

Ritz 値を考慮した GMRES(m) 法の適応的なリスタート

張 臨 傑[†] 野 寺 隆^{††}

GMRES(m) 法は、大型で疎な非対称行列を係数として持つ連立 1 次方程式を解くためのクリロフ部分空間法の 1 つである。GMRES(m) 法において、Ritz 値と調和 Ritz 値は低コストで求められ、その収束はこれら 2 つの値から評価できる。本稿では、Ritz 値と調和 Ritz 値を利用して GMRES(m) 法の適応的なリスタート手法を提案する。数値実験の結果から、古典的な GMRES(m) 法と比較して本稿で提案する手法の有効性を示す。

An Adaptive Restart of GMRES(m) Method by Using Ritz Values

LINJIE ZHANG[†] and TAKASHI NODERA^{††}

GMRES(m) method is one of the Krylov subspace methods for solving large sparse and non-symmetric linear systems. Ritz values and Harmonic Ritz values can be computed cheaply within the GMRES iterations. Also, we can use the difference between the Ritz values and the Harmonic Ritz values to evaluate the convergence of the GMRES method. In this paper, we propose an adaptive method of restarting GMRES(m) process by using Ritz values and harmonic Ritz values. Numerical experiments are given for showing better performance of the proposed method in comparison to the classical GMRES(m) method.

1. はじめに

理工学における様々な現象を記述した楕円型偏微分方程式の境界値問題などを有限要素法や有限差分法によって離散化すると、大型で疎な行列を係数に持つ連立 1 次方程式：

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

が得られる。式 (1) の係数行列 A が非対称な正則行列である場合には、GMRES 法が有効な算法の 1 つである。しかし通常は、計算量や記憶容量などの面からリスタート版の GMRES(m) 法が用いられることが多い。GMRES(m) 法は m 回反復したところで初期近似解と残差ベクトルを更新するリスタート版の GMRES 法である。通常、GMRES(m) 法のリスタート周期 m は、ユーザの経験に基づいて決められるものである。リスタート周期 m を決定するいくつかの手法³⁾ が提案されていないわけではないが、現在のところ m を決定する最適な方法はまだ提案されていない。

Ritz 値と調和 Ritz 値は係数行列 A の近似固有値である。また、Ritz ベクトルと調和 Ritz ベクトルは、係数行列 A の近似固有ベクトルである。近年、係数行列の近似固有値、近似固有ベクトルを利用して、GMRES 法の収束を改善する様々な算法が提案されている。たとえば、MORGAN(m, k) 法⁸⁾、DEFLATED-GMRES(m, k) 法⁴⁾ などがある。MORGAN(m, k) 法は、リスタートする際に、既存のクリロフ部分空間から絶対値の小さい k 個の近似固有値に対応する近似固有ベクトルを基底ベクトルとして、次のクリロフ部分空間に追加する算法である。この算法は 1995 年に、Morgan⁸⁾ により提案された。その後、Morgan⁹⁾ はこの算法の実装を改良し、調和 Ritz 値を使う算法を提案している。また、DEFLATED-GMRES(m, k) 法は、リスタートする際に、 k 個の Ritz ベクトルを求め、前処理を行う算法である。ただし、これらの算法は、リスタート周期 m とパラメータ k を指定する必要がある。

本稿では、上記算法と違って、Ritz 値と調和 Ritz 値を使って、リスタート周期 m を動的に変える算法を提案する。すなわち、GMRES(m) 法のリスタートするタイミングを Ritz 値と調和 Ritz 値を使って決めることである。この算法を使うと、古典的な GMRES(m) 法と比べて、リスタート周期 m を設定するユーザの

[†] 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

負担を軽減し、不必要な直交化処理を削減することで収束に必要な計算時間を短縮することが期待できる。

まず、2章では GMRES 法について簡単に述べる。3章で Ritz 値と調和 Ritz 値と GMRES 法の収束との関係について述べる。4章では、Ritz 値を考慮した GMRES(m) 法の適応的なリスタート手法を提案する。さらに、5章では数値実験について述べ、このリスタート手法の有効性を示す。最後に6章において、結論を述べる。

2. GMRES 法

式 (1) を解くための反復法の 1 つとして、また固有値問題の解法として、クリロフ部分空間法はよく使われる算法である。GMRES 法はそのような解法の 1 つである。クリロフ部分空間は、与えられた行列 $A \in \mathbf{R}^{n \times n}$ とベクトル $r_0 \in \mathbf{R}^n$ に対して、次のように定義したものである。

$$\mathcal{K}_m(A, r_0) = \text{span}\{r_0, Ar_0, \dots, A^{(m-1)}r_0\},$$

$$m = 1, 2, \dots, n. \tag{2}$$

GMRES 法は残差ノルムを最小にするように、このクリロフ部分空間から近似解を求める算法である。近似解はクリロフ部分空間の直交基底によって構成される。通常、このクリロフ部分空間の正規直交基底は、図 1 に示すような Arnoldi¹⁾ 法により生成される。

生成したベクトル列 (v_1, v_2, \dots, v_m) は、クリロフ部分空間 $\mathcal{K}_m(A, r_0)$ の正規直交基底である。また、この正規直交基底 $\{v_1, v_2, \dots, v_m\}$ は、Arnoldi の正規直交基底とも呼ばれている。ここで、スカラー $h_{i,j} \equiv H_m(i, j)$ とすると、 $H_m \in \mathbf{R}^{m \times m}$ は、上ヘッセンベルグ行列となる。行列 $V_m = (v_1, v_2, \dots, v_m) \in \mathbf{R}^{n \times m}$ の列ベクトルは、クリロフ部分空間 $\mathcal{K}_m(A, r_0)$ の正規直交基底なので、行列 V_m は正規直交行列である。行列 H_m と行列 V_m は、次の関係を満たす。

$$AV_m = V_m H_m + h_{m+1,m} v_{m+1} e_m^H,$$

$$= V_{m+1} \bar{H}_m. \tag{3}$$

```

1: Start with A and r_0
2: v_1 = r_0 / ||r_0||
3: for j = 1, 2, ..., m
4:   v_bar = A v_j
5:   for i = 1, 2, ..., j
6:     h_{i,j} = v_i^H v_bar
7:   v_bar = v_bar - h_{i,j} v_i
8:   end for
9:   h_{j+1,j} = ||v_bar||_2
10:  v_{j+1} = v_bar / h_{j+1,j}
11: end for
    
```

図 1 Arnoldi 法
Fig. 1 Arnoldi method.

