6H05

リスタート周期を動的に変える GMRES(k) 法について

羽部 充　　野寺 隆

慶應義塾大学理工学部

1 要旨

GMRES(k) 法のリスタート周期を動的に変化させる方法の一つに Sosonkina ら [6] によって提案された Adaptive GMRES(k) 法があるが，リスタート周期を増やす処置しかないために問題によっては計算時間が必要以上にかかり適当でない．そこで Adaptive GMRES(k) 法に減らす過程を加えた算法を提案する．

2 はじめに

GMRES 法は，大型で疎な係数行列をもつ連立 1 次方程式:

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

の解法の一つである．ただし，行列 A は $n \times n$ の正則行列とする．このような連立 1 次方程式は，偏微分方程式の境界値問題を有限要素法や有限差分法で離散化する場合に得られることが多い．GMRES 法は反復法の中では非定常反復法に分類され，CG 法 [2] や BiCG 法，BiCGStab(l) 法などと比較すると，反復が進むに従って，多くの計算量や記憶容量を必要とする．しかし，GMRES 法は BiCG 法系の算法と比較すると，各反復において残差ノルムを減少させるという良い性質を持っているので，現在では科学技術計算の分野において広く使われている．通常，GMRES 法は適当な k の値で算法の再出発を行ない計算量を減少させる GMRES(k) 法を用いることが多い．

3 GMRES 法

1986 年に Saad ら [3] によって提案された GMRES 法は，各反復においてクリロフ部分空間：

$$\mathcal{K}_i(A, v) = \mathrm{span}\{v, Av, A^2v, \ldots, A^{i-1}v\}$$

での正規直交系を生成し，その空間上で残差ベクトルのノルムを最小化する算法である．また，i 回目の反復における残差ベクトルのノルムは，次の式で与えられる．

$$\min_{z \in K_i} \|b - A(x_0 + z)\| = \min_{z \in K_i} \|r_0 - Az\| \tag{2}$$

ただし，式 (1) は，アーノルディ過程から得られた K_i の正規直交系 $\{v_1, v_2, \cdots, v_i\} = V_i$ によって $z = V_i y$ と表すことができる．また，V_i はユニタリ行列であるため，この問題は次の最小 2 乗問題に帰着できる．

$$\begin{aligned} J(y) &= \|\beta v_1 - AV_i y\| \\ &= \|V_{i+1}(\beta e_1 - \bar{H}_i y)\| \\ &= \|\beta e_1 - \bar{H}_i y\| \end{aligned} \tag{3}$$

ただし，$\beta = \|r_0\|$ である．さらに，式 (2) の上ヘッセンベルグ行列 $\bar{H}_i$ を QR 分解することによって，残差ベクトルのノルムを容易に求めることができ，その近似解 x_i は $x_i = x_0 + V_i y_k$ で得られることになる．反復回数が増えるにつれ，記憶容量と計算量が増加していくので実際には，k 回の反復ごとにその時点での近似解 x_k を初期近似解 x_0 として再出発する GMRES(k) 法が使われている．

4 Adaptive GMRES(k) 法

1998 年に Sosonkina ら [6] によって提案された Adaptive GMRES(k) 法（以下 A-GMRES(k) 法と呼ぶ）は，収束の具合に応じてリスタート周期を増やしていく方法である．A-GMRES(k) 法は，通常用いられる GMRES(k) 法に次のような処理を行なって収束を向上させる手法である．すなわち，残差ベクトルのノルムの収束の様子が最大反復回数に対して小さい割合の時，収束を早めるた

めにリスタート周期の値を増やす．収束までのおおよその反復回数を ℓ とすると，次式によってそれを見積もることができる．

$$\ell = k \times \frac{\log\left[tol/\|r^{new}\|\right]}{\log\left[\|r^{new}\|/(1.0+10\mathbf{u})\|r^{old}\|\right]} \qquad (4)$$

ただし，r^{new}はその時点での残差ベクトルであり，r^{old}は一つ前のリスタート時の残差ベクトルである．さらに，tol は収束条件，$\mathbf{u}$ は計算機イプシロンの値である．$10\mathbf{u}$ は停滞によって残差ベクトルのノルムの収束がごくわずかで，計算精度によっては全く変化がなかったとみなされる場合に分母が 0 になるのを防ぐための処置である．式 (3) は，反復回数に対する残差ノルムのグラフから，1 回のリスタート間における，反復回数と残差ベクトルのノルムの減少の比をとることで得られることになる．

もし，式 (3) の値が大きく，最大反復回数までに収束できないと判断した場合，A-GMRES(k) 法は残差ベクトルのノルムの減少が十分になるまでリスタート周期を増やしていく．これによりある程度問題に応じたリスタート周期をとることができる．

A-GMRES(k) 法はリスタート周期を増やすだけである．ただし，リスタート周期が大きい程 1 回の反復にかかる計算時間は増加する．たとえば，一旦リスタート周期を増加させた後，式 (3) による見積もりが極端に小さくなった場合には，小さいリスタート周期でも十分収束できる可能性があり，それによって計算時間も短縮できる．しかし，A-GMRES(k) 法はそれに対応できず，リスタート周期を増やしたままで反復し続けなければならない．そこで，もしリスタート周期を減らすことができるなら，残差ベクトルのノルムが収束するまでの計算時間を短縮できる可能性がある．次に，リスタート周期を減少させる手法について考えることにする．

5 リスタート周期を減らす方法

リスタート周期を動的に増減させる方法として，各反復において式 (3) の値を参照する方法を提案する．すなわち，式 (3) によって見積もられた収束までのおおよその反復回数を反復ごとに参照し，最大反復回数までに十分収束できると判断した場合にリスタートする方法である．この方法ではリスタート周期が決まっていなく，リスタートする度にその周期が，残差ベクトルのノルムの収束の様子に適合するように選ぶことができる．よって，その局所によって適当なリスタート周期を選べる可能性がある．

6 おわりに

大型で疎な行列 A を係数行列として持つ連立 1 次方程式の反復解法として GMRES(k) 法のリスタート周期を動的に変化させる算法について考察した．大会当日，Sosonkina ら [6] の提案した算法の改良版を提案し，その数値実験とともに算法の有効性について比較検討する．

参考文献

[1] Lanczos, C.: Solution of systems of linear equations by minimize iteration, *J. Res. Nat. Bur. Standard*, Vol. 49, pp. 33–53 (1952).

[2] Hestenes, M. R. and Stiefel, E.: Methods of conjugate gradients for solving linear systems, *J. Res. Nat. Bur. Standards*, Vol. 49, pp. 409–435 (1952).

[3] Saad, Y. and Schultz, M. H. GMRES: A generalized minimal residual algorethm for solving nonsymmetric linear systems. *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, Vol. 7, pp. 856–869, (1986).

[4] Joubert, W.: On the Convergence behavior of the Restarted GMRES algorithm for solving nonsymmetric linear systems, *Numer. Linear Algebra Appl.*, Vol. 1, No. 5, pp. 427–447 (1994).

[5] Weiss, R.: Parameter-free iterative linear solvers, Akademie Verlag (1986).

[6] Sosonkina, M., Watson, L. N., Kapania, R. K. and Walker, H. F.: A new adaptive GMRES algorethm for high accuracy, *Numer. Liner Algebra Appl.*, Vol. 5, pp. 275–297 (1998).