DEFLATED-GMRES(m, k) 法に関する一考察

3D−6

森屋 健太郎，野寺 隆*
慶應義塾大学 理工学部

1 はじめに

GMRES(m) 法は，非対称の大型で疎な正則行列を係数とする連立1次方程式

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

の非定常な反復解法のひとつである．近年，GMRES(m) 法に，係数行列 A の固有ベクトルによる前処理を組み込んだ DEFLATED-GMRES(m, k) 法が提案されている．しかし，精度の良い固有ベクトルを得るためにはリスタート周期を長くとらねばならず，計算量が増大してしまうのが難点である．

本発表では，通常は短いリスタート周期で計算をし，固有ベクトルが必要なときのみにリスタート周期を長くすることで，計算量を減少させる手法について提案する．

2 GMRES(m) 法

GMRES(m) 法 [1] は，アーノルディ過程から m 本の正規直交基底

$$V_m = (v_1, v_2, \ldots, v_m)$$

と $(m+1)\times m$ のヘッセンベルグ行列 $\bar{H}_m$ を生成する算法である．その近似解 x_m は，この直交基底が張る部分空間に作られるので，

$$x_m = x_0 + V_m y_m \tag{2}$$

となる．ただし，y_m は残差ノルムの最小自乗問題

$$\min_y \| b - Ax_m \| = \min_y \| \beta e_1 - \bar{H}_m y_m \|$$

($\beta = \| r_0 \|$) の解である．GMRES(m) 法は，リスタートをすることで直交化にかかる計算量と記憶領域を制限することができるが，リスタートが原因で解を構成する固有ベクトルが欠落してしまい，精度の良い近似解が求まらないことがある．

3 DEFLATED-GMRES(m, k)-法

最初の数回の各リスタート周期で，A の f ($f \le k$) 個の小さい固有値に対応する固有ベクトルを求めて，前処理行列

$$M^{-1} = I_n + U_l(|\lambda_n|T_l - I_l)U_l^* \tag{3}$$

を更新していく [3, 5]．ここで，$T_l = U_l^* A U_l$ であり，U_l は l 本の固有ベクトルによって構成される．l はリスタートの回数とともに1から k まで f ($f \le k$) ずつ増加する．また，λ_n は A の最大固有値である．A の固有ベクトルは，第2節で述べた $\bar{H}_m$ の一番下の行を取り除いたヘッセンベルグ行列 H_m を QR 分解することで求めることができる [3]．しかし，リスタート周期 m が短いと H_m の固有ベクトルが A のそれを近似することができず，精度の悪いこの固有ベクトルがかえって残差ノルムの収束に悪影響を及ぼすことがある．

4 動的に直交過程を切替える方法

次のようなパラメータを定義する．

$$\zeta_m = \frac{(r_0,\ AM^{-1}V_m y_m)}{\| r_0 \| \cdot \| AM^{-1}V_m y_m \|} \tag{4}$$

式 (4) は，前のリスタートで求まった残差とその探索ベクトルの内積を正規化したものである．残差ベクトルと探索ベクトルのなす角度 θ が大きくなるとき，残差ノルムは停滞しやすくなる [4, 7]．そのとき m を大きな値に切替えて，次元の高いヘッセンベルグ行列から求まった精度の良い固有ベクトルを前処理行列に付加することを考える．直交過程の切替え及び固有ベクトルによる前処理の構築は以下の手順による．ただし，経験的に各リスタートごとに付加する固有ベクトルは $f = 1$ として，最小固有値に対応する固有ベクトルのみを付加する [6]．

(a) $|\zeta_m| < \cos\theta$ なら，m を大きな値に切替える．
  (a.1) H_m から固有ベクトルを求める．
  (a.2) $l = k$ なら l を 0 に戻す．
  (a.3) 新しい固有ベクトルで M^{-1} を更新する．
  (a.4) l を 1 増加させる．

(b) $|\zeta_m| \ge \cos\theta$ なら，m を通常の値に戻す．

(a) と (b) では，角度 θ を使って残差ノルムの停滞を判定している．(a.2) では，付加する固有ベクトル数が最大の k 本になっても残差が停滞するときに，前処理行列が残差の収束を改善しないとみなし，前処理行列を最初から構

*Department of Mathematics, Faculty of Science and Technology, Keio University, 3-14-1 Hiyoshi Kohoku Yokohama 223, Japan.

DEFLATED-GMRES(m_s, m_l, k)

choose x_0
$r_0 = b - Ax_0$,　$\beta = \| r_0 \|$,　$v_1 = r_0/\beta$
$M = I_n$,　$U_l = \{\}$,　$l = 0$
$m = m_s$,　frag = no
until $\| r_m \| / \| r_0 \| < \epsilon$ **do**
　compute V_m from Arnoldi process for AM^{-1}
　$y_m = \min_{y \in R^m} \| \beta e_1 - \bar{H}_m y_m \|$
　$x_m = x_0 + M^{-1} V_m y_m$
　$p_m = AM^{-1} V_m y_m$
　$r_m = r_0 - p_m$
　$\zeta_m = (r_0,\ p_m) / (\| r_0 \| \cdot \| p_m \|)$
　$x_0 = x_m$,　$r_0 = r_m$,　$\beta = \| r_0 \|$,　$v_1 = r_0/\beta$
　if frag = yes **then**
　　compute eigenvector u of A from H_m
　　if $l = k$ **then**
　　　$U_l = \{\}$,　$l = 0$
　　endif
　　$U_l = \mathrm{orthog}(u,\ U_l)$,　$l = l + 1$
　　$T_l = U_l^* A U_l$
　　$M^{-1} = I_n + U_l(|\lambda_n| T_l^{-1} - I_l) U_l^*$
　endif
　if $|\zeta_m| < \cos\theta$ **then**
　　$m = m_l$,　frag = yes
　else
　　$m = m_s$,　frag = no
　endif
enddo

