7-36

大規模連立１次方程式に対する一般化最小残差法について

(財) 計量計画研究所　○茂木　渉
日大生産工　篠原　正明

1.　はじめに

大規模非対称連立 1 次方程式

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}, \quad \boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}, \quad \boldsymbol{x}, \boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^{n} \tag{1}$$

に帰着される理工学上の問題は数多く，偏微分方程式に対する有限差分法・有限要素法での離散化や，非線形計画問題に対する Newton 方程式がその代表例として挙げられる．この方程式を解く方法として，Gauss の消去法をはじめとした直接解法は計算時間とメモリ容量の問題から現実的ではないため，係数行列が疎（sparse）であることを利用した反復解法が用いられる．

本稿では連立 1 次方程式の反復解法の中でも有効な手法として知られる一般化最小残差法（Generalized Minimal RESidual method：GMRES）について，まとめと解説をする．

2.　GMRES 法

GMRES 法は Saad and Schultz[2] によって提案された，非対称な正則行列を係数行列とする連立 1 次方程式のロバストな解法として知られている．

2.1.　Krylov 部分空間法

初期解ベクトル $\boldsymbol{x}_0$ を与え，k 反復時の近似解ベクトル $\boldsymbol{x}_k$ 及び残差ベクトル $\boldsymbol{r}_k$ を

$$\boldsymbol{x}_k = \boldsymbol{x}_{k-1} + \boldsymbol{r}_{k-1} \tag{2}$$

$$\boldsymbol{r}_k = \boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_k \tag{3}$$

と定義すると，このとき得られる近似解ベクトル列は (3) 式を (2) 式に順次代入することにより

$$\begin{cases} \boldsymbol{x}_1 = \boldsymbol{x}_0 + \boldsymbol{r}_0 \\ \boldsymbol{x}_2 = \boldsymbol{x}_0 + 2\boldsymbol{r}_0 - \boldsymbol{A}\boldsymbol{r}_0 \\ \boldsymbol{x}_3 = \boldsymbol{x}_0 + 3\boldsymbol{r}_0 - 3\boldsymbol{A}\boldsymbol{r}_0 + \boldsymbol{A}^2\boldsymbol{r}_0 \\ \quad\vdots \end{cases} \tag{4}$$

となる．ここで，(4) 式右辺の第 2 項以降に出現する $\boldsymbol{r}_0, \boldsymbol{A}\boldsymbol{r}_0, \boldsymbol{A}^2\boldsymbol{r}_0, \ldots, \boldsymbol{A}^{k-1}\boldsymbol{r}_0$ が互いに線形独立であれば k 次元ベクトル空間の基底と見做すことができ，真の解 $\boldsymbol{x}$ が存在する n 次元ベクトル空間の部分空間となる．この行列 $\boldsymbol{A}$ の冪乗と残差ベクトル $\boldsymbol{r}_0$ の積によって張られるベクトル空間

$$\mathcal{K}_k(\boldsymbol{A}; \boldsymbol{r}_0) \equiv \mathrm{span}\left\{\boldsymbol{r}_0, \boldsymbol{A}\boldsymbol{r}_0, \ldots, \boldsymbol{A}^{k-1}\boldsymbol{r}_0\right\} \tag{5}$$

を Krylov 部分空間（Krylov subspace）と呼ぶ．ここで，(4) 式より，ベクトル $\boldsymbol{z}_k$ が係数行列 $\boldsymbol{A}$ の冪乗と残差 $\boldsymbol{r}_0$ の積の線形結合によって作られるとすれば，一般に近似解 $\boldsymbol{x}_k$ を

$$\boldsymbol{x}_k = \boldsymbol{x}_0 + \boldsymbol{z}_k, \quad \boldsymbol{z}_k \in \mathcal{K}_k(\boldsymbol{A}; \boldsymbol{r}_0) \tag{6}$$

と表現できる．このような算法を Krylov 部分空間法と呼ぶ．

Krylov 部分空間法において必要となる演算は，一般的に行列ベクトル積や内積などのみであり，行列の疎性を維持して扱えるのが特徴である．

2.2.　Arnoldi 法

係数行列 $\boldsymbol{A}$ の冪乗と残差 $\boldsymbol{r}_0$ の積によって作られる基底は急速に線形従属に近づくため，数値計算上不安定となってしまうことが考えられるので，Gram-Schmit の正規直交化法などを用いて Krylov 部分空間上の正規直交基底を生成する必要がある．

