Vol. 40 No. 3 情報処理学会論文誌 Mar. 1999

テクニカルノート

適応的なリスタートを用いたORTHOMIN(k)法

津野直人† 野寺 隆††

GCR法（一般共役残差法）の打ち切り版であるORTHOMIN(k)法は，大規模で疎な非対称行列を係数とする連立1次方程式 $Ax=b$ の反復解法として広く利用されている．ORTHOMIN(k)法の収束を加速するためにはリスタート技法を用いるのだが，そのタイミングを見つけるのは簡単なことではない．本稿では，ORTHOMIN(k)法の算法をリスタートするタイミングを自動的に決定する適応的なリスタート技法を提案する．

The ORTHOMIN(k) Method Using the Adaptive Restarting Procedure

NAOTO TSUNO† and TAKASHI NODERA††

The ORTHOMIN(k) method, a truncated version of the GCR (generalized conjugate residual) method, has been widely used for solving large and sparse nonsymmetric linear systems of equations $Ax=b$. In order to accelerate the convergence of the ORTHOMIN(k) method, we usually use the restarting technique. But, it is not so easy to find out the restarting timing of its algorithm. In this paper, we will propose the adaptive restarting procedure which will detect the restarting timing of the ORTHOMIN(k) method automatically.

1. はじめに

大規模で疎（sparse）な $n\times n$ の正則行列 A を係数とする連立1次方程式

$$Ax=b \tag{1}$$

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かれることが多い．係数行列が対称かつ正定値という性質を持つ場合，共役勾配法（conjugate gradient method）[3]が代表的な反復法である．一方，係数行列が非対称な行列の場合，いまだ決定的な算法が提案されていないので，現在では解くべき問題の目的に応じて，さまざまな算法が使用されている[1]．

本稿ではORTHOMIN(k)法[5]を取りあげる．ORTHOMIN(k)法は係数行列が非対称の場合に近似解を計算する算法の1つである．ORTHOMIN(k)法や他の多くの算法では，残差ノルムの収束状況が悪いときにリスタート☆を行うことが有効であるという事実が経験的に知られている[6),7]．しかしリスタートの適切なタイミングを決定することは簡単なことではない[7]．近年，疑似残差法に対するリスタートのタイミングを自動的に決定する手法が稲津・野寺[8),9]により提案され，適応的リスタート（adaptive restarting procedure）と呼ばれている．本稿ではORTHOMIN(k)法に対する適応的リスタートを提案する．

2. ORTHOMIN(k)法

ORTHOMIN(k)法はGCR法（generalized conjugate residual method）[2]から派生した算法である．**図1**にORTHOMIN(k)法とGCR法の算法を示す．

GCR法はKrylov部分空間法の1つであり，空間 $x_0+\mathcal{K}_i(A;r_0)$ の中で残差（$r_i:=b-Ax_i$）のユークリッドノルムを最小化するように近似解 x_i を計算する．空間 $\mathcal{K}_i(A;r_0)$ は

$$\mathcal{K}_i(A;r_0):=\mathrm{span}\left\{r_0,Ar_0,\ldots,A^{i-1}r_0\right\}$$

と定義され，行列 A とベクトル r_0 による第 i 次Krylov部分空間と呼ばれる．

GCR法の漸化式

$$x_{i+1}=x_i+\alpha_i p_i$$

において，探索ベクトル p_i は過去の探索ベクトル

† 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

☆ 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．

1: 初期近似解 x_0 を与える.
2: $r_0 = b - Ax_0$
3: **for** $i = 1, 2, \ldots$
  3.1: **if** $i = 1$ **then**
    3.1.1: $p_1 = r_0$
    else
    3.1.2: $\beta_j^{(i)} = -(Ar_{i-1}, Ap_j)/(Ap_j, Ap_j)$
      (for $j = \sigma, \ldots, i-1$)
    3.1.3: $p_i = r_{i-1} + \sum_{j=\sigma}^{i-1} \beta_j^{(i)} p_j$
    endif
  3.2: $\alpha_i = (r_{i-1}, Ap_i)/(Ap_i, Ap_i)$
  3.3: $x_i = x_{i-1} + \alpha_i p_i$
  3.4: $r_i = r_{i-1} - \alpha_i Ap_i$
  3.5: 収束条件を満たせば終了する.
  endfor
※ GCR法は, $\sigma = 1$ とする.
  ORTHOMIN(k)法は, $\sigma = \max\{1, i-k+1\}$
  とする.

図1 GCR法とORTHOMIN(k)法
Fig. 1 The GCR and ORTHOMIN(k) method.

