

並列ブロックグラムシュミット法を用いた Deflated-GMRES(m) 法の一考察[‡]

鈴木 洋夫, 森屋 健太郎, 野寺 隆
慶應義塾大学理工学部

Hiroo Suzuki, Kentaro Moriya, and Takashi Nodera
Faculty of Science and Technology, Keio University

概要

GMRES(m) 法の主要な計算を占めるアーノルディ (Arnoldi) 過程は, グラムシュミット法を用いて計算が行われる. グラムシュミット (Gram-Schmidt) 法にはいくつかの改良版があるが, GMRES(m) 法では, 通常, 修正グラムシュミット (Modified Gram-Schmidt) 法が用いられる. しかし, 直交性の精度が良いという利点があるものの, 内積を計算するごとに同期を取る必要があり, 並列計算には適していない. 一方, 古典的グラムシュミット (Classical Gram-Schmidt) 法やブロックグラムシュミット (Block Gram-Schmidt) 法は並列計算には適しているが, 直交性に関する計算精度があまり良くないという欠点がある. そこで本稿では, グラムシュミット法のいくつかの改良版を GMRES(m) 法に組み合わせることによって, GMRES(m) 法を利用する場合の並列計算で最適なグラムシュミット法の実装方法について考察する.

1 はじめに

偏微分方程式を有限要素法や有限差分法を用いて離散化することによって得られる, 大型で疎な非対称行列を係数とする連立 1 次方程式

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

の反復解法の 1 つに, GMRES(m) 法 [1] がある. この算法はクリロフ部分空間

$$K_m(A, \mathbf{r}_0) = \{\mathbf{r}_0, A\mathbf{r}_0, A^2\mathbf{r}_0, \dots, A^{m-1}\mathbf{r}_0\} \quad (2)$$

上に近似解を構成する反復解法の 1 つである. GMRES(m) 法の主要な計算は, クリロフ部分空間の正規直交基底を生成するアーノルディ (Arnoldi) 過程であり, 通常, オーソドックスな Gram-Schmidt 法を用いて計算が行われる.

Gram-Schmidt 法にはいくつかの種類があるが, GMRES(m) 法においては, 一般的には, 直交性の精度が良い Modified Gram-Schmidt 法を用いる. しかし, 並列計算を行なう場合には, ベクトルの内積を計算するごとに同期を取る必要があり, 並列化の効率があまりよくない. 一方, Classical Gram-Schmidt 法や Block Gram-Schmidt 法は並列計算向きではあるが, 直交性の精度があまり良くないという欠点がある. しかし, 近年の研究では GMRES(m) 法に関していえば, 直交性の崩れはそれほど問題点ではなく, 近似解ベクトルを構成するアーノルディ過程から生成されるアーノルディ基底の一次独立性が重要な要因であることも指摘されている (Greenbaum ら [3]).

[‡]A Note on the Deflated-GMRES(m) Method with Parallel Block Gram-Schmidt Algorithm

```

for  $i = 1$  to  $n$ 
begin
 $w_i^{(1)} = a_i$ 
for  $j = 1$  to  $i - 1$ 
begin
 $\delta = q_j^T w_i^{(j)}$ 
 $w_i^{(j+1)} = w_i^{(j)} - q_j \delta$ 
end
 $q_i = w_i^{(i)} / \|w_i^{(i)}\|_2$ 
end

```

図 1 MGS 法の算法

```

for  $i = 1$  to  $n$ 
begin
 $w_i^{(1)} = a_i$ 
 $d = \tilde{Q}_{i-1}^T w_i^{(1)}$ 
 $w_i^{(i)} = w_i^{(1)} - \tilde{Q}_{i-1}^T d$ 
 $q_i = w_i^{(i)} / \|w_i^{(i)}\|_2$ 
end

```

図 2 CGS 法の算法

そこで本稿では、Gram-Schmidt 法のいくつかの種類を GMRES(m) 法に組み合わせることによって、GMRES(m) 法の並列計算に対する Gram-Schmidt 法の最適な実装方法について考察する。

