Vol.2009-HPC-122 No.5
2009/10/9

Deflated GMRES(m) 法の固有値と収束性について

城 石 淳 吾[†1]　野 寺 隆[†2]

GMRES(m) 法は，反復行列に小さな値の固有値が存在する場合，その収束は良いとは言えない．近年，デフレーション技法を用いて，GMRES(m) 法の収束の改善をはかる Deflated GMRES(m) 法が提案されている．この手法はリスタート時に，調和 Ritz ベクトルを Krylov 部分空間内に付加することで，固有値のデフレーションを行い，GMRES(m) 法の収束を改善する．最後に，数値実験により，固有値分布を利用して収束解析を行い，Deflated GMRES(m) 法の有用性を示す．

Convergence of Deflated GMRES(m) method using eigenvalues of coefficient matrix

Jungo Shiroishi[†1] and Takashi Nodera[†2]

Convergence of GMRES(m) method is not good in the presentce of small eigenvalues in the iteration matrix. Recently, Deflated GMRES(m) method that can improve convergence of GMRES(m) method for the deflation technique is proposed. This method deflates the eigenvalues to add harmonic Ritz vectors to Krylov subspace at a restart and improves convergence of GMRES(m) method. Finally, we analyze convergence from the aspect of eigenvalue distribution with numerical experiments and show the effectiveness of Deflated GMRES(m) method.

1. はじめに

大型の対称線形方程式を解く場合に用いられる手法は一般的に CG 法であるが，非対称な問題に対しては多くの解法が存在する．今回はその中でも GMRES 法[1] について考える．GMRES 法の利点は，安定した収束性を持ち残差ノルムを最小にするという特性を持つことである．しかし，計算量が多くメモリ領域も多く使うので，これを防ぐために通常リスタートを行う．この手法を GMRES(m) 法という．リスタートを行うと収束は GMRES 法よりも悪化し，反復行列に小さな値の固有値が存在すると収束はさらに悪化する．そこで，デフレーション技法を用いて収束を改善する手法が提案されてきた．固有値をデフレーションする方法の 1 つとしては，固有ベクトルを部分空間内に存在させることである．この手法を Deflated GMRES(m) 法という．この手法は，Morgan[2] によって提案され，Le Calvez ら[3] によって改善されてきた．今回は，この手法を紹介し，収束性を固有値分布の観点から解析する．

†1 慶應義塾大学大学院理工学研究科
Graduate School of Science and Technology, Keio University
†2 慶應義塾大学理工学部
Department of Mathematics, Keio University

2. GMRES 法

大型の非対称線形方程式 $Ax = b$ の解法として，GMRES 法を利用する[1]．GMRES 法は，残差を最小にするように Krylov 部分空間から解を見つけ出す手法である．

$$x_m \in x_0 + K_m(A, r_0)\ s.t.\ \|r_m\| \to \min$$
$$K_m(A, r_0) = \mathrm{span}(r_0, Ar_0, \cdots, A^{m-1}r_0)$$

ただし，$K_m(A, r_0)$ は krylov 部分空間である．GMRES 法は，Arnoldi 法を用いて，Krylov 部分空間の正規直交基底 V_m を作る．このとき，次のような Arnoldi 関係が得られる．

$$AV_m = V_{m+1}\underline{H}_m.$$

ただし，$\underline{H}_m$ は，次のような形をしている $m+1 \times m$ の上 Hessenberg 行列である．

$$\underline{H}_m = \begin{pmatrix} H_m \\ e_m^T\beta \end{pmatrix}.$$

すると，解 x_m は次のように記述できる．

$$x_m = x_0 + V_m d.$$

このとき，残差ベクトルを表す式は，次のようになる．

$$\begin{aligned} r_m &= b - Ax_m \\ &= r_0 - AV_m d \\ &= \|r_0\|v_1 - V_{m+1}\underline{H}_m d \\ &= V_{m+1}(\|r_0\|e_1 - \underline{H}_m d). \end{aligned}$$