ただし、 $\bar{H}_m \in \mathbf{R}^{(m+1) \times m}$ は、上ヘッセンベルグ行列 H_m の最後の 1 行の下に、行ベクトル $(0 \dots 0 h_{m+1,m})$ を加えた行列である。 $e_m \in \mathbf{R}^n$ は m 番目の要素が 1 の単位ベクトルである。式 (3) の両端に V_m を掛けると

$$H_m = V_m^H A V_m \tag{4}$$

となる。上ヘッセンベルグ行列 H_m と \bar{H}_m は、3章で述べる Ritz 値と調和 Ritz 値を求めるために使われる。

クリロフ部分空間 $\mathcal{K}_m(A, r_0)$ から、求める GMRES 法の近似解は

$$x_m = x_0 + V_m y_m, \tag{5}$$

$$y_m = \min_{y \in \mathcal{K}_m} \|\beta e_1 - \bar{H}_m y\|_2, \beta = \|r_0\|_2$$

となる。ただし、 x_0 は初期ベクトル、 $e_1 \in \mathbf{R}^n$ は 1 番目の要素が 1 の単位ベクトルである。このときの残差ノルムは

$$\|r_m\|_2 = \|b - Ax_m\|_2 = h_{m+1,m} |e_m^T y_m| \tag{6}$$

となる。なお、これら GMRES の詳細に関しては、Saad ら¹⁰⁾ を参照してほしい。

GMRES 法は、理論的にたかだか n 回の反復で解を求めることが可能である。しかし、GMRES 法は非対称行列を扱うため、CG 法のように簡単な 3 項漸化式で書き表すことができない。また、反復回数が増えるたびに、ベクトル列 (v_1, v_2, \dots, v_m) と上ヘッセンベルグ行列 \bar{H}_m を保存しておく必要がある。このことは、計算量および記憶容量の点から実用的であるとはいえない。そこで、直交ベクトルの本数を m ($\ll n$) 本に制限し、そのときの近似解を新たな初期近似解として、リスタート(再出発)する GMRES(m) 法がよく使われる。通常、 m はリスタート周期と呼ばれる。本稿では、このようなリスタート周期 m を固定する GMRES(m) 法を古典的な GMRES(m) 法と呼ぶことにする。一般に、GMRES(m) 法のリスタート周期 m は、ユーザの経験によって決められている。近年、リスタート周期 m を動的に変化させる手法も提案されているが³⁾、現在のところリスタート周期を決定する最適な方法はまだ見つかっていない。

3. GMRES 法と Ritz 値の関係について

3.1 Ritz 値

定義 1 (Sleijpen ら¹²⁾): 線形部分空間 $\mathcal{W} \subset \mathbf{C}^n$ に対して

$$x \in \mathcal{W}, \quad x \neq 0, \quad (Ax - \mu x) \perp \mathcal{W} \tag{7}$$

を満たすベクトル x を行列 A の部分空間 \mathcal{W} に対する Ritz ベクトルと呼び、スカラー μ を Ritz ベクトル

ル x に対する Ritz 値とする .

この定義に従って, 係数行列 A のクリロフ部分空間 $\mathcal{K}_m(A, r_0)$ に対する Ritz 値 μ と Ritz ベクトル x を求めることを考える .

$$(Ax - \mu x) \perp \mathcal{K}_m(A, r_0) \quad (8)$$

$$\Leftrightarrow V_m^H (AV_m y_m - \mu V_m y_m) = 0.$$

ただし,

$$x = V_m y_m, \quad x \in \mathcal{K}_m(A, r_0), \quad y_m \in \mathcal{R}^m.$$

ここで, V_m は式 (3) の V_m と一致する . 式 (8) に式 (4) を代入すると

$$H_m y_m = \mu y_m \quad (9)$$

となる . したがって, クリロフ部分空間 $\mathcal{K}_m(A, r_0)$ から選んだ Ritz ベクトル $x = V_m y$ に対応する Ritz 値は行列 H_m の固有値である . ベクトル y_m は行列 H_m の固有ベクトルである . つまり, 次元の小さい行列 H_m の固有値問題を解くことによって, 行列 A の Ritz 値 μ と Ritz ベクトル $V_m y$ は得られることになる . 本稿では, Ritz ベクトルを使わないので Ritz 値だけを計算すればよい .

3.2 調和 Ritz 値

定義 2 (Sleijpen ら¹²⁾): 線形部分空間 $\mathcal{W} \subset C^n$ に対して

$$x \in \mathcal{W}, \quad x \neq 0, \quad (A^{-1}x - \mu x) \perp \mathcal{W} \quad (10)$$

を満たすベクトル x を行列 A の部分空間 \mathcal{W} に対する調和 Ritz ベクトルと呼び, スカラー $\bar{\mu} = 1/\mu$ を調和 Ritz ベクトル x に対する調和 Ritz 値とする .

本稿では, 調和 Ritz 値だけを使うので, 調和 Ritz 値の計算についてのみ考える . 調和 Ritz 値を求める際に, A^{-1} の計算を避けるために, 下記の定理を使用する .

定理 1 (Sleijpen ら¹²⁾): v_1, \dots, v_m を m 次元の部分空間 \mathcal{V}_m の正規直交基底とする . スカラー $\bar{\mu}$ は行列 A の部分空間 $\mathcal{W}_m = AV_m$ に対する調和 Ritz 値であることは

$$Ax - \bar{\mu}x \perp AV_m, \quad x \in \mathcal{V}_m, \quad x \neq 0 \quad (11)$$

が成立することと同値である .

なお, この定理の証明は, Sleijpen ら¹²⁾ を参照してほしい . 本稿では, この定理に基づいて部分空間 $\mathcal{AK}_m(A, r_0)$ に対する A の調和 Ritz 値を計算する . まずクリロフ部分空間 $\mathcal{K}_m(A, r_0)$ から, ベクトル $x = V_m y_m$ を選んで, 式 (11) に代入すると

$$(Ax - \bar{\mu}x) \perp \mathcal{AK}_m(A, r_0)$$

$$\Leftrightarrow (AV_m)^H (AV_m y_m - \bar{\mu}V_m y_m) = 0$$

となる . 次に, 式 (3) を利用すると

$$\bar{H}_m^H \bar{H}_m y_m = \bar{\mu} H_m^H y_m \quad (12)$$

となる . さらに, 式 (12) の両端に H_m^{-H} を掛けると,

次式を得る .

$$H_m^{-H} \bar{H}_m^H \bar{H}_m y_m = \bar{\mu} y_m. \quad (13)$$

ここで, $H_m^{-H} \bar{H}_m^H \bar{H}_m$ を整理すると,

$$H_m^{-H} \bar{H}_m^H \bar{H}_m = H_m + h_{m+1,m}^2 f_m e_m^H \quad (14)$$

となる . ただし, $f_m = H_m^{-H} e_m$ である . ゆえに, 行列 $H_m + h_{m+1,m}^2 f_m e_m^H$ の固有値は, 行列 A の空間 $\mathcal{AK}_m(A, r_0)$ に対する調和 Ritz 値であることが分かる . よって, f_m を計算するためには, H_m^{-H} を計算する必要がある . しかし, この計算コストは A^{-1} の計算コストよりはるかに低いので, 本稿ではこれを利用することにする .