第 2 節では、GMRES(m) 法について述べる。次に第 3 節では、Modified Gram-Schmidt 法と Classical Gram-Schmidt 法について述べる。さらに、第 4 節において、Gram-Schmidt 法のいくつかの改良版について述べる。第 5 節において現時点での数値実験の結果について報告し、最後に第 6 節において今後の課題について述べる。

2 GMRES(m) 法

GMRES(m) 法は、(2) 式で表されるクリロフ部分空間の m 本の正規直交基底

$$V_m = (v_1, v_2, \dots, v_m) \quad (3)$$

をアーノルディ過程によって生成し、近似解を

$$x_m = x_0 + V_m y \quad (4)$$

と構成する。ただし、 x_m , $r_m (= b - Ax_m)$ は、それぞれ m 回の反復後の近似解、残差ベクトルである。なお、この残差ノルム $\|r_m\|_2$ は局所的に最小となるように構成される。このとき、 y は残差ノルムの最小 2 乗問題

$$\min \|b - Ax_m\|_2 = \min \|\|r_0\|_2 e_1 - \bar{H}_m y\|_2 \quad (5)$$

の解である。ただし、 $\bar{H}_m$ はアーノルディ過程によって生成される $(m+1) \times m$ の上ヘッセンベルグ行列である。

GMRES(m) 法は、正規直交基底を m 本に制限し、 m 回の反復後の近似解 x_m を初期近似解 x_0 として再び m 回の反復を行なう。即ち、GMRES(m) 法は、このようなリスタート（再出発）と呼ばれる手法を用いることで、必要な計算時間と記憶容量を減少させる算法である。

```

for  $i = 1$  to  $n$ 
begin
 $w_i^{(1)} = a_i$ 
 $d = \tilde{Q}_{i-1}^T w_i^{(1)}$ 
 $w_i^{(i)} = w_i^{(1)} - \tilde{Q}_{i-1}^T d$ 
if  $w_i^{(i)} \leq \sigma \|w_i^{(1)}\|_2$  then
 $w_i^{(1)} = w_i^{(i)}$ 
go to line 4
 $q_i = w_i^{(i)} / \|w_i^{(i)}\|_2$ 
end

```

図 3 ICGS 法の算法

```

for  $k = 1$  to  $p$ 
begin
 $W_k^{(1)} = A_k$ 
for  $j = 1$  to  $k - 1$ 
begin
 $\Delta = Q_j^T W_k^{(j)}$ 
 $W_k^{(j+1)} = W_k^{(j)} - Q_j \Delta$ 
end
 $Q_k = MGS(W_k^{(k)})$ 
end

```

図 4 BGS 法の算法

3 Gram-Schmidt 法

GMRES(m) 法において、クリロフ部分空間の正規直交基底を生成するアーノルディ過程では、Gram-Schmidt 法が用いられる。Gram-Schmidt 法を大きく分けると、次のような 2 つの算法になる。(1) 直交性の計算精度は良いが、並列計算に適していない Modified Gram-Schmidt 法 (以下 MGS 法と呼ぶ) と、(2) 直交性の計算精度はあまり良くないが、並列計算に適している Classical Gram-Schmidt 法 (以下 CGS 法と呼ぶ) である。MGS 法と CGS 法の算法を、それぞれ図 1 と図 2 に示すことにする。

ここで、2 つの算法の並列性について考察すると、MGS 法は内積を計算するごとに同期を取る必要があり、同期を取る回数が多いことが原因で、並列化の効率は悪い。一方、CGS 法は全ての内積を計算した後に同期を取ればよいので、並列化の効率は良い。

次に、直交性の理論的な計算精度について考察する。MGS 法の直交性の計算精度については

$$\|Q^T Q - I\|_2 \leq \rho_1 \epsilon \kappa_2(A) \quad (6)$$

$$\|A - QR\|_2 \leq \rho_2 \epsilon \kappa_2(A) \quad (7)$$

が成り立ち、ある程度保証されている (Vanderstraeten [5] を参照)。ただし、 ρ_1, ρ_2 はある定数、 ϵ は計算機イプシロン、 $\kappa_2(\cdot)$ は条件数である。しかし、CGS 法の直交性に関しては、このような不等式は存在しないので、CGS 法の直交性の計算精度に関しては何も保証がない。