行列 $\boldsymbol{A}$ が非対称の場合に $m\,(m \leqq n)$ 次元部分空間の正規直交基底を生成する手法として，Arnoldi 法と呼ばれるアルゴリズムがある．行列 $\boldsymbol{A}$ と正規化されたベクトル $\boldsymbol{v}_1$ $(\|\boldsymbol{v}_1\|_2 = 1)$ が与えられたときの Arnoldi 法のアルゴリズムを以下に示す．

Algorithm The Arnoldi process

```
Choose a vector v_1
for j = 1 to m do
    h_{i,j} = (A v_j, v_i)    (i = 1, ..., j)
    v̂_{j+1} = A v_j − Σ_{i=1}^{j} h_{i,j} v_i
    h_{j+1,j} = ‖v̂_{j+1}‖_2
    v_{j+1} = v̂_{j+1} / h_{j+1,j}
end for
```

On Generalized Minimal Residual Method for Large Scale System of Linear Equations

Wataru MOGI† and Masaaki SHINOHARA

このアルゴリズムによって生成される正規直交基底 $\boldsymbol{v}_j\ (j=1,\ldots,m)$ を列ベクトルとして持つ n 行 m 列の行列を $\boldsymbol{V}_m$ と表記する．即ち，

$$\boldsymbol{V}_m = (\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \ldots, \boldsymbol{v}_m) \in \mathbb{R}^{n\times m} \tag{7}$$

である．また，このとき得られる $h_{i,j}$ を (i,j) 要素として持つ行列 $\boldsymbol{H}_m \in \mathbb{R}^{m\times m}$ は，$i > j+1$ のとき $h_{i,j}=0$ となる Hessenberg 行列である．

$$\boldsymbol{H}_m = \begin{pmatrix} h_{1,1} & h_{1,2} & \cdots & h_{1,m-2} & h_{1,m-1} & h_{1,m} \\ h_{2,1} & h_{2,2} & \cdots & h_{2,m-2} & h_{2,m-1} & h_{2,m} \\ & h_{3,2} & \cdots & h_{3,m-2} & h_{3,m-1} & h_{3,m} \\ & & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \boldsymbol{0} & & & h_{m-1,m-2} & h_{m-1,m-1} & h_{m,m-1} \\ & & & & h_{m,m-1} & h_{m,m} \end{pmatrix} \tag{8}$$

さて，ここで Arnoldi 法の行列表現を考える．アルゴリズムの Step 4 と Step 6 を整理すると，

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_j = \sum_{i=1}^{j+1} h_{i,j}\boldsymbol{v}_i \quad (j=1,\ldots,m) \tag{9}$$

が得られるので，これら m 本の式をまとめて，

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_m = \left(\sum_{i=1}^{2} h_{i,1}\boldsymbol{v}_i, \sum_{i=1}^{3} h_{i,2}\boldsymbol{v}_i, \ldots, \sum_{i=1}^{m+1} h_{i,m}\boldsymbol{v}_i\right) \tag{10}$$

と書くことができる．(10) 式右辺の第 j 列ベクトルは，$i > j+1$ のとき $h_{i,j}=0$ を利用すると

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{j+1} h_{i,j}\boldsymbol{v}_i &= (\boldsymbol{v}_1,\ldots,\boldsymbol{v}_{j+1})\,(h_{1,j},\ldots,h_{j+1,j})^\mathsf{T} \\ &= (\boldsymbol{v}_1,\ldots,\boldsymbol{v}_{m+1})\,(h_{1,i},\ldots,h_{m+1,i})^\mathsf{T} \\ &= \boldsymbol{V}_{m+1}\,(h_{1,i},\ldots,h_{m+1,i})^\mathsf{T} \end{aligned} \tag{11}$$

である．従って，Hessenberg 行列 $\boldsymbol{H}_m$ に $m+1$ 行目を追加した $m+1$ 行 m 列の行列を $\bar{\boldsymbol{H}}_m$ と定義し，再度 m 本の式をまとめると，Arnoldi 法の行列表現