3.3 GMRES 法の収束と Ritz 値

3.1 節と 3.2 節において, Ritz 値は H_m の固有値であることと, 調和 Ritz 値は $H_m + h_{m+1,m}^2 f_m e_m^H$ の固有値であることを示した . 不変なクリロフ部分空間が得られた場合には, つまり新しく加えたベクトルが既存のクリロフ部分空間の直交基底の線形結合である場合には, Arnoldi の算法 (図 1 を参照) から $h_{m+1,m} = 0$ は明らかとなる . すなわち, Ritz 値は調和 Ritz 値に一致する . そうでない場合には, f_m の評価を考えればよいことになる . 今, f には, $f_m = H_m^{-H} e_m$ という関係があり, この両辺の 2-ノルムをとると, 次式が成立することになる .

$$\|f_m\|_2 = \|H_m^{-H} e_m\|_2,$$

$$\leq \|H_m^{-H}\|_2 \|e_m\|_2 = 1/\sigma_{\min}(H_m).$$

ただし, $\sigma_{\min}(H_m)$ は H_m の最小な特異値である . よって, 式 (14) の 2 番目の要素の 2-ノルムの上界は, 次式のようになる (Goossens ら⁵⁾ を参照) .

$$\|h_{m+1,m}^2 f_m e_m^H\|_2 \leq \frac{h_{m+1,m}^2}{\sigma_{\min}(H_m)}. \quad (15)$$

すなわち, 不等式 (15) の右辺は, Ritz 値と調和 Ritz 値の差の上界である . Ritz 値と調和 Ritz 値の差が大きければ, $|h_{m+1,m}|$ の値が大きいか, または $\sigma_{\min}(H_m)$ の値が小さい . 式 (6) から, $|h_{m+1,m}|$ の値が大きければ, 残差ノルム $\|r_m\|$ の値が大きいたことが分かる . $\sigma_{\min}(H_m)$ の値が小さければ, 式 (5) の y_m の計算は丸め誤差に影響されやすいことになる . これは GMRES 法の残差ノルムが停滞する場合と一致する . すなわち, Ritz 値と調和 Ritz 値の差が大きければ, GMRES 法の残差ノルムが停滞することを意味している . よって, Ritz 値と調和 Ritz 値の差の大きさから, GMRES 法の残差ノルムの収束を評価できる . しかし, Ritz 値と調和 Ritz 値の差が大きいかどうかの判断基準を決めるのは, 非常に難しい問題である . 同様に, 不等式 (15) の右辺を使って, GMRES 法の残差ノルムの収束を評価する場合にも, 同じ問題が生じ

る．本稿では，この問題を避けるために，Ritz 値と調和 Ritz 値の差の変化に着目する．Van der Vorst¹³⁾ は，GMRES 法の収束が Ritz 値の収束と直接関連していることを理論的に証明している．Ritz 値と調和 Ritz 値は，両方とも係数行列 A の固有値の近似なので，それらの差の変化を使って GMRES 法の収束をある程度まで適切に評価できると考えられる．

これに対して，不等式 (15) の右辺は Ritz 値と調和 Ritz 値の差の上界なので，GMRES 法の残差ノルムの収束を適切に表しているとはいえない．5 章で述べる数値実験（数値例 1 の表 3）からも，この値の評価を使うことは，適切でないことが分かる．

以上の理由から，本稿では，Ritz 値と調和 Ritz 値を使って GMRES 法の収束を評価する．次の章において，上記考察に基づいた GMRES(m) 法の適応的なリスタート手法を提案し，この手法を利用したリスタート周期を動的に決定する GMRES(m) 法の実装について述べる．

4. Ritz 値による GMRES(m) 法の適応的なリスタート

3 章では，Ritz 値と調和 Ritz 値の差の変化から，GMRES 法の残差ノルムの収束を評価する方法について述べた．これに基づいて，Ritz 値と調和 Ritz 値の差からリスタートのタイミングを決定するリスタート手法を提案する．この算法では，反復するたびに，Ritz 値と調和 Ritz 値の差を計算する．もしその差が 1 つ前の反復における差より大きければ，GMRES 法の残差ノルムの収束が悪くなる傾向があると考えられる．そこで，これを避けるために，現在のクリロフ部分空間から近似解を計算し，それを初期値として，新しいクリロフ空間を生成する．つまり，リスタートを行うことになる．そうでない場合，リスタートせずに計算を続行する．このようなリスタートを行うことで，不必要な反復を削減でき，収束に必要な計算時間を短縮することが期待できる．ただし，問題によって，最大 Ritz 値と最大調和 Ritz 値の差が順調に減少してゆくと，クリロフ部分空間の次元がかなり大きくなって，リスタートしない可能性がある．記憶容量の制限から考えると，最大リスタート周期を設定する必要がある．

次に，Ritz 値と調和 Ritz 値の差を数値的に評価する方法を考える．本稿では最大 Ritz 値と最大調和 Ritz 値の差の絶対値で評価する方法について述べる．

まず，Arnoldi 過程によって上ヘッセンベルグ行列 \bar{H}_m と H_m を計算する．次に，行列 $\mathcal{H}_m = H_m + h_{m+1,m}^2 f_m e_m^H$ を計算する．ただし， $f_m = H_m^{-H} e_m$

とする．その後，行列 H_m と \mathcal{H}_m の最大固有値 μ_{\max} と $\bar{\mu}_{\max}$ を求めて，両者の差 $D_{cur} = |\mu_{\max} - \bar{\mu}_{\max}|$ を計算する．もしこの値が前の反復における差 D_{pre} より大きければ，近似解 x_m を算出し，新たな初期近似解 x_0 としてリスタートする．本稿では，Ritz 値を考慮した GMRES(m) 法を RITZ-GMRES 法として表記し，その算法を図 2 に示す．ただし， m_{\max} ($\ll n$) はユーザが設定する最大リスタート周期， i_{\max} は最大反復回数である．また，図 2 の算法の記述において，行列の下添字を省略している．

古典的な GMRES(m) 法と比べると，Ritz 値を考慮した RITZ-GMRES 法では，行列 \mathcal{H}_m を記憶するための記憶容量が必要となる．ただし，要求される記憶容量はクリロフ部分空間の次元だけに依存するので，実際にはあまり問題にならない．