1: 初期近似解 x_0 とパラメータ θ を与え
  RestartFlag = **on** とする.
2: $r_0 = b - Ax_0$
3: **for** $i = 1, 2, \ldots$
  3.1: 図1と同様に p_i と α_i を計算する.
  3.2: $x_i = x_{i-1} + \alpha_i p_i$
  3.3: $r_i = r_{i-1} - \alpha_i Ap_i$
  3.4: 収束条件を満たせば終了する.
  3.5: **if** $\|\alpha_i Ap_i\|/\|r_{i-1}\| \geq \cos\theta$ **then**
    3.5.1: **RestartFlag** = **on**
    else
    3.5.2: **if** $i = k$ **and**
      RestartFlag = **on then**
      3.5.2.1: **RestartFlag** = **off**
      3.5.2.2: リスタートする.
      endif
    endelse
  endfor
※リスタート後はステップ1を省略する.
  なお, k は記憶する探索ベクトルの本数である.

図2 AR-ORTHOMIN(k)法
Fig. 2 The AR-ORTHOMIN(k) method.

p_j $(j < i)$ と

$$p_i^T A^T A p_j = 0$$

の関係がある. この A^TA-直交性が, GCR法の特徴である残差ノルム最小化の原理である.

GCR法をそのまま実行すると, 新しい探索ベクトルを過去のすべての探索ベクトルと A^TA-直交させる必要がある. したがって, 大規模な問題を解くとき計算時間と記憶容量が膨大になり, GCR法の実行は事実上不可能となる. これに対し, ORTHOMIN(k)法は探索ベクトルの A^TA-直交関係を最新の k 本に制限する. この制限で計算時間と記憶容量をおさえることにより, ORTHOMIN(k)法は現実的に実行可能な算法となる. 一方, 探索ベクトル間の A^TA-直交関係が不完全なため, 残差ノルムの局所的な最小化は行われるが探索空間全体における最小化ではなくなる. したがって, 残差ノルムの収束が遅くなったり停滞したりする可能性が生じる.

3. 適応的リスタート

本章で提案する適応的なリスタートはパラメータを利用して収束状況を判断し, リスタートのタイミングを自動的に決定するものである.

3.1 収束状況の判断

残差ベクトルを更新する漸化式

$$r_i = r_{i-1} - \alpha_i Ap_i$$

において, スカラ α_i に $\|Ap_i\|/\|r_{i-1}\|$ を乗じた

$$\psi_i = \alpha_i \times \frac{\|Ap_i\|}{\|r_{i-1}\|} = \left(\frac{r_{i-1}}{\|r_{i-1}\|}, \frac{Ap_i}{\|Ap_i\|}\right)$$

は次のように考えることができる. 収束状況が悪い, すなわち残差ノルムの減少が小さい状況では残差 r_{i-1} と残差用の探索ベクトル Ap_i がまったく違った方向を向いている. このとき $|\psi_i|$ は小さくなる. 逆に $|\psi_i|$ が大きいとき残差 r_{i-1} と残差用の探索ベクトル Ap_i がなす角は小さく, 残差ノルムの減少が期待できる. このように $|\psi_i|$ の大小でORTHOMIN(k)法の収束状況を判断できる.

3.2 リスタートのタイミング

リスタートで収束状況を改善できるかどうかは係数行列とその時点で得られている近似解に依存する. リスタートに期待することはリスタート後に収束状況が改善されることである. 一方リスタートを行ったにもかかわらず収束状況が改善されない場合, 探索ベクトルの直交性が失われるため収束状況はより悪くなる. 本稿で提案する手法はこの点も考慮し以下のルールでリスタートを行う.

(1) 収束状況を判断するためのパラメータ θ $(0° \leq \theta \leq 90°)$ を与える.

(2) 次の条件がすべて成立するときリスタートを行う.
  (a) k 本の探索ベクトルを記憶していること
  (b) $|\psi_i| < \cos\theta$ が成り立つこと
  (c) 2回目以降のリスタートでは, 前回のリスタート後に収束状況が改善されていること

(3) リスタート後に $|\psi_i| \geq \cos\theta$ が成立した時点で, 収束状況が改善されたと判断する.

以上のような適応的リスタートを行うORTHOMIN(k)法をAR-ORTHOMIN(k)法と呼び, **図2**にその算法を示す.

収束状況を判断する $|\psi_i|$ はベクトル r_{i-1} と Ap_i の角度で決定される. そこでパラメータ θ を角度で与えるようにしている. また(3)でリスタートの有効性を判断し, (2-c)で収束状況を改善しないと思われ

表1 数値実験の結果
Table 1 The numerical results.