ここで，残差ベクトルを最小にするには，通常次の最小二乗問題を解けばよいことになる．

1	choose x_0
2	compute $r_0 \to v_1$
3	compute $V_{m+1}, \underline{H}_m$ with Arnodli 法
4	find d s.t. $\| \|r_0\| e_1 - \underline{H}_m d \| \to \min$
5	compute $x_m = x_0 + V_m d$

図 1 GMRES 法
Fig. 1 GMRES method

1	choose x_0
2	apply GMRES 法
3	if $\|r_m\| < \epsilon$, break
4	set $x_0 = x_m$
5	go to 2

図 2 GMRES(m) 法
Fig. 2 GMRES(m) method

$$\|r_m\| = \| \|r_0\| e_1 - \underline{H}_m d \|.$$

GMRES 法のアルゴリズムを**図 1** に示す.

3. GMRES(m) 法

GMRES 法は，一般的に言って良い収束性を示すが，多くの計算量と多くのメモリ領域を必要とする．そのため，通常はリスタートを行う．これを GMRES(m) 法という．GMRES(m) 法は，m 反復時の解を初期解と見なし再び GMRES 法を行い，残差が十分小さくなったところで反復を終わらせる方法である．GMRES(m) 法のアルゴリズムを**図 2** に示す.

GMRES(m) 法は，計算量が少なく必要とするメモリ領域が少ないが，GMRES 法よりも収束が悪化する．さらに反復行列に小さな値の固有値が存在すると収束はさらに悪化すると言われている．Morgan[2] は，この小さな値の固有値を取り除き，GMRES(m) 法の収束性を改善する Deflated GMRES(m) 法を提案した.

4. Deflated GMRES(m) 法

小さな値の固有値を取り除くために，GMRES(m) 法にデフレーション技法を利用する．この手法を Deflated GMRES(m) 法という[2),3)]．ここでは，取り除く固有値の数を k として，提案手法を Deflated GMRES(m,k) 法と書く．数学的に同値な手法として，GMRES-E 法[4)] や GMRES-IR 法[5)] などがある．この手法は，小さな値の固有値に対応する固有ベクトルを Krylov 部分空間内に存在させることにより，この固有値を 0 と見なしてこの固有値を取り除く．この技法をデフレーションという[2)]．固有ベクトルは Rayleigh-Ritz 法より得られる調和 Ritz ベクトルを使用する．今，Arnoldi 法より得られる $\underline{H}_m$ は，次のようになる.

$$\underline{H}_m = \begin{pmatrix} H_m \\ e_m^T \beta \end{pmatrix}.$$

Rayleigh-Ritz 法を適用すると，$H_m + \beta^2 H_m^{-T} e_m e_m^T$ の小さな値の固有値を考えることになる．この固有値に対応する固有ベクトルが調和 Ritz ベクトルである．調和 Ritz ベクトルを使ってデフレーションを行うと，Krylov 部分空間は次のようになる.

$$K_m(A, r_0) = \mathrm{span}(u_1, \cdots, u_k, r_0, Ar_0, \cdots, A^{m-k-1} r_0).$$

ここで，$u_1, \cdots, u_k$ は，調和 Ritz ベクトルである．この手法を用いて，収束性を改善する．Deflated GMRES(m) 法のアルゴリズムを**図 3** に示す.

5. 数 値 実 験

Deflated GMRES(m) 法の収束を固有値の観点から解析する．Harwell-Boeing Sparse kit[6)] にある大型の疎行列を利用して数値実験により提案手法の検証を行う．使用する行列は，sherman5，saylr4，bwm2000 を用いる．数値実験を行う環境は**表 1** に示す．また，初期解を $x_0 = 0$，右辺を $b = 1$，収束条件を $\|r_m\|/\|r_0\| < 1.0e-12$ として数値実験を行う.