図 1: DEFLATED-GMRES(m_s, m_l, k) 法

築し直す処理をしている．この手法のねらいは，残差ノルムが停滞したときに，リスタート周期を増大させることと，A の精度の良い固有ベクトルを前処理行列に付加することによって，残差ノルムの収束を加速させることである．本稿では，この手法を取り入れた DEFLATED-GMRES(m, k) 法のことを DEFLATED-GMRES(m_s, m_l, k) 法と呼ぶことにする．ただし，$m_s < m_l$ である．通常は m_s 回の反復でリスタートをするが，残差が停滞したときに，精度の良い固有ベクトルを求めるために，m_l 回の反復でリスタートをする．この算法を図 1 に示す．

5 数値実験

領域 [0, 1] × [0, 1] × [0, 1] における次のような 3 次元の楕円型偏微分方程式の境界値問題を考える [2]．

$$
\begin{aligned}
a_1 u_{xx} &+ a_2 u_{yy} + a_3 u_{zz} \\
&+ R(a_4 u_x + a_5 u_y + a_6 u_z) + a_7 u = f
\end{aligned}
$$

ただし，

$$
\begin{aligned}
a_1 &= 2 + \sin(2\pi x)\cos(2\pi y)\cos(2\pi z) \\
a_2 &= 2 + \cos(2\pi x)\sin(2\pi y)\cos(2\pi z) \\
a_3 &= 2 + \cos(2\pi x)\cos(2\pi y)\sin(2\pi z) \\
a_4 &= \sin(4\pi x),\ a_5 = \sin(4\pi y),\ a_6 = \sin(4\pi z) \\
a_7 &= \sin(2\pi x)\sin(2\pi y)\sin(2\pi z)
\end{aligned}
$$

である．$R = 100.0$ とし，境界条件と右辺は厳密解が

$$u(x, y, z) = \sin(2\pi x)\cos(2\pi y)\sin(2\pi z)$$

となるように設定する．メッシュ数を $64 \times 64 \times 64$ とし，7 点中心差分でこの偏微分方程式を離散化した．パラメータ θ は 50 度に設定した．実験には，富士通 AP3000(セル UltraSPARC 300MHz 16 台) を用いた．各算法における残差ノルムと時間の関係を図 2 に示した．

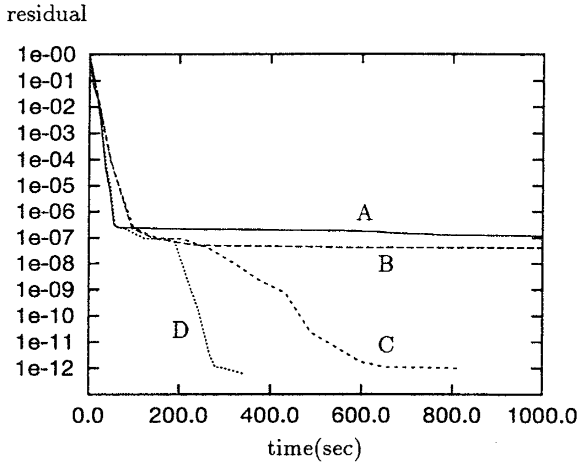

図 2: 各算法における残差の収束履歴, A: GMRES(20), B: GMRES(50), C: DEFLATED-GMRES(50,4), D: DEFLATED-GMRES(20,50,4).

6 おわりに

本稿では，DEFLATED-GMRES(m, k) 法において，通常はリスタート周期を短くとり，固有ベクトルが必要なときのみにリスタート周期を長くする手法を提案した．数値実験のさらなる詳細などは発表当日に報告する．

参考文献

[1] Saad, Y. and Schultz, M. K.: A Generalized Minimal Residual Algorithm for Solving Nonsymmetric Linear Systems, *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, No. 7, pp. 856–869, (1986).

[2] Schönauer, W.: Scientific Computing on Vector Computers, North Holland (1987).

[3] Erhel, J, Burrage, K. and Pohl, B.: Restarted GMRES Preconditioned by Deflation, *J. Comput. Appl. Math.*, No. 69, pp. 303–318, (1996).

[4] 津野 直人, 森屋 健太郎, 野寺 隆: ORTHOMIN(k) 法に対する適応的なリスタート, 情処研報, Vol. 97, No. 75, pp. 7–12, (1997).

[5] Burrage, K. and Erhel, J.: On the Performance of Various Adaptive Preconditioned GMRES Strategies, *Numer. Linear Algebra Appl.*, No. 5, pp. 101–121, (1998).

[6] 森屋 健太郎, 野寺 隆: デフレーションを前処理とする GMRES(m) 法, 京都大学数理解析研究所 講究録, to appear, (1999).

[7] 津野 直人, 野寺 隆: 適応的なリスタートを用いた ORTHOMIN(k) 法, 情報処理学会論文誌, to appear, (1999).