまふ。

7. ま と め

GMRES 法は、けっしてブレイクダウンを起こさないことが好まれて使われる非定常反復法の 1 つである。しかし、この算法は必要とする計算時間と記憶容量が反復を進めるとともに増加してしまう。そこで、一定周期でリスタートを行う GMRES(m) 法が提案されている。このリスタート周期 m を短く設定すると、残

差ノルムが収束するまでに必要な反復回数が増加したり、もしくは残差ノルムがまったく収束せずに停滞したりすることもある。逆に、リスタート周期を長く設定すると、残差ノルムが収束するまでに必要な反復回数は減少するが、その計算時間は増加してしまう。

本稿ではリスタート周期を自動的に早める GMRES($\leq m_{\max}$) 法を提案した。GMRES($\leq m_{\max}$) 法のリスタートは、最大リスタート周期 m_{\max} 内で残差多項式のゼロ点分布に応じて決定される。このリスタート判断には問題に依存するパラメータが含まれていない。また、GMRES($\leq m_{\max}$) 法は GMRES 法のリスタートのタイミングを変えているだけなので、その堅実さや残差ノルムの最小化という利点をそのまま引き継ぐ算法である。一方、GMRES($\leq m_{\max}$) 法の GMRES(m) 法に対するオーバーヘッドは、残差多項式のゼロ点計算がほとんどである。

いくつかのモデル問題に対する GMRES($\leq m_{\max}$) 法と GMRES(m) 法の残差ノルムの収束の様子の比較を、分散メモリ型並列計算機 AP3000 を用いて行った。問題の規模が大きいとき、GMRES($\leq m_{\max}$) 法は GMRES(m) 法に対するオーバーヘッドが相対的に小さくなり、多くの場合で GMRES(m) 法よりも計算時間が短かった。一方、問題の規模が小さいとき、GMRES($\leq m_{\max}$) 法は GMRES(m) 法に対するオーバーヘッドが相対的に大きくなり、GMRES(m) 法より反復回数が減少する場合でも、計算時間は増加する例があった。これらの実験結果は、GMRES(m) 法に対する GMRES($\leq m_{\max}$) 法のリスタートの判断にかかる計算時間のオーバーヘッドが問題の規模と独立していることに起因する。したがって、GMRES($\leq m_{\max}$) 法は問題の規模が大きいほどオーバーヘッドの比率が小さくなり、計算時間を短縮すると考えられる。これは実用上の大きな利点である。

本稿で提案した GMRES($\leq m_{\max}$) 法は、問題が大規模であるほど効果を発揮するリスタート型の GMRES 法といえる。本稿で示した数値例では、問題の規模が大きいときに、多くの場合で GMRES(m) 法よりも優れた結果を示している。

参考文献

- 1) Bruaset, A.M.: A Survey of Preconditioned Iterative Methods, *Pitman Research Notes in Mathematics*, No.328, Longman Scientific & Technical, UK (1995).
- 2) Gutknecht, M.H.: Variants of Bi-CGSTAB for Matrices with Complex Spectrum, *SIAM J. Sci. Comput.*, Vol.14, pp.1020-1033 (1993).

- 3) Hestenes, M. and Stiefel, E.: Methods of Conjugate Gradients for Solving Linear Systems, *J. Res. Nat. Bur. Stand.*, Vol.49, pp.409-436 (1952).
- 4) Joubert, W.: Lanczos Methods for the Solution of Nonsymmetric Systems of Linear Equations, *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, Vol.13, No.3, pp.926-943 (1992).
- 5) Joubert, W.D. and Carey, G.F.: Parallelizable Restarted Iterative Methods for Nonsymmetric Linear Systems, Part I: Theory, *Intern. J. Computer Math.*, Vol.44, pp.243-267 (1992).
- 6) Nachtigal, N., Reichel, L. and Trefethen, L.: A Hybrid GMRES Algorithm for Nonsymmetric Linear Systems, *SIAM J. Matrix Anal.*, Vol.13, No.3, pp.796-825 (1992).
- 7) Reichel, L.: Eigenvalues and Pseudo-eigenvalues of Toeplitz Matrices, *Lin. Alg. Appl.*, Vol.162-164, pp.153-185 (1992).
- 8) Saad, Y. and Schultz, M.: GMRES: A Generalized Minimal Residual Algorithm for Solving Nonsymmetric Linear Systems, *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, Vol.7, No.3, pp.856-869 (1986).
- 9) Walker, H.: Implementation of the GMRES Method Using Householder Transformations, *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, Vol.9, pp.152-163 (1988).
- 10) 山本哲朗: ある代数方程式解法と解の事後評価法, *数理科学*, No.157, pp.52-57 (1976).
- 11) 伊理正夫: 数値計算, 朝倉書店 (1984).