演算量の面から比較すると，RITZ-GMRES 法では $f_m = H_m^{-H} e_m$ を求めなければならない．それに，行

```

1:  Choose an intial guess  $x_0$ 
2:   $i = 1$ 
3:  Start
4:   $m = 1$ 
5:  Set  $r_0 = b - Ax_0$ ,  $\beta = \|r_0\|_2$ 
6:   $v_1 = r_0/\beta$ 
7:  While  $m \leq m_{\max}$ 
8:     $\bar{v} = Av_m$ 
9:    For  $i = 1, 2, \dots, m-1$ 
10:      $\bar{H}(i, m) = v^H \bar{v}$ 
11:      $\bar{v} = \bar{v} - \bar{H}(i, m)v_i$ 
12:   End for
13:    $\bar{H}(m+1, m) = \|\bar{v}\|_2$ 
14:    $v_{m+1} = \bar{v}/\bar{H}(m+1, m)$ 
15:   Set  $H(i, j) = \bar{H}(i, j)$ ,  $i, j = 1, \dots, m$ 
16:   Compute  $f_m = H^{-H} e_m$ 
17:   Compute  $\mathcal{H} = H + h_{m+1,m}^2 f_m e_m^H$ 
18:   Compute eigenvalues  $\mu_i$  of  $H$ 
19:   Compute eigenvalues  $\bar{\mu}_i$  of  $\mathcal{H}$ 
20:   Set  $D_{cur} = |\mu_{\max} - \bar{\mu}_{\max}|$ 
21:   If  $i > i_{\max}$ 
22:      $y = \min_y \|\beta e_1 - \bar{H}y\|_2$ 
23:      $x_m = x_0 + V_m y$ ,  $r_m = b - Ax_m$ 
24:   Stop iteration
25:   If  $i > 1$ 
26:     If  $D_{cur} > D_{pre}$  or  $m = m_{\max}$ 
27:        $y = \min_y \|\beta e_1 - \bar{H}y\|_2$ 
28:        $x_m = x_0 + V_m y$ ,  $r_m = b - Ax_m$ 
29:       If  $\|r_m\|_2 < \epsilon$ 
30:         Stop iteration
31:       Set  $x_0 = x_m$ ,  $D_{pre} = D_{cur}$ 
32:       Go to start
33:     Set  $D_{pre} = D_{cur}$ 
34:      $m = m + 1$ ,  $i = i + 1$ 
35:   End while

```

図 2 RITZ-GMRES 法

Fig. 2 RITZ-GMRES method.

表 1 数値例 1 の結果 (T : 計算時間 (秒), I : 反復回数)
Table 1 Example 1: Numerical results (T: time (sec), I: iterations).

Dh	2^{-3}		2^{-4}		2^{-5}		2^{-6}		2^{-7}	
	I	T	I	T	I	T	I	T	I	T
GMRES(10)	(-5.19)	2039	(-5.35)	2035	(-5.51)	2042	(-5.44)	2041	(-4.85)	2037
GMRES(20)	(-6.35)	3090	(-6.66)	3084	(-7.60)	3091	(-7.68)	3081	(-6.50)	3083
GMRES(30)	(-8.66)	4138	(-9.63)	4133	(-9.08)	4135	(-10.11)	4126	(-8.47)	4131
GMRES(40)	(-10.52)	5189	(-11.49)	5190	18235	4741	(-11.30)	5189	(-11.09)	5185
GMRES(50)	(-11.98)	6252	(-10.06)	6243	11911	3711	14709	4592	19340	6030
RITZ-GMRES	18422	1976	12063	1505	12688	1621	13072	1832	9380	1307

(数値): 最大反復回数で収束条件を満たさなかった場合の残差ノルムの常用対数値

列 H_m と \mathcal{H}_m の固有値, つまり Ritz 値と調和 Ritz 値を求めなければならない. しかし, 先ほど述べたように, 行列 H_m と \mathcal{H}_m の次元はクリロフ部分空間の次元だけに依存する. 実際には取り扱う行列はそれほど大きなものにはならない (m_{\max} を超えない) ので, 逆行列と固有値の計算コストはあまり問題にならない.

ここで, $f_m = H_m^{-H} e_m$ の計算には, CLAPACK²⁾ のルーチン `dgesv_` を利用した. `dgesv_` は一般行列を係数とする連立 1 次方程式を解く倍精度ルーチンである. 連立 1 次方程式の係数行列を行列 H_m に設定して, 方程式の右辺を同次元の単位行列に設定すると, 求められた解は係数行列 H_m の逆行列となる. 行列 H_m と \mathcal{H}_m の固有値, つまり Ritz 値と調和 Ritz 値の計算に, CLAPACK のルーチン `dgeev_` を用いた.

本章で提案した Ritz 値を考慮した GMRES(m) 法のリスタート手法の有効性を 5 章の数値実験で示すことにする.

5. 数値実験

本稿で提案したリスタート手法の有効性を示すために, 古典的な GMRES(m) 法との比較を中心に数値実験を行った. ただし, 古典的な GMRES(m) 法を GMRES(m) で表記し, 本稿で提案した RITZ-GMRES 法を RITZ-GMRES で表記する. また, 最大 Ritz 値を μ_{\max} で表記し, 最大調和 Ritz 値を $\bar{\mu}_{\max}$ で表記する. 数値実験は以下の環境で行った.

- 計算機: DELL PowerEdge 1750
- OS: Red Hat Linux 7.2
- CPU: 3.00 GHz × 1 インテル (R) Xeon(R)
- メモリ: 512 MB
- 収束判定条件: $\|r_m\|_2 / \|r_0\|_2 \leq 1.0 \times 10^{-12}$
- 初期値ベクトル: $x_0 = (0, 0, \dots, 0)^T$
- 最大反復回数: 20000
- プログラム言語: C 言語
- 計算精度: 倍精度

RITZ-GMRES 法の最大リスタート周期 m_{\max} を

50 に設定した. GMRES(m) 法のリスタート周期 m を $m = 10, 20, 30, 40, 50$ にした. 各実験において, RITZ-GMRES 法の実際のリスタート周期の最大値と平均値 (小数点以下 3 桁目を四捨五入) を計算し, それと一番近いリスタート周期を持つ古典的な GMRES(m) 法との比較を行った.

GMRES 法の反復回数については, Arnoldi 過程の 1 反復につき 1 回と数えた. 計算時間については `Clock()` 関数で求めた値を秒単位で表した.

5.1 数値例 1

正方領域 $\Omega = [0, 1] \times [0, 1]$ における 2 次元楕円型偏微分方程式の境界値問題を考える⁶⁾.

$$\begin{aligned}
 & -u_{xx} - u_{yy} + D((y - 1/2)u_x(x, y) + \\
 & (x - 1/3)(x - 2/3)u_y(x, y)) = G(x, y), \\
 & u(x, y)|_{\partial\Omega} = 1 + xy.
 \end{aligned}$$

この方程式を 5 点中心差分近似を用いて離散化し, 真の解が $u(x, y) = 1 + xy$ となるように右辺 $G(x, y)$ を定めて数値実験を行った. メッシュ幅は $h = 1/513$ にした. 得られた連立 1 次方程式の次元は 262144 となる. また, $Dh = 2^{-3}, 2^{-4}, 2^{-5}, 2^{-6}, 2^{-7}$ の 5 通りで数値実験を行った. 数値例 1 の結果を表 1 に示す. 各 Dh の値において, 算法ごとの計算時間が最も短かったものに下線を引いてある. 表 1 の (数値) は, 最大反復回数で収束条件を満たさなかった場合の残差ノルムの常用対数値を表示している.