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_m = \boldsymbol{V}_{m+1}\bar{\boldsymbol{H}}_m \tag{12}$$

が得られる．但し，

$$\bar{\boldsymbol{H}}_m = \begin{pmatrix} & \boldsymbol{H}_m & \\ \underbrace{0 \quad \cdots \quad 0}_{m-1} & & h_{m+1,m} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{(m+1)\times m} \tag{13}$$

である．

2.3. GMRES 法

生成された正規直交基底を基にして近似解を求めるために，ベクトル $\boldsymbol{z}_m$ を一意に決定するためには，何らかの条件を設定する必要がある．一般化最小残差法ではその名のとおり，残差ノルムの最小条件

$$\|\boldsymbol{r}_m\|_2 = \min_{\boldsymbol{x}\in\mathcal{K}_m(\boldsymbol{A};\boldsymbol{r}_0)} \|\boldsymbol{b}-\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_m\|_2 \tag{14}$$

を満たすように $\boldsymbol{z}_m$ を決定する，最小残差アプローチが用いられる．

正規直交基底 $\boldsymbol{V}_m = (\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \ldots, \boldsymbol{v}_m)$ の線形結合定数を $\boldsymbol{y} = (y_1,\ldots,y_m)^\mathsf{T} \in \mathbb{R}^m$ とすれば，m 次元での近似解は (6) 式より

$$\begin{aligned} \boldsymbol{x}_m &= \boldsymbol{x}_0 + \sum_{i=1}^{m} \boldsymbol{v}_i y_i \\ &= \boldsymbol{x}_0 + \boldsymbol{V}_m\boldsymbol{y} \end{aligned} \tag{15}$$

と書き換えることができる．いま，$\boldsymbol{y}$ のベクトル値関数 $\boldsymbol{J}(\boldsymbol{y})$ を，m 反復時の残差 $\boldsymbol{r}_m$ に (10) 式を代入したものとして

$$\boldsymbol{J}(\boldsymbol{y}) = \boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\,(\boldsymbol{x}_0 + \boldsymbol{V}_m\boldsymbol{y}) \tag{16}$$

で定義する．直交基底の最初のベクトルとして，初期残差ベクトルを正規化したものである

$$\boldsymbol{v}_1 = \frac{\boldsymbol{r}_0}{\|\boldsymbol{r}_0\|_2}, \quad \boldsymbol{r}_0 = \|\boldsymbol{r}_0\|_2\,\boldsymbol{v}_1 \tag{17}$$

を選ぶので，(16) 式は

$$\begin{aligned} \boldsymbol{J}(\boldsymbol{y}) &= (\boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_0) - \boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_m\boldsymbol{y} \\ &= \boldsymbol{r}_0 - \boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_m\boldsymbol{y} \\ &= \|\boldsymbol{r}_0\|_2\,\boldsymbol{v}_1 - \boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_m\boldsymbol{y} \end{aligned} \tag{18}$$

と変形できる．ここで，ベクトル $\boldsymbol{e}_1$ を

$$\boldsymbol{e}_1 = (1, \underbrace{0,\ldots,0}_{m})^\mathsf{T} \in \mathbb{R}^{m+1} \tag{19}$$

とすれば，

$$\boldsymbol{V}_{m+1}\boldsymbol{e}_1 = \boldsymbol{v}_1 \tag{20}$$

であるから，(12),(20) 式を (18) 式に代入し，

$$\begin{aligned} \boldsymbol{J}(\boldsymbol{y}) &= \|\boldsymbol{r}_0\|_2\,\boldsymbol{V}_{m+1}\boldsymbol{e}_1 - \boldsymbol{V}_{m+1}\bar{\boldsymbol{H}}_m\boldsymbol{y} \\ &= \boldsymbol{V}_{m+1}\left(\|\boldsymbol{r}_0\|_2\boldsymbol{e}_1 - \bar{\boldsymbol{H}}_m\boldsymbol{y}\right) \end{aligned} \tag{21}$$

となる．ところで，

$$\boldsymbol{v}_i^\mathsf{T}\boldsymbol{v}_j = \begin{cases} 1 & (i=j) \\ 0 & (i\neq j) \end{cases} \tag{22}$$