反復回数

算法	αh の値								
	2^{-3}	2^{-2}	2^{-1}	2^{0}	2^{1}	2^{2}	2^{3}	2^{4}	2^{5}
ORTHOMIN(10)	1511	642	544	558	579	662	841	1065	2155
ORTHOMIN(20)	875	748	701	738	708	729	818	845	1154
ORTHOMIN(30)	789	914	989	818	900	877	859	828	940
AR-ORTHOMIN(10)	820	628	534	557	541	534	583	581	747
AR-ORTHOMIN(20)	735	709	709	637	602	655	680	615	742
AR-ORTHOMIN(30)	837	639	668	680	921	688	715	811	830

実行時間（秒）

算法	αh の値								
	2^{-3}	2^{-2}	2^{-1}	2^{0}	2^{1}	2^{2}	2^{3}	2^{4}	2^{5}
ORTHOMIN(10)	20.07	8.61	7.04	7.46	7.73	8.54	11.64	14.06	28.79
ORTHOMIN(20)	19.89	17.25	16.24	16.51	16.08	16.68	18.59	19.86	26.90
ORTHOMIN(30)	25.56	30.81	32.85	27.63	29.86	29.45	28.33	27.02	31.09
AR-ORTHOMIN(10)	10.12	7.73	6.79	7.04	6.42	6.72	7.17	6.59	8.89
AR-ORTHOMIN(20)	15.83	13.98	14.45	13.31	12.59	13.71	13.73	13.39	15.11
AR-ORTHOMIN(30)	23.39	17.79	18.89	20.75	23.59	20.19	20.12	21.45	22.94

リスタート回数

算法	αh の値								
	2^{-3}	2^{-2}	2^{-1}	2^{0}	2^{1}	2^{2}	2^{3}	2^{4}	2^{5}
AR-ORTHOMIN(10)	17	13	9	5	9	8	8	12	19
AR-ORTHOMIN(20)	10	14	12	6	6	9	10	6	11
AR-ORTHOMIN(30)	11	9	8	5	16	6	8	13	10

るリスタートを取り除いている．

4. 数 値 例

ORTHOMIN(k) 法と AR-ORTHOMIN(k) 法の収束を比較する．本章の数値例では行列とベクトルの乗算など算法の演算レベルで並列計算を行った．実験の条件を以下に示す．

- 収束条件：$\|r_k\|/\|r_0\| < 1.0 \times 10^{-12}$
- 初期近似解：$x_0 = [0\ 0\ \ldots\ 0]^T$
- 計算機：分散メモリ型並列計算機 AP3000
- プロセッサ：UltraSPARC（200 MHz）×8 台
- 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：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]．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 128×128 のメッシュで離散化し連立 1 次方程式 (1) を作る．このときのメッシュ幅を h で表す．αh の値を変化させ，対角スケーリングによって係数行列の対角要素を 1 とし，ORTHOMIN(k) 法と AR-ORTHOMIN(k) 法で解くことにする．

始めに，AR-ORTHOMIN(k) 法のパラメータ θ を決定する．$\alpha h = 2^0$ の場合に θ の値を 0° から 90° まで 5° 刻みに変化させて実験を行った．AR-ORTHOMIN(20) 法が収束条件を満たすまでの反復回数を **図 3** に示す．この場合に最も反復回数が少なくなった θ=80° をパラメータとして用いることにする．

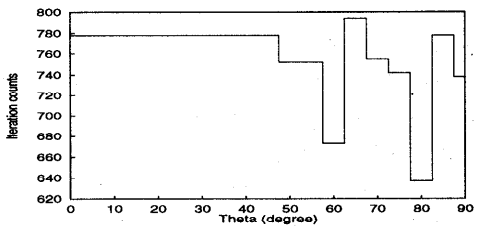
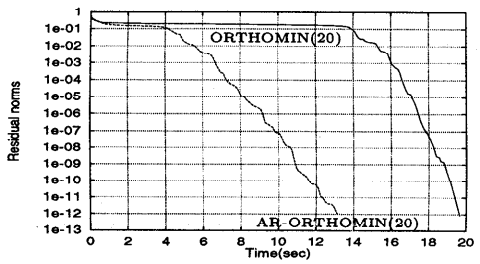


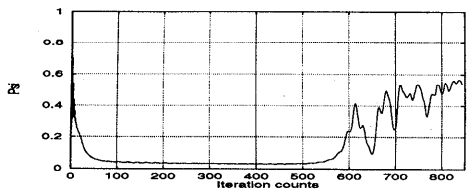
図 3 $\alpha h = 2^0$ における AR-ORTHOMIN(20) 法の反復回数と θ の関係
Fig. 3 The relation between iteration counts and θ of the AR-ORTHOMIN(20) method for $\alpha h = 2^0$.