表 1 によると, GMRES(10) 法, GMRES(20) 法と GMRES(30) 法は, すべての Dh に対して最大反復回数で収束しなかった. GMRES(40) 法は $Dh = 2^{-5}$ のときだけ収束した. GMRES(50) 法は $Dh = 2^{-5}, 2^{-6}, 2^{-7}$ のときに収束した. これに対して, RITZ-GMRES 法はすべてのケースで収束した. しかも, 処理時間は GMRES(m) 法の収束した場合と比べておよそ半分以下である.

GMRES 法では, Arnoldi 過程の直交化処理に, 最も計算時間を必要とする. その処理時間はクリロフ部分空間の次元に依存する. 本稿の数値実験では, RITZ-

表 2 数値例 1：RITZ-GMRES 法のリスタート周期 m

Table 2 Example 1: Restart cycle m of RITZ-GMRES method.

Dh	2^{-3}	2^{-4}	2^{-5}	2^{-6}	2^{-7}
m の平均値	4.77	4.92	5.02	5.85	5.65
m の最大値	25	27	29	31	28

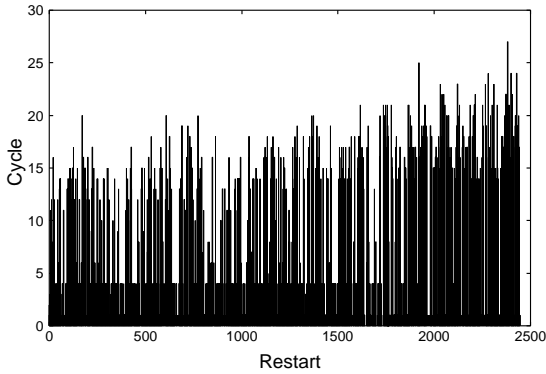


図 3 数値例 1：RITZ-GMRES 法のリスタート周期 ($Dh = 2^{-4}$)

Fig. 3 Example 1: Restart cycle of RITZ-GMRES method ($Dh = 2^{-4}$).

GMRES 法の最大リスタート周期 (つまりクリロフ部分空間の最大次元) を 50 にしたが、実際のリスタート周期の最大値と平均値を表 2 に示す。

表 2 から RITZ-GMRES 法の 1 回の反復に必要な処理時間が GMRES(31) 法より少ないことが分かる。リスタート周期の平均値は 6 以下である。ここで、 $Dh = 2^{-4}$ を取り上げて、実際の RITZ-GMRES 法が実行したリスタート周期を図 3 に示した。この場合、実際の最大リスタート周期は 27、平均値は約 5 なので、RITZ-GMRES 法と GMRES(5) 法、GMRES(27) 法との比較を行った。RITZ-GMRES 法と GMRES(5) 法、GMRES(27) 法の反復回数に対する残差ノルムの収束の様子を図 4 に示し、処理時間に対する残差ノルムの収束の様子を図 5 に示す。図 4 と図 5 から、RITZ-GMRES 法は GMRES(5) 法や GMRES(27) 法と比べて、収束が改善されていることが分かる。これらの結果は 4 章で述べた事柄を裏付け、Ritz 値と調和 Ritz 値を考慮したリスタート手法の有効性を示している。

ここで、Ritz 値と調和 Ritz 値の差と残差ノルムの収束との関連性を示すために、 $Dh = 2^{-4}$ における 6,897 回目の反復を取り上げて、Ritz 値と調和 Ritz 値の差について考察する。6,897 回目の反復前後の最大 Ritz 値と最大調和 Ritz 値の差を図 6 に示す。 x 軸は反復回数、 y 軸は最大 Ritz 値と最大調和 Ritz 値の差である。ただし、 y 軸の表示範囲を $[0, 0.1]$ にした。図 6

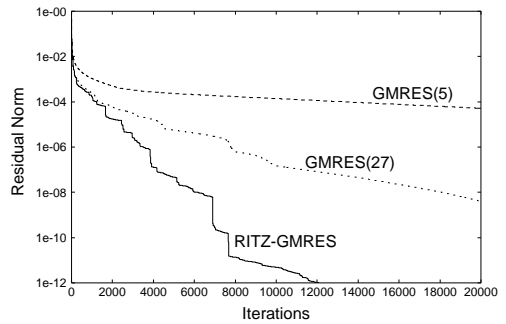


図 4 数値例 1：残差ノルム vs. 反復回数 ($Dh = 2^{-4}$)

Fig. 4 Example 1: Residual norm vs. iterations ($Dh = 2^{-4}$).

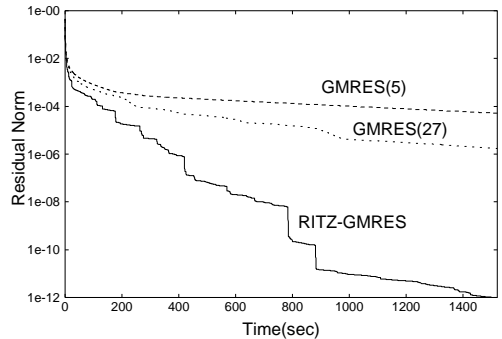


図 5 数値例 1：残差ノルム vs. 計算時間 ($Dh = 2^{-4}$)

Fig. 5 Example 1: Residual norm vs. computation time ($Dh = 2^{-4}$).

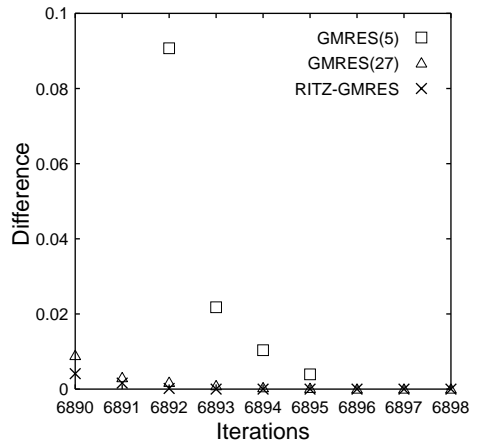


図 6 数値例 1：RITZ-GMRES 法の $|\mu_{\max} - \bar{\mu}_{\max}|$ の分布 ($Dh = 2^{-4}$)

Fig. 6 Example 1: Distribution of $|\mu_{\max} - \bar{\mu}_{\max}|$ of RITZ-GMRES method ($Dh = 2^{-4}$).