このように、MGS 法と CGS 法は一長一短であるが、GMRES(m) 法に対しては並列性より直交性の精度を優先して MGS 法を用いることが多い。しかし、近年 Greenbaum ら [3] の研究によると、GMRES(m) 法に対して重要なことは、アーノルディ過程によって生成された m 本のベクトルの直交性よりむしろ、生成された m 本のアーノルディ基底の一次独立性であるということが分かっている。

```

for  $k = 1$  to  $p$ 
begin
   $W_k^{(1)} = A_k$ 
  for  $j = 1$  to  $k - 1$ 
  begin
     $\Delta = Q_j^T W_k^{(j)}$ 
     $W_k^{(j+1)} = W_k^{(j)} - Q_j \Delta$ 
  end
   $Q_k = MGS(MGS(W_k^{(k)}))$ 
end

```

図 5 B2GS 法の算法

```

Choose a vector  $v_1$ 
 $k = 1, s = 0, Q_1 = \{\}$ 
for  $i = 1$  to  $n$ 
begin
   $s = s + 1$ 
   $w_s^{(1)} = a_i$ 
  for  $j = 1$  to  $k - 1$ 
  begin
     $w_s^{(j+1)} = w_s^{(j)} - Q_j d$ 
  end
   $W_k^* = [W_k^{(k)} w_s^{(k)}]$ 
  if  $\kappa(W_k^*) > \tau$  or  $s \leq s_{max}$  then
     $Q_k = MGS(W_k^{(k)})$ 
     $s = 1$ 
     $k = k + 1$ 
     $W_k = \{w_s^{(k)}\}$ 
  else
     $W_k^{(k)} = W_k^*$ 
  end

```

図 6 DBGS 法の算法

4 Gram-Schmidt 法の改良版

この節では、いくつかの Gram-Schmidt の改良版の算法について述べることにする。なお、各々の算法の詳細は述べないが、算法の基礎的なアウトラインを記述することにする。

4.1 Iterated Classical Gram-Schmidt 法

Iterated Classical Gram-Schmidt 法 (以下 ICGS 法と呼ぶ) は、CGS 法を改良した算法であり、並列化の効率の良さを保ちながら、直交性の計算精度が悪いと判定された場合に再直交化を行い、計算精度を改善する算法である。ICGS 法の算法を図 3 に示す。CGS 法と同様に、全ての内積を計算した後に同期を取ればよいことが分かる。直交性の計算精度は、図 3 の 6 行目

$$\|w_i^{(i)}\|_2 \leq \sigma \|w_i^{(1)}\|_2 \quad (8)$$

において判定される。ただし、 σ は任意の定数である。ICGS 法の計算時間は、再直交化という余分な計算を行う回数によって決まり、したがって、 σ の値を最適な設定にする必要がある。

4.2 Block Gram-Schmidt 法

Block Gram-Schmidt 法 (以下 BGS 法と呼ぶ) は、MGS 法を改良した算法であり、直交性の精度の良さを保ちながら、ブロック形式の計算を行うことで並列化の効率を改善する

表 1 Origin 2000 の仕様

OS	IRIX6.5
セルプロセッサ	MIPS R10000 195MHz
セルローカルメモリ	512MB

算法である。BGS 法の算法を図 4 に示す。MGS 法と同様に、BGS 法の直交性の計算精度については

$$\|Q^T Q - I\|_2 \leq \rho \epsilon \max_{k=1, \dots, p-1} \kappa_2(W_k^{(k)}) \kappa_2(A) \quad (9)$$

が成り立ち [5], ある程度保証されている。しかし, あるブロックの条件数が $\kappa_2(W_k^{(k)}) \gg 1$ のとき, 式 (8) の右辺は $\kappa^2(A)$ に比例することから, 計算精度は保証されないことになる。

そこで, 全てのブロックに MGS 法を 2 回適用することによってあるブロックの条件数 $\kappa_2(W_k^{(k)})$ の値を小さくし, 計算精度を保証した BGS 法の改良版が提案されている。通常, この改良版は B2GS 法と呼ばれている。ここで, B2GS 法の算法を図 5 に示す。この算法に関しても ICGS 法と同様に余分な計算を必要とすることは言うまでもない。