より，

$$\boldsymbol{V}_{m+1}^\mathsf{T}\boldsymbol{V}_{m+1} = \boldsymbol{I} \in \mathbb{R}^{(m+1)\times(m+1)} \tag{23}$$

であるから，任意のベクトル $\boldsymbol{q} \in \mathbb{R}^{m+1}$ に対して，

$$\begin{aligned} \|\boldsymbol{V}_{m+1}\boldsymbol{q}\|_2 &= \sqrt{\boldsymbol{q}^\mathsf{T}\boldsymbol{V}_{m+1}^\mathsf{T}\boldsymbol{V}_{m+1}\boldsymbol{q}} \\ &= \|\boldsymbol{q}\|_2 \end{aligned} \tag{24}$$

が成り立つ．従って，$\boldsymbol{q} := \|\boldsymbol{r}_0\|_2\boldsymbol{e}_1 - \bar{\boldsymbol{H}}_m\boldsymbol{y}$ と見れば，

$$\|\boldsymbol{J}(\boldsymbol{y})\|_2 = \left\|\|\boldsymbol{r}_0\|_2\boldsymbol{e}_1 - \bar{\boldsymbol{H}}_m\boldsymbol{y}\right\|_2 \tag{25}$$

なので，m 反復時の近似解を求めるために必要となる線形結合定数 $\boldsymbol{y}_m \in \mathbb{R}^m$ は以下の最小 2 乗問

題の解として与えられる．

$$\boldsymbol{y}_m = \arg\min_{\boldsymbol{y}\in\mathbb{R}^m} \left\| \|\boldsymbol{r}_0\|_2 \boldsymbol{e}_1 - \bar{\boldsymbol{H}}_m \boldsymbol{y} \right\|_2 \tag{26}$$

つまり，一般化最小残差法とは「Krylov 部分空間上の正規直交基底を生成し，残差が最小となるように線形結合定数を決定して，近似解を求める手法」である．

Algorithm The GMRES method

1: Choose a vector $\boldsymbol{x}_0$
2: Compute $\boldsymbol{r}_0 = \boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_0$, $\quad \boldsymbol{v}_1 = \boldsymbol{r}_0 / \|\boldsymbol{r}_0\|_2$
3: Apply Arnoldi process to $\boldsymbol{A}$ to obtain $\boldsymbol{V}_m$
4: Find $\boldsymbol{y}_m$ which minimizes $\left\| \|\boldsymbol{r}_0\|_2 \boldsymbol{e}_1 - \bar{\boldsymbol{H}}_m \boldsymbol{y} \right\|_2$
5: Compute $\boldsymbol{x}_m = \boldsymbol{x}_0 + \boldsymbol{V}_m \boldsymbol{y}_m$

2.4. Givens 回転

ここでは (26) 式の問題を解くために，(24) 式のように正規直交基底を列ベクトルとして持つ行列による変換がノルムを変化させないことを利用して，行列 $\bar{\boldsymbol{H}}_m$ を上三角行列に変換することを考える．この変換手法として，Givens 回転による QR 分解を用いる．

回転行列 $\boldsymbol{\Omega}_i\ (i = 1, \ldots, m)$ を

$$\boldsymbol{\Omega}_i = \begin{pmatrix} 1 & & & & & & \\ & \ddots & & & & \boldsymbol{0} & \\ & & 1 & & & & \\ & & & c_i & s_i & & \\ & & & -s_i & c_i & & \\ & & & & & 1 & \\ & \boldsymbol{0} & & & & & \ddots & \\ & & & & & & & 1 \end{pmatrix} \begin{array}{l} \\ \\ \\ \leftarrow i \text{ 行} \\ \leftarrow i+1 \text{ 行} \\ \\ \\ \\ \end{array} \tag{27}$$