から、6,890 回目反復から 6,898 回目の反復にかけて、RITZ-GMRES 法の最大 Ritz 値と最大調和 Ritz 値の差が GMRES(5) 法や GMRES(27) 法より小さいことが分かる。このとき、図 4 から RITZ-GMRES 法の

残差ノルムの収束は GMRES(5) 法や GMRES(27) 法の残差ノルムの収束より優れていることが分かる。これは 3.3 節で述べた事柄と一致する。すなわち、Ritz 値と調和 Ritz 値の差が小さいとき、GMRES 法の収束が速い。

図 6 から、6,890 回目反復から 6,898 回目の反復にかけて、RITZ-GMRES 法の最大 Ritz 値と最大調和 Ritz 値の差が減少し続けることが分かる。それに対して、RITZ-GMRES 法の残差ノルムも順調に収束していることが図 4 から確認できる。特に、6,897 回目の反復において 1 回の反復だけで、RITZ-GMRES 法の残差ノルムの常用対数値は -8.39 から -8.71 まで減少している。これは 3.3 節で述べた事柄と一致する。すなわち、Ritz 値と調和 Ritz 値の差が小さくなると、GMRES 法の収束も良くなる。

最大 Ritz 値と最大調和 Ritz 値の差の代わりに、不等式 (15) の右辺を利用した場合の数値実験の結果を表 3 に示す。この表から、不等式 (15) の右辺の値を利用することは、明らかに有効な手法ではないことが分かるであろう。

5.2 数値例 2

領域 $\Omega = [0, 1] \times [0, 1] \times [0, 1]$ 上において、次の偏微分方程式の境界値問題を考える¹¹⁾。

$$a_1 u_{xx} + a_2 u_{yy} + a_3 u_{zz} + R(a_4 u_x + a_5 u_y + a_6 u_z) + a_7 u = g(x, y, z) \quad \text{on } \Omega.$$

表 3 数値例 1：不等式 (15) の右辺を利用した場合の結果 (T：計算時間 (秒), I：反復回数)

Table 3 Example 1: Numerical results by using the right hand side of inequality (15), (T: time (sec), I: iterations).

Dh	I	T
2^{-3}	(-3.47)	1735
2^{-4}	(-3.42)	1741
2^{-5}	(-3.36)	1680
2^{-6}	(-3.32)	1689
2^{-7}	(-3.30)	1674

(数値)：最大反復回数で収束条件を満たさなかった場合の残差ノルムの常用対数値

ただし、

$$a_1 = 2 + \sin(2\pi x) \cos(2\pi y) \cos(2\pi z),$$

$$a_2 = 2 + \cos(2\pi x) \sin(2\pi y) \cos(2\pi z),$$

$$a_3 = 2 + \cos(2\pi x) \cos(2\pi y) \sin(2\pi z),$$

$$a_4 = \sin(4\pi x), \quad a_5 = \sin(4\pi y), \quad a_6 = \sin(4\pi z),$$

$$a_7 = \sin(2\pi x) \sin(2\pi y) \sin(2\pi z)$$

である。右辺 $g(x, y, z)$ と境界条件は厳密解が

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

となるように定めた。この偏微分方程式は 3 次元移流拡散問題の 1 つである。この例では x, y, z 方向に流れがあり、場所によって流れの強さと拡散の強さが異なる。係数 R が大きくなると流れが強くなる。領域 Ω を $64 \times 64 \times 64$ の格子点に区切り、この偏微分方程式を 7 点中心差分によって離散化した。得られた連立 1 次方程式の次元は $64^3 = 262144$ である。 R の値を $2^1, 2^2, 2^3, 2^4, 2^5$ にして数値実験を行った。実験結果を表 4 に示す。数値例 1 と同様に、収束した各算法ごとの計算時間が最も短かったものに下線を引いてある。

表 4 から RITZ-GMRES 法の処理時間が最も短かったことが分かる。数値例 1 と同様に、表 5 に RITZ-GMRES 法の実際のリスタート周期の最大値と平均値を示す。この表 5 から、RITZ-GMRES 法の 1 回の反復において必要な処理時間は GMRES(21) 法より少ないことが分かる。リスタート周期の平均値は 5 以下である。さらに、 $R = 2^3$ を取り上げて詳しく考察する。この場合の RITZ-GMRES 法の実際のリスタート周期を図 7 で示す。RITZ-GMRES 法の実際のリスタート周期の最大値は 19、平均値は約 4 である。よって、RITZ-GMRES 法と GMRES(4) 法、GMRES(19) 法の比較を行った。RITZ-GMRES 法と GMRES(4) 法、

表 5 数値例 2：RITZ-GMRES 法のリスタート周期 m

Table 5 Example 2: Restart cycle m of RITZ-GMRES method.

R	2^1	2^2	2^3	2^4	2^5
m の平均値	3.28	4.12	3.94	2.82	3.86
m の最大値	18	21	19	17	14

表 4 数値例 2 の結果 (T：計算時間 (秒), I：反復回数)

Table 4 Example 2: Numerical results, (T: computation time (sec), I: iterations).

R	2^1		2^2		2^3		2^4		2^5	
	I	T	I	T	I	T	I	T	I	T
GMRES(10)	1747	220	1755	215	1750	220	1723	213	1128	142
GMRES(20)	1041	182	1038	178	1018	177	928	157	969	169
GMRES(30)	787	177	761	175	712	159	679	148	808	181
GMRES(40)	636	176	656	177	650	179	626	166	763	209
GMRES(50)	632	205	632	201	591	192	619	198	768	251
RITZ-GMRES	671	<u>90</u>	642	<u>88</u>	734	<u>99</u>	705	<u>88</u>	952	<u>123</u>

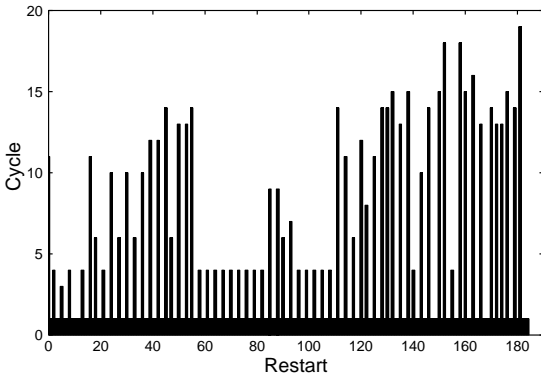


図 7 数値例 2 : RITZ-GMRES 法のリスタート周期 ($R = 2^3$)
 Fig. 7 Example 2: Restart cycle of RITZ-GMRES method ($R = 2^3$).

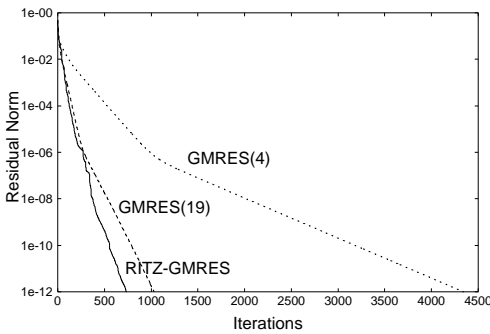


図 8 数値例 2 : 残差ノルム vs. 反復回数 ($R = 2^3$)
 Fig. 8 Example 2: Residual norm vs. iterations ($R = 2^3$).