4.3 Dynamic Block Gram-Schmidt 法

Dynamic Block Gram-Schmidt 法 (以下 DBGS 法と呼ぶ) は, BGS 法を改良した算法である。BGS 法の欠点は, 一般に $\kappa_2(W_k^{(k)}) \gg 1$ となり, 精度を保証する式 (8) の意味が失われることである。また, B2GS 法は全てのブロックに MGS 法を 2 回適用して $\kappa(W_k^{(k)})$ を小さくし精度を保証しているが, 残念ながら計算量が多いという欠点がある。BGS 法と B2GS 法は, 各ブロックの大きさを固定することが問題となる。そこで, DBGS 法では, 各ブロックの大きさを

$$\kappa_2(W_k^{(k)}) \leq \tau \quad (10)$$

が成り立つように動的に決定する。ただし, τ は任意の定数である。図 6 に DBGS 法の算法を示す。DBGS 法の利点は, BGS 法と比較してある程度精度が保証されていること, ICGS 法と B2GS 法のような再直交化を必要としないことである。式 (9) の判定を行うためには, 各ブロックの条件数を計算する必要があるが, 一般に行列の条件数の計算には膨大な時間が必要となる。しかし, Vanderstraeten [5] は, 少ない計算量で $\kappa_2(W_k^{(k)})$ を推定することができることを示している。

5 数値実験

本稿で述べた Gram-Schmidt 法を, GMRES(m) 法と左前処理行列を適応的に生成する Deflated-GMRES(m) 法 [4] (以下 LD-GMRES(m) 法と呼ぶ) に実装し, 並列化を行った。使用した計算機は SGI の Origin 2000 である。Origin 2000 の仕様を表 1 に示す。

GMRES(m) 法と LD-GMRES(m) 法の Origin 2000 への実装及び収束判定に関する条件は次のものを使用した。

表 2 $Dh = 2^{-8}$ の場合

CPU		1		2		4		8	
算法		sec.	eff.	sec.	eff.	sec.	eff.	sec	eff.
GMRES(50)	CGS	985.66	1.00	522.39	0.53	285.84	0.29	187.27	0.19
	MGS	1091.32	1.00	589.31	0.54	349.22	0.32	251.00	0.23
	ICGS	1054.97	1.00	559.13	0.53	316.49	0.30	210.99	0.20
	BGS	1038.17	1.00	550.23	0.53	321.83	0.31	228.39	0.22
	B2GS	1112.86	1.00	600.94	0.54	338.85	0.30	244.82	0.22
LD-GMRES(50)	CGS	689.96	1.00	365.67	0.53	200.08	0.29	137.99	0.20
	MGS	763.92	1.00	412.51	0.54	252.09	0.33	190.98	0.25
	ICGS	738.48	1.00	398.77	0.54	221.54	0.30	155.08	0.21
	BGS	719.27	1.00	374.02	0.52	222.97	0.31	165.43	0.23
	B2GS	799.31	1.00	431.62	0.54	239.79	0.30	175.84	0.22

表 3 $Dh = 2^{-7}$ の場合

CPU		1		2		4		8	
算法		sec.	eff.	sec.	eff.	sec.	eff.	sec	eff.
GMRES(50)	CGS	956.86	1.00	507.13	0.53	287.05	0.30	181.80	0.19
	MGS	1081.21	1.00	594.66	0.55	345.98	0.32	237.86	0.22
	ICGS	1018.62	1.00	539.86	0.53	305.58	0.30	213.91	0.21
	BGS	1000.82	1.00	540.44	0.54	320.26	0.32	220.18	0.22
	B2GS	1076.51	1.00	581.31	0.54	366.01	0.34	236.83	0.22
LD-GMRES(50)	CGS	649.72	1.00	337.85	0.52	194.91	0.30	129.94	0.20
	MGS	723.10	1.00	397.70	0.55	238.62	0.33	151.85	0.21
	ICGS	691.28	1.00	366.37	0.53	221.20	0.32	131.34	0.19
	BGS	672.07	1.00	362.91	0.54	215.06	0.32	147.85	0.22
	B2GS	771.32	1.00	416.51	0.54	246.82	0.32	169.90	0.22