付 録

A.1 QR 法による多項式のゼロ点計算

6章の数値例では、行列の固有値を計算する QR 法を利用して残差多項式のゼロ点を計算した。詳細は以下のとおりである。

特性多項式として k' 次モニック多項式 $t^{k'} + a_{k'-1}t^{k'-1} + \dots + a_0$ を持つ行列は、コンパニオン行列

$$\begin{bmatrix} 0 & \cdots & 0 & -a_0 \\ 1 & \ddots & \vdots & \vdots \\ & \ddots & 0 & -a_{k'-2} \\ & & 1 & -a_{k'-1} \end{bmatrix}$$

である。残差多項式

$$\mathcal{P}_{k'}^{\text{GMRES}}(t) = -\alpha_{k'-1}t^{k'} - \dots - \alpha_1t^2 - \alpha_0t + 1$$

と同じゼロ点を持つモニック多項式は

$$t^{k'} + \frac{\alpha_{k'-2}}{\alpha_{k'-1}} t^{k'-1} + \dots + \frac{\alpha_1}{\alpha_{k'-1}} t^2 + \frac{\alpha_0}{\alpha_{k'-1}} t - \frac{1}{\alpha_{k'-1}}$$

である。つまり、残差多項式 $\mathcal{P}_{k'}^{\text{GMRES}}(t)$ のゼロ点は、行列

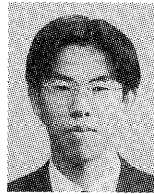
$$D_{k'} := \begin{bmatrix} 0 & \dots & 0 & \frac{1}{\alpha_{k'-1}} \\ 1 & \ddots & \vdots & \vdots \\ & \ddots & 0 & -\frac{\alpha_{k'-3}}{\alpha_{k'-1}} \\ & & 1 & -\frac{\alpha_{k'-2}}{\alpha_{k'-1}} \end{bmatrix}$$

の固有値と等しい。したがって、行列 $D_{k'}$ の固有値を計算することで、残差多項式 $\mathcal{P}_{k'}^{\text{GMRES}}(t)$ のゼロ点を求めることができる。

6章の数値例では、行列 $D_{k'}$ のすべての固有値を求める必要があること、行列 $D_{k'}$ がすでに Hessenberg 行列であることから、QR 法を利用して行列 $D_{k'}$ の固有値、すなわち残差多項式 $\mathcal{P}_{k'}^{\text{GMRES}}(t)$ のゼロ点を計算した。

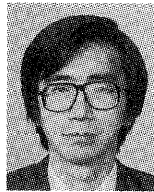
(平成 10 年 3 月 23 日受付)

(平成 11 年 1 月 8 日採録)



津野 直人 (正会員)

1996 年 3 月慶應義塾大学理工学部数理科学科卒業。1998 年 3 月慶應義塾大学大学院理工学研究科 (数理科学専攻) 修了。同年、日立製作所入社。修士 (工学)。ハイパフォーマンス・コンピューティングに興味を持つ。



野寺 隆 (正会員)

1982 年慶應義塾大学大学院工学研究科博士課程 (数理工学専攻) 修了。現在、同大学助教授。その間、1986 年より 1 年間米国スタンフォード大学客員教授。大規模な行列計算の算法の研究開発に従事。ハイパフォーマンス・コンピューティングや文書処理に興味を持つ。著書に「楽々 L^AT_EX」(共立出版) 等がある。工学博士。エッセイスト。SIAM, 日本応用数理学会会員。