GMRES(19) 法の反復回数に対する残差ノルムの収束の様子を図 8 に示し、処理時間に対する残差ノルムの収束の様子を図 9 に示す。

図 8 と図 9 から、RITZ-GMRES 法が GMRES(4) 法、GMRES(19) 法と比べて、良い収束をすることが分かる。以上の結果は数値実験 1 と同じように、本稿で提案したリスタート手法の有効性を示している。

さらに、Ritz 値と調和 Ritz 値の差と残差ノルムの収束との関連性を示すために、 $R = 2^3$ の場合の 274 回目の反復を取り上げて考察する。274 回目の反復付近の反復の各々の最大 Ritz 値と調和 Ritz 値の差を図 10 に示す。x 軸は反復回数、y 軸は最大 Ritz 値と最大調和 Ritz 値の差である。ただし、図を見やすくするために、y 軸の表示範囲を $[0, 1]$ にした。図 10 から、269 回目の反復から 274 回目の反復にかけて、RITZ-GMRES 法の最大 Ritz 値と最大調和 Ritz 値の差が GMRES(4) 法や GMRES(19) 法より小さいことが分かる。このとき、RITZ-GMRES 法の残差ノルムの収束は、GMRES(4) 法や GMRES(19) 法より優れていることが図 8 から確認できる。すなわち、Ritz

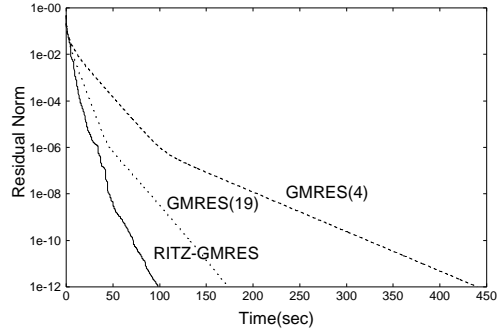


図 9 数値例 2 : 残差ノルム vs. 計算時間 ($R = 2^3$)
 Fig. 9 Example 2: Residual norm vs. computation time ($R = 2^3$).

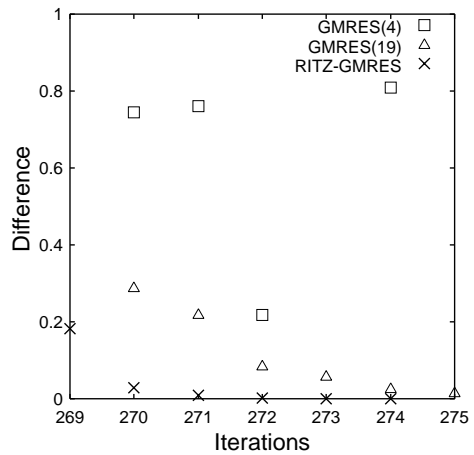


図 10 数値例 2 : RITZ-GMRES 法の $|\mu_{\max} - \bar{\mu}_{\max}|$ の分布 ($R = 2^3$)
 Fig. 10 Example 2: Distribution of $|\mu_{\max} - \bar{\mu}_{\max}|$ of RITZ-GMRES method ($R = 2^3$).

値と調和 Ritz 値の差が小さければ、GMRES 法の残差ノルムの収束が速いことが分かるであろう。また、図 10 から、269 回目の反復から 274 回目の反復にかけて、RITZ-GMRES 法による最大 Ritz 値と最大調和 Ritz 値の差が減少し続けることが分かる。これに対して、RITZ-GMRES 法の残差ノルムも順調に収束していることは図 8 から確認できる。特に、274 回目の反復において、RITZ-GMRES 法の残差ノルムの常用対数値は、 -6.04 から -6.18 まで減少している。この結果は、3.3 節で述べた事柄と一致し、Ritz 値と調和 Ritz 値の差から、GMRES 法の残差ノルムの収束を評価できることを示している。

5.3 数値例 3

最後に、Matrix Market⁷⁾ で提供されている実非対称正方行列 MEMPLUS を考える。MEMPLUS は次元 17758、126150 個の非ゼロ要素を持つ疎な実行列

表 6 数値例 3 の結果 (T: 計算時間 (秒), I: 反復回数)

Table 6 Example 3: Numerical results, (T: computation time (sec), I: iterations).

Method	I	T
GMRES(10)	—	—
GMRES(20)	7868	84
GMRES(30)	7588	102
GMRES(40)	5614	92
GMRES(50)	3187	61
RITZ-GMRES	5951	48

—: 最大反復回数で収束しない場合

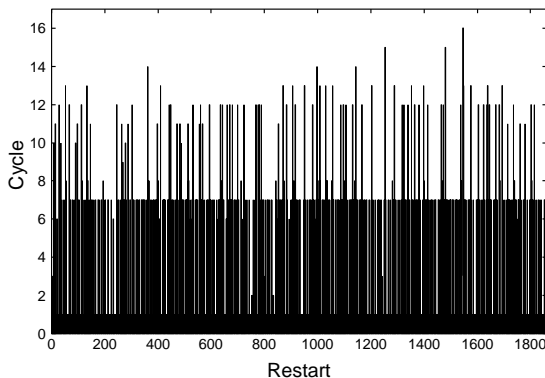


図 11 数値例 3: RITZ-GMRES 法のリスタート周期
Fig. 11 Example 3: Restart cycle of RITZ-GMRES method.

である。行列 MEMPLUS を連立 1 次方程式の係数行列とする。連立 1 次方程式の右辺も Matrix Market において提供されているデータを使用する。

数値実験の結果を表 6 に示す。数値例 1, 2 と同様に, 計算時間が最も短かったものに, 下線を引いてある。表 6 から, RITZ-GMRES 法の処理時間が最も短かったことが分かる。RITZ-GMRES 法の実際のリスタート周期の最大値と平均値は 16 と 3.21 である。つまり, RITZ-GMRES 法の 1 回の反復において必要な記憶容量と処理時間が GMRES(16) 法よりも少ない。RITZ-GMRES 法の実際のリスタート周期を図 11 で示す。

RITZ-GMRES 法と GMRES(4) 法, GMRES(16) 法の反復回数に対する残差ノルムの収束の様子を図 12 に示し, 処理時間に対する残差ノルムの収束の様子を図 13 で示す。図 12 と図 13 から RITZ-GMRES 法が良い収束をしていることは明らかである。

最後に, Ritz 値と調和 Ritz 値の差と残差ノルムの収束との関連性を示す。2,257 回目の反復付近の各反復の最大 Ritz 値と調和 Ritz 値の差を図 14 で示す。 x 軸は反復回数, y 軸は最大 Ritz 値と最大調和 Ritz 値の差である。ただし, y 軸の表示範囲を $[0, 0.1]$ とした。

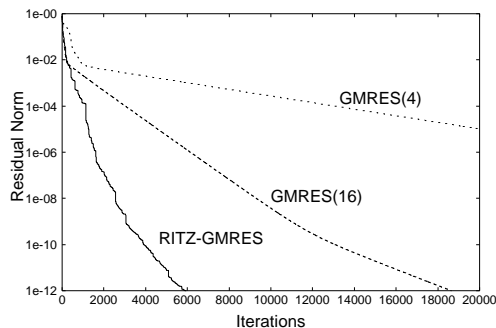


図 12 数値例 3: 残差ノルム vs. 反復回数
Fig. 12 Example 3: Residual norm vs. iterations.