- 収束判定条件: $\|r_m\|_2 / \|r_0\|_2 \leq 1.0 \times 10^{-12}$
- 最大反復回数: 10000
- 初期近似解: $x_0 = (0, 0, \dots, 0)$
- プログラム言語: C
- 計算精度: 倍精度

[数値例] 矩形領域 $\Omega = [0, 1] \times [0, 1]$ における 2 階の楕円型偏微分方程式のディリクレ境界値問題を考える (Joubert [6]).

$$\begin{aligned}
 -u_{xx} - u_{yy} + Du_x(x, y) &= G(x, y) \\
 u(x, y)|_{\partial\Omega} &= 1 + xy
 \end{aligned}$$

この方程式を 5 点中心差分近似を用いて離散化し, 真の解を $u(x, y) = 1 + xy$ と設定し, 右辺を決定して数値実験を行なった. このとき, メッシュの大きさは 128×128 とした. 結果を表 2 と表 3 に示す.

$Dh = 2^{-8}$ の場合は, GMRES(50) 法は 1650 回で収束し, LD-GMRES(50) 法は 850 回で収束した. また, $Dh = 2^{-7}$ の場合は, GMRES(50) 法は 1600 回で収束し, LD-GMRES(50) 法は 800 回で収束した.

数値実験の結果から, 今回扱った例題に対しては, CGS 法が最も有効であるということが示された. MGS 法, ICGS 法, BGS 法と B2GS 法は, 並列化の効率が悪いこと, あるいは余計な計算を必要とすることが, そのまま計算時間に反映されるという結果となった. 特に B2GS 法は全てのブロックに MGS 法を 2 回適用することによって直交性の精度を保証するため, 最も計算時間を要するという結果が得られた. 前の節で述べたように, Greenbaum ら [3] の研究によれば, GMRES(m) 法に対しては直交性よりむしろアーノルディ基底の一次独立性が重要であることを示している. ただし, 今回扱った例題においては, どの算法を用いた場合でもアーノルディ基底の一次独立性が失われていないことが予想される. 従って, 並列化の効率が良く, 余分な計算を必要としない CGS 法が最も良い性能を示したと考えられる. また, 並列化の効率について考察すると, MGS 法を除く各算法は, 並列化の効率を改善するという結果が得られた.

6 おわりに

今回扱った例題に対しては, CGS 法が最も良い性能を示した. しかし, 各算法は直交性の精度の良さと並列化の効率の良さで比較されているため, 扱う問題に対してどの算法を適用するのが良いかは, 各算法から得られるアーノルディ基底の一次独立性について検証する必要がある. 従って, 今後の課題としては, 各算法の一次独立性を考慮に入れながら, GMRES(m) 法に対する最適な実装方法を見つけること, および現段階で実装できなかった DBGS 法について, 数値実験を行うことである.

参考文献

- [1] Saad, Y. and Schults, M. H.: GMRES: A Generalized Minimal Residual Algorithm for Solving Nonsymmetric Linear Systems, *SIAM J. Sci. Stat. Comp.*, Vol. 7, No. 3, pp. 856–869 (1986).
- [2] Erhel, J., Burrage, K. and Pohl, B.: Restarted GMRES Preconditioned by Deflation, *J. Comput. Appl. and Applied Math.*, No. 69, pp. 303–318 (1996).
- [3] Greenbaum, A., Rozloznik, M. and Strakos, Z.: Numerical Behaviour of The Modified Gram-Schmidt GMRES Implementation, *BIT*, No. 37, pp. 706–719 (1997).
- [4] Baglama, J., Calvetti, D., Golub, G. H. and Reichel, L.: Adaptively Preconditioned GMRES Algorithms, *SIAM J. Sci. Comput.*, Vol. 20, No. 1, pp. 243–269 (1998).
- [5] Vanderstraeten, D: An Accurate Parallel Block Gram-Schmidt Algorithm without Reorthogonalization, *Numer. Linear Algebra Appl.*, Vol. 7, No. 4, pp. 219–236 (2000).
- [6] 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).