表 1 に ORTHOMIN(k) 法と AR-ORTHOMIN(k) 法が収束条件を満たすまでの反復回数と実行時間および AR-ORTHOMIN(k) 法のリスタート回数を示す．AR-ORTHOMIN(k) 法の計算時間は，時間計測の誤差が含まれることを考えても多くの場合で実行時間が短くなっている．また $\alpha h = 2^1$ のとき，AR-ORTHOMIN(30) 法は ORTHOMIN(30) 法より反復回数が劣っているのに計算時間では優れている．これは，リスタート直後の反復では A^TA-直交化を行う探索ベクトルの本数が通常の反復時よりも少なく，反復 1 回あたりの計算時間が短くなるためである．したがって，ORTHOMIN(k) 法と AR-ORTHOMIN(k) 法の反復回数が同程度の場合でも，計算時間では AR-ORTHOMIN(k) 法の方が優れた結果を出すのである．

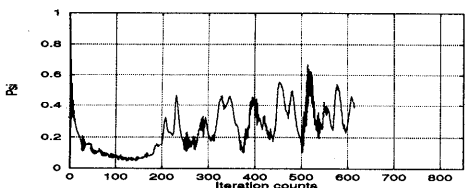
図 4 に ORTHOMIN(k) 法と AR-ORTHOMIN(k) 法の残差ノルムが収束する様子と，AR-ORTHOMIN(k) 法で収束状況を判断するのに用いたスカラ ψ_i の様子を示す．αh および k が他の値の場合も同様の収束が観察された．全体的な傾向としては，ORTHOMIN(k) 法で残差ノルムの減少の少ない時期が長く続くほ



(a) 計算時間 vs. 相対残差ノルム



(b) ORTHOMIN(20) 法の ψ_i



(c) AR-ORTHOMIN(20) 法の ψ_i

図4 $\alpha h = 2^4$ における収束の様子と ψ_i の振舞い
Fig. 4 The behaviour of convergence and ψ_i for $\alpha h = 2^4$.

ど，AR-ORTHOMIN(k) 法が優れた結果を出した．

パラメータ θ の値は $\alpha h = 2^0$ に対する AR-ORTHOMIN(20) 法の結果を基に決定し，αh および k が他の値の場合も θ として同じ値を用いた．したがって，αh および k が他の値の場合には θ が効果的な値ではない可能性がある．しかし，これらの場合もリスタートは有効に作用した．θ の値は係数行列に対してある程度の柔軟性を持つと考えられる．

5. まとめ

本稿ではORTHOMIN(k) 法の収束をリスタートを用いて改善することを考えた．リスタートによる収束の改善を考えるとき重要なことは，いつリスタートを行うかというタイミングの問題である．従来は収束状況を経験的に判断し，収束状況が悪くなったときにリスタートを行うというのが一般的であった．これに対し本稿では算法中のスカラを基にしてORTHOMIN(k) 法の収束状況を判断することを考案した．さらに，「収束を改善しないリスタートは行わない」というルールを加えてAR-ORTHOMIN(k) 法とした．

ORTHOMIN(k) 法とAR-ORTHOMIN(k) 法の収束の比較は分散メモリ型並列計算機AP3000を用いて行った．ORTHOMIN(k) 法で残差ノルムの減少の少ない時期が長く続くほど，AR-ORTHOMIN(k) 法はORTHOMIN(k) 法より短い実行時間で収束条件を満たした．

本稿で提案したAR-ORTHOMIN(k) 法は適応的にリスタートを行う算法である．本稿で示した数値例では，最悪の場合でもORTHOMIN(k) 法と同程度の性能を保ちつつ，問題によってはORTHOMIN(k) 法よりも高速に収束するという結果が得られた．

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) Eisenstat, S., Elman, H. and Schultz, M.: Variational Iterative Methods for Nonsymmetric Systems of Linear Equations, *SIAM J. Numer. Anal.*, Vol.20, No.2, pp.345–357 (1983).
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) Vinsome, P.: ORTHOMIN, An Iterative Method for Solving Sparse Sets of Simulataneous Linear Equations, *Proc. 4th Symposium on Reservoir Simulation*, Society of Petroleum Engineering of AIME, pp.149–159 (1976).
6) 戸川隼人：共役勾配法，教育出版 (1977).
7) 野寺 隆，稲津隆敏：リスタートによる疑似残差法の収束性の加速，情報処理学会論文誌，Vol.37, No.6, pp.1237–1240 (1996).
8) 稲津隆敏，野寺 隆：適応的なリスタートを用いた疑似残差法，情報処理学会論文誌，Vol.37, No.9, pp.1637–1645 (1996).
9) Nodera, T. and Inadu, T.: A note on Adaptive Restarting Procedure for Pseudo Residual Algorithms, *Proc. Workshop on Scientific Computing*, Golub G.H., et al. (Eds), pp.265–272, Springer-Verlarg (1997).
10) Nodera, T. and Tsuno, N.: The Adaptive Restarted Procedure for ORTHOMIN(k) Algorithm, *Proc. 3rd International Meeting on Vector and Parallel Processing '98*, Riberiro, L.M. and Sousa, A. (Eds), pp.507–518 (1998).

(平成10年11月16日受付)
(平成10年12月 7 日採録)