で定義し，さらにこれらの回転行列の積を

$$\boldsymbol{Q}_m = \prod_{i=1}^{m} \boldsymbol{\Omega}_i \tag{28}$$

とおく．このとき $\boldsymbol{Q}_m^{\mathsf{T}} \boldsymbol{Q}_m = \boldsymbol{Q}_m \boldsymbol{Q}_m^{\mathsf{T}} = \boldsymbol{I}$ であれば，先述したとおり，(24) 式と同様に

$$\begin{aligned} \|\boldsymbol{J}(\boldsymbol{y})\|_2 &= \left\| \|\boldsymbol{r}_0\|_2 \boldsymbol{e}_1 - \bar{\boldsymbol{H}}_m \boldsymbol{y} \right\|_2 \\ &= \left\| \boldsymbol{Q}_m \left(\|\boldsymbol{r}_0\|_2 \boldsymbol{e}_1 - \bar{\boldsymbol{H}}_m \boldsymbol{y} \right) \right\|_2 \\ &= \left\| \bar{\boldsymbol{g}}_m - \bar{\boldsymbol{R}}_m \boldsymbol{y} \right\|_2 \end{aligned} \tag{29}$$

と変換することができる．但し，

$$\bar{\boldsymbol{g}}_m = \boldsymbol{Q}_m \|\boldsymbol{r}_0\|_2 \boldsymbol{e}_1 \tag{30}$$

$$\bar{\boldsymbol{R}}_m = \boldsymbol{Q}_m \bar{\boldsymbol{H}}_m \tag{31}$$

とおいており，$\bar{\boldsymbol{R}}_m = (r_{i,j}) \in \mathbb{R}^{(m+1)\times m}$ が上三角行列である．

さて，回転行列 $\boldsymbol{\Omega}_i\ (i = 1, \ldots, m)$ を左から順に乗じたときに $\bar{\boldsymbol{H}}_m$ が上三角行列となるように c_i, s_i を定める．$\boldsymbol{Q}_m^{\mathsf{T}} \boldsymbol{Q}_m = \boldsymbol{Q}_m \boldsymbol{Q}_m^{\mathsf{T}} = \boldsymbol{I}$ であるためには，$\boldsymbol{\Omega}_i^{\mathsf{T}} \boldsymbol{\Omega}_i = \boldsymbol{\Omega}_i \boldsymbol{\Omega}_i^{\mathsf{T}} = \boldsymbol{I}$ となればよいので，

$$\begin{pmatrix} c_i & -s_i \\ s_i & c_i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_i & s_i \\ -s_i & c_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{32}$$

より，c_i, s_i は関係式

$$c_i^2 + s_i^2 = 1 \tag{33}$$

を満たせばよい．最初に，$\bar{\boldsymbol{H}}_m$ に $\boldsymbol{\Omega}_1$ を左から乗じたものを

$$\bar{\boldsymbol{R}}_m^{(1)} = \boldsymbol{\Omega}_1 \bar{\boldsymbol{H}}_m = \begin{pmatrix} r_{1,1}^{(1)} & r_{1,2}^{(1)} & \cdots & r_{1,m-1}^{(1)} & r_{1,m}^{(1)} \\ r_{2,1}^{(1)} & r_{2,2}^{(1)} & \cdots & r_{2,m-1}^{(1)} & r_{2,m}^{(1)} \\ & h_{3,2} & \cdots & h_{3,m-1} & h_{3,m} \\ & & \ddots & \vdots & \vdots \\ \boldsymbol{0} & & & h_{m,m-1} & h_{m,m} \\ & & & & h_{m+1,m} \end{pmatrix} \tag{34}$$

とし，これを上三角行列にするためには $r_{2,1}^{(1)} = 0$ としたいので，

$$r_{2,1}^{(1)} = -s_i h_{1,1} + c_i h_{2,1} = 0 \tag{35}$$

である．従って，(35) 式及び (33) の関係式より，

$$c_1 = \frac{h_{1,1}}{\sqrt{h_{1,1}^2 + h_{2,1}^2}}, \quad s_1 = \frac{h_{2,1}}{\sqrt{h_{1,1}^2 + h_{2,1}^2}} \tag{36}$$

となり，

$$\begin{aligned} r_{1,j}^{(1)} &= c_1 h_{1,j} + s_1 h_{2,j} \\ &= \frac{h_{1,1} h_{1,j} + h_{2,1} h_{2,j}}{\sqrt{h_{1,1}^2 + h_{2,1}^2}} \end{aligned} \tag{37}$$

$$\begin{aligned} r_{2,j}^{(1)} &= -s_1 h_{1,j} + c_1 h_{2,j} \\ &= \frac{-h_{2,1} h_{1,j} + h_{1,1} h_{2,j}}{\sqrt{h_{1,1}^2 + h_{2,1}^2}} \end{aligned} \tag{38}$$