5.1 例 1：saylr4

まずは saylr4 の行列を利用する．これは石油工学におけるシミュレーション行列の一つである．行列の条件としては，行列サイズが 3564，要素数が 22316，条件数は $1.0e+2$ である．数値実験の結果を**表 2**，**図 4** に示す.

saylr4 は，すべて負の固有値を持っていて，3 つの小さな値の固有値を取り除くと収束性は良くなることが分かる.

1 choose x_0
2 apply GMRES 法
3 if $\|r_m\| < \epsilon$, break
4 compute $H_m + \beta^2 H_m^{-T} e_m e_m^T$ の k 個の小さな固有値
5 compute k 個の調和 Ritz ベクトル $u_1, \cdots, u_k$
6 set $x_0 = x_m$
7 set $K_m(A, r_0) = \mathrm{span}(u_1, \cdots, u_k, r_0, Ar_0, \cdots, A^{m-k-1} r_0)$
8 go to 2

図 3　Deflated GMRES(m,k) 法
Fig. 3　Deflated GMRES(m,k) method

OS	Linux
CPU	Inter Core2 Duo E 8500
メモリ	4GB
言語	C 言語
精度	倍精度

表 1　実験環境
Table 1　Experimental environment

	収束	秒	相対残差
Full GMRES	× (300 回)	22.78	5.4e-2
GMRES(25)	× (500 回)	9.98	1.4e-1
GMRES(50)	×	34.51	6.3e-2
GMRES(75)	×	74.51	1.2e-2
GMRES(100)	×	131.33	3.4e-3
Deflated GMRES(50,1)	× (500 回)	61.65	4.9e-6
Deflated GMRES(50,2)	×	62.43	4.2e-11
Deflated GMRES(50,3)	○	30.50	-
Deflated GMRES(50,4)	○	26.54	-

表 2　saylr4 に対する収束結果
Table 2　Convergence result of saylr4

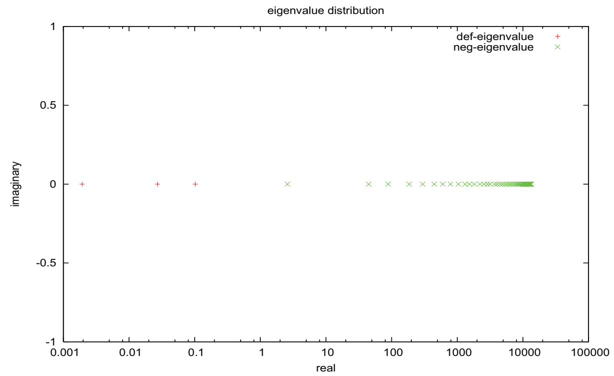

図 4　Deflated GMRES(50,3) 法の固有値分布
Fig. 4　Eigenvalue distribution of Deflated GMRES(50,3) method

	収束	秒	相対残差
Full GMRES	× (450 回)	124.62	6.1e-1
GMRES(25)	× (500 回)	5.60	9.7e-1
GMRES(50)	×	19.45	9.7e-1
GMRES(75)	×	42.04	9.5e-1
GMRES(100)	×	73.71	9.2e-1
Deflated GMRES(50,1)	× (500 回)	33.01	9.7e-1
Deflated GMRES(50,2)	○	10.54	-
Deflated GMRES(50,3)	○	10.70	-
Deflated GMRES(50,4)	○	7.16	-

表 3　bwm2000 に対する収束結果
Table 3　Convergence result of bwm2000

5.2　例 2：bwm2000

次に bwm2000 の行列を考える．これは化学反応における Brusselator 波モデルから得られる行列である．行列の条件としては，行列サイズが 2000，要素数が 7996，条件数は $2.9e+5$ である．数値実験の結果を**表 3**，**図 5** に示す．