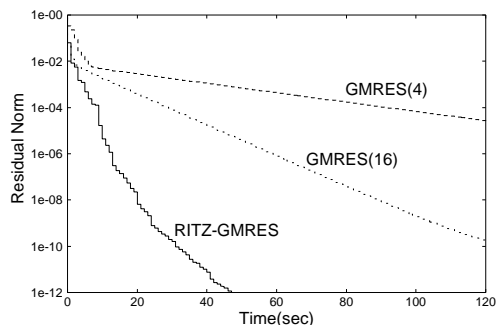


図 13 数値例 3: 残差ノルム vs. 計算時間
Fig. 13 Example 3: Residual norm vs. computation time.

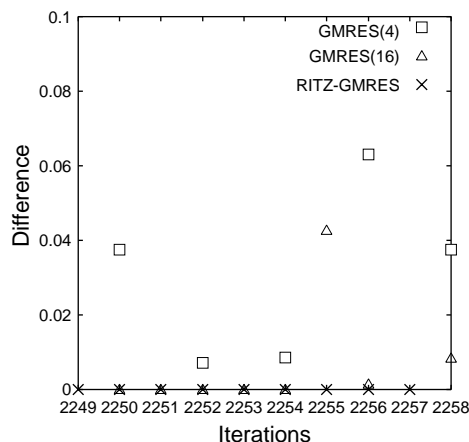


図 14 数値例 3: RITZ-GMRES 法の $|\mu_{\max} - \bar{\mu}_{\max}|$ の分布
Fig. 14 Example 3: Distribution of $|\mu_{\max} - \bar{\mu}_{\max}|$ of RITZ-GMRES method.

図 14 から, 2,249 回目の反復から 2,257 回目の反復にかけて, RITZ-GMRES 法の最大 Ritz 値と最大調和 Ritz 値の差は GMRES(4) 法や GMRES(16) 法より小さいことが分かる。このとき, RITZ-GMRES 法の残差ノルムの収束は, GMRES(4) 法や GMRES(16) 法より優れていることが図 12 から確認できる。これ

は、Ritz 値と調和 Ritz 値の差が小さいとき、GMRES 法の残差ノルムの収束が速いことを示している。

また、図 14 から、2,249 回目の反復から 2,257 回目の反復にかけて、RITZ-GMRES 法の最大 Ritz 値と最大調和 Ritz 値の差が減少し続けることも分かる。これに対して、RITZ-GMRES 法の残差ノルムも順調に収束していることが図 12 から確認できる。特に、2,257 回目の反復において、RITZ-GMRES 法の残差ノルムの常用対数値は -7.77 から -7.94 まで減少している。これは、Ritz 値と調和 Ritz 値の差が小さくなると、GMRES 法の残差ノルムの収束が良くなることを示している。

6. おわりに

本稿では、Ritz 値を考慮した GMRES(m) 法の新しいリスタート手法を提案した。提案した新しいリスタート手法を利用する RITZ-GMRES 法と古典的な GMRES(m) 法と比較すると、RITZ-GMRES 法には以下のメリットがある。

- 早い収束が得られる可能性がある（不必要な直交化処理を削減することで、収束するまでに必要な計算時間の短縮が期待できる）。
- 必要なパラメータは最大リスタート周期 m_{\max} だけである。

また、数値実験によって、本稿で提案した RITZ-GMRES 法は、従来のリスタート周期を固定する GMRES(m) 法より優れた性能を持ち、実用的な方法であると考えられる。

参 考 文 献

- 1) Arnoldi, W.E.: The principle of minimized iteration in the solution of the matrix eigenvalue problem, *Quart. Appl. Math.*, 9, pp.17-29 (1951).
- 2) Anderson, E., et al.: *LAPACK Users Guide*, SIAM, Philadelphia (1992). 小国 (訳): 行列演算パッケージ LAPACK 利用の手引, 丸善 (1996).
- 3) 津野, 野寺: 早期リスタートによる GMRES(m) の高速化, 情報処理学会論文誌, Vol.40, No.4, pp.1760-1773 (1999).
- 4) Erhel, J., Burrage, K. and Pohl, B.: Restarted GMRES preconditioned by Deflation, *J. Comp Appl. Math.*, 69, pp.303-318 (1996).
- 5) Goossens, S. and Roose, D.: Ritz and harmonic Ritz values and the convergence of FOM and GMRES, *Numer. Linear Algebra Appl.*, 6, pp.281-293 (1999).

- 6) Joubert, W.: Lanczos methods for the solution of nonsymmetric systems of linear equations, *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 13, pp.928-943 (1992).
- 7) Matrix Market: Collection of test matrices. available at: <http://math.nist.gov/MatrixMarket/index.html>
- 8) Morgan, R.B.: A restarted GMRES method augmented with eigenvectors, *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 16, pp.1154-1171 (1995).
- 9) Morgan, R.B.: Implicitly restarted GMRES method and Arnoldi methods for nonsymmetric systems of equations, *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, Vol.21, No.4, pp.1112-1135 (2000).
- 10) Saad, Y. and Schultz, M.H.: GMRES: A generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems, *SIAM J. Sci. Statist. Comput.*, 7, pp.856-869 (1986).
- 11) Schönauer, W.: *Scientific Computing on Vector Computers*, North Holland (1987).
- 12) Sleijpen, G.L.G. and Van der Vorst, H.A.: A Jacobi-Davidson iteration method for Richardson's method, *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 17, pp.401-425 (1996).
- 13) Van der Vorst, H.A.: The superlinear convergence behaviour of GMRES, *J. Comp. Appl.*, 48, pp.327-341 (1993).

(平成 16 年 2 月 1 日受付)

(平成 16 年 6 月 25 日採録)



張 臨傑

1997 年中国西安交通大学コンピュータ学部コンピュータ科学&工学学科卒業。現在慶應義塾大学大学院理工学研究科数理学専攻修士課程に在学中。計算機による大規模計算に興味を持つ。



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, 日本応用数理学会各会員。