を得る．これを繰り返し，m 回乗じたときには，

$$\bar{\boldsymbol{R}}_m = \bar{\boldsymbol{R}}_m^{(m)} = \boldsymbol{\Omega}_m \bar{\boldsymbol{R}}_m^{(m-1)} = \prod_{i=1}^{m} \boldsymbol{\Omega}_i \bar{\boldsymbol{H}}_m \tag{39}$$

となることより，$r_{m+1,m}^{(m)} = 0$ とするには

$$r_{m+1,m}^{(m)} = -s_m r_{m,m}^{(m-1)} + c_m h_{m+1,m} = 0 \tag{40}$$

である．従って，(40) 式及び (33) の関係式より，

$$c_m = \frac{r_{m,m}^{(m-1)}}{\sqrt{(r_{m,m}^{(m-1)})^2 + h_{m+1,m}^2}}, \quad s_m = \frac{h_{m+1,m}}{\sqrt{(r_{m,m}^{(m-1)})^2 + h_{m+1,m}^2}} \tag{41}$$

$$\begin{aligned} r_{m,m}^{(m)} &= c_m r_{m,m}^{(m-1)} + s_m h_{m+1,m} \\ &= \frac{r_{m,m}^{(m-1)} r_{m,m}^{(m-1)} + h_{m+1,m} h_{m+1,m}}{\sqrt{(r_{m,m}^{(m-1)})^2 + h_{m+1,m}^2}} \end{aligned} \tag{42}$$

を得る．$\bar{\boldsymbol{g}}_m = \boldsymbol{Q}_m \|\boldsymbol{r}_0\|_2 \boldsymbol{e}_1 = (g_1, \ldots, g_m, g_{m+1})^{\mathsf{T}}$ については，以下の式で与えられる．

$$g_i = (-1)^{i-1} \|\boldsymbol{r}_0\|_2 c_i \prod_{k=1}^{i-1} s_k \tag{43}$$

$$g_{m+1} = (-1)^m \|\boldsymbol{r}_0\|_2 \prod_{k=1}^{m} s_k \tag{44}$$

いま，$\boldsymbol{g}_m \in \mathbb{R}^m$ と $\boldsymbol{R}_m \in \mathbb{R}^{m\times m}$ をそれぞれ

$$\bar{\boldsymbol{g}}_m = (\boldsymbol{g}_m, g_{m+1})^{\mathsf{T}} \tag{45}$$

$$\bar{\boldsymbol{R}}_m = \begin{pmatrix} \boldsymbol{R}_m \\ \boldsymbol{0}^{\mathsf{T}} \end{pmatrix} \tag{46}$$

と定義すれば，このとき (29) 式は

$$\begin{aligned} \|\boldsymbol{J}(\boldsymbol{y})\|_2 &= \left\| \begin{pmatrix} \boldsymbol{g}_m \\ g_{m+1} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \boldsymbol{R}_m \\ \boldsymbol{0}^{\mathsf{T}} \end{pmatrix} \boldsymbol{y} \right\|_2 \\ &= \sqrt{(\boldsymbol{g}_m - \boldsymbol{R}_m\boldsymbol{y})^2 + (g_{m+1})^2} \end{aligned} \tag{47}$$

となり，$(g_{m+1})^2 \geqq 0$ であるから，残差を最小にする $\boldsymbol{y}_m$ は連立 1 次方程式

$$\boldsymbol{g}_m - \boldsymbol{R}_m\boldsymbol{y} = \boldsymbol{0} \tag{48}$$

の解であり，$\boldsymbol{R}_m$ は上三角行列なので，この連立方程式は後退代入だけで解くことができる．

3. GMRES(m) 法

2 章に示した方法で更新値を求めることができるが，大規模な問題においては，$\boldsymbol{V}_m$ や $\bar{\boldsymbol{H}}_m$ などのメモリ領域を確保することができない．そこで，Arnoldi 法による正規直交基底の生成を m $(m < n)$ 回で打ち切り，その時点で得られる近似解 $\boldsymbol{x}_m$ を新たな初期値 $\boldsymbol{x}_0$ として再度計算を繰り返す方法が考えられる．この手法をリスタート付き一般化最小残差法（GMRES(m) 法）と呼ぶ．