bw2000 は，小さな値の固有値に 2 つの共役な複素固有値があり，それらを取り除くと収束性は良くなることが分かる．

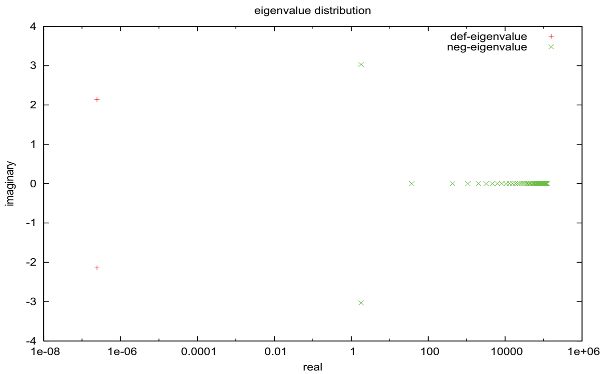

図 5 Deflated GMRES(50,2) 法の固有値分布
Fig. 5 Eigenvalue distribution of Deflated GMRES(50,2) method

	収束	秒	相対残差
Full GMRES	× (300 回)	22.63	1.5e-1
GMRES(25)	× (500 回)	9.28	4.7e-1
GMRES(50)	×	32.13	4.2e-7
GMRES(75)	○	54.78	-
GMRES(100)	○	46.26	-
Deflated GMRES(50,1)	○ (262 回)	30.19	-
Deflated GMRES(50,2)	○ (129 回)	15.00	-
Deflated GMRES(50,3)	○ (106 回)	12.43	-
Deflated GMRES(50,4)	○ (105 回)	12.40	-

表 4 sherman5 に対する収束結果
Table 4 Convergence result of sherman5

5.3 例 3：sherman5

最後に，sherman5 の行列を取り上げる．これは石油貯蔵シュミレーションから得られる行列である．行列の条件としては，行列サイズが 3312，要素数が 20793，条件数は $3.9e+5$ である．数値実験の結果を**表 4**，**図 6** に示す．

sherman5 は，正負の固有値を持つが，小さな値の固有値を取り除くことで収束性は良くなることが分かる．

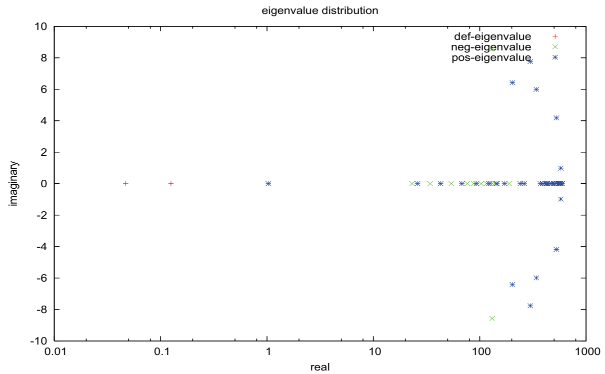

図 6 Deflated GMRES(50,2) 法の固有値分布
Fig. 6 Eigenvalue distribution of Deflated GMRES(50,2) method

6. 結　　論

反復行列に小さな値の固有値がある場合，その固有値を取り除くことで収束性は良くなることが分かる．特に，1 よりも小さな値の固有値が収束性に影響を与えている傾向がある．また，複素固有値を取り除くことも有効であることが分かる．ただし，値の大きな複素固有値は収束を悪くしない．

参　考　文　献

1) Y. Saad and M. H. Schultz, “GMRES: A generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems,” SIAM J. Sci. Statist. Comput., 7(1986), pp. 856–869.
2) R. B. Morgan, “GMRES with deflated restarting,” SIAM J. Sci. Comput., 24(2002), pp. 20–37.
3) S. Rollin and W. Fichtner, “Improving the accuracy of GMRES with deflated restarting,” SIAM J. Sci. Comput., 30(2007), pp. 232–245.
4) R. B. Morgan, “A restarted GMRES method augmented with eigenvetcors,” SIAM J. Matrix Anal. Appl., 16(1995), pp. 1154–1171.
5) R. B. Morgan, “Implicitly restarted GMRES and Arnodli methods for nonsymetric systems of equations,” SIAM J.matrix Anal. Appl., 21(2000), pp. 1112–1135.
6) http://math.nist.gov/MatrixMarket/collections/hb.html.