リスタートパラメータ m は問題の規模などを考慮して経験によって決定するが，$m = 30$〜100 に選ぶことが多い．

4. おわりに

連立 1 次方程式に対する代表的な数値解析手法として，一般化最小残差法の理論とアルゴリズムを紹介した．リスタート付き一般化最小残差法は，m 次元の局所的な最小化が行われているにすぎないので，大規模な問題にも適用可能であるが，それ故に収束が停滞してしまうことが起こりうる．これに対応した解法として，停滞回避法 [1] などが考案されている．

近年では様々な分野において，解くべき問題が大規模化しており，それは同時にこのような手法の適用や，さらに有効な手法の開発などが期待される．

参考文献

[1] 森屋健太郎，野寺隆：残差ノルムの収束停滞を適応的に回避する GMRES(m) 法，情報処理学会論文誌，Vol.43，No.7，pp.2264-2271(2002.7).

[2] Saad, Y., Schultz, M. H.：GMRES：A generalized minimal residual algorithm for solving non-symmetric linear systems, SIAM J. Sci. Stat. Comput., Vol.7, pp.856-869(1986).

[3] 坂下雅秀，松尾裕一，村山光宏：一般化最小残差（GMRES）法の安定性検証，宇宙航空研究開発機構研究開発報告，JAXA-RR-07-088(2008.2).

[4] 篠原正明：Distance function minimization approaches to estimating node-to-node traffic matrices under measurement constraint，統計数理研究所共同研究リポート『最適化：モデリングとアルゴリズム』，pp.191-209(1997.12).

Algorithm The GMRES(m) method

1: Choose a vector $\boldsymbol{x}_0$
2: Compute $\boldsymbol{r}_0 = \boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_0, \quad \boldsymbol{v}_1 = \boldsymbol{r}_0 / \|\boldsymbol{r}_0\|_2$
3: Set $g_1 = \|\boldsymbol{r}_0\|_2$
4: **for** $j = 1$ to m **do**
5:     $h_{i,j} = (\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_j, \boldsymbol{v}_i) \quad (i = 1, \ldots, j)$
6:     $\hat{\boldsymbol{v}}_{j+1} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_j - \sum_{i=1}^{j} h_{i,j}\boldsymbol{v}_i$
7:     $h_{j+1,j} = \|\hat{\boldsymbol{v}}_{j+1}\|_2$
8:     $\boldsymbol{v}_{j+1} = \dfrac{\hat{\boldsymbol{v}}_{j+1}}{h_{j+1,j}}$
9:     Set $r_{1,j}^{(0)} = h_{1,j}$
10:     **for** $i = 1$ to $j - 1$ **do**
11:         $\mathrm{tmp1} = c_i r_{i,j}^{(i-1)} + s_i h_{i+1,j}$
12:         $\mathrm{tmp2} = -s_i r_{i,j}^{(i-1)} + c_i h_{i+1,j}$
13:         $r_{i,j}^{(i)} = \mathrm{tmp1}$
14:         $r_{i+1,j}^{(i)} = \mathrm{tmp2}$
15:     **end for**
16:     $c_j = r_{j,j}^{(j-1)} / \sqrt{\left(r_{j,j}^{(j-1)}\right)^2 + h_{j+1,j}^2}$
17:     $s_j = h_{j+1,j} / \sqrt{\left(r_{j,j}^{(j-1)}\right)^2 + h_{j+1,j}^2}$
18:     $g_{j+1} = -s_j g_j$
19:     $g_j = c_j g_j$
20:     $r_{j,j}^{(j)} = c_j r_{j,j}^{(j-1)} + s_j h_{j+1,j}$
21: **end for**
22: Solve $\boldsymbol{R}_m\boldsymbol{y} = \boldsymbol{g}_m$ via back substitution, and gets $\boldsymbol{y}_m$
23: Compute $\boldsymbol{x}_m = \boldsymbol{x}_0 + \boldsymbol{V}_m\boldsymbol{y}_m$
24: **if** convergence **then**
25:     Stop
26: **else**
27:     Set $\boldsymbol{x}_0 = \boldsymbol{x}_m$ and Go To Step2
28: **end if**