

残差ノルムの収束判定を用いる適応的な GMRES($\leq m_{max}$) 法

† 青山学院大学理工学部 森屋 健太郎 (Kentarō Moriya)

†† 慶應義塾大学理工学部 野寺 隆 (Takashi Nodera)

† Faculty of Science and Technology, Aoyama gakuin University

†† Faculty of Science and Technology, Keio University

概要

GMRES($\leq m_{max}$) 法は, 残差多項式の零点分布に基づいて反復の途中でリスタートを動的に行う算法である. しかし, 残差ノルムの零点によるリスタートが必ずしも有効に作用するとは限らず, 零点が均一な分布にならないとリスタート周期が最大値である m_{max} で強制的にリスタートを行うことになる. 本稿では, 残差ノルムの収束判定を行うパラメータを導入し, このような基準からもリスタート周期を判定する GMRES($\leq m_{max}$) 法の改良版を提案する. 最後に, COMPAQ 社の分散メモリ型並列計算機 Beowulf を用いた数値実験の結果から, 本稿で提案した GMRES($\leq m_{max}$) 法の改良版が, GMRES(m) 法, GMRES($\leq m_{max}$) 法と比べて有効に作用することを示す.

1 はじめに

非対称な大型疎行列を係数とする連立 1 次方程式

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

を考える. GMRES 法 [1] のリスタート版である GMRES(m) 法は, 方程式 (1) を解くための非定常反復法の 1 つである. 近年, 津野ら [4] は, GMRES(m) 法のリスタート周期を動的に行う算法の 1 つとして, 改良版の GMRES($\leq m_{max}$) 法を提案した. この算法では, 残差多項式の零点が均一に分散したときにリスタートを行っている. しかし, この零点が均一に分散しないと, リスタート周期が最大値である m_{max} に達して, 強制的にリスタートが行われることになる. 本稿では, 残差ノルムの収束判定を利用したリスタート判定基準を GMRES($\leq m_{max}$) 法に適用した GMRES($\leq m_{max}$) 法の改良版を提案する. さらに, COMPAQ の MIMD 型並列計算機 Beowulf による数値実験結果から, 本稿で提案する GMRES($\leq m_{max}$) 法の改良版の有効性を示す.

2 残差多項式と零点

GMRES 法と GMRES($\leq m_{max}$) 法で使用される残差多項式とその零点について簡単に述べる.

2.1 GMRES 法の残差多項式

ℓ 次元の GMRES 法の残差多項式を係数行列 A の ℓ 個の厳密な固有値 λ_j^{exact} を用いて表すと

$$\Psi_\ell^{exact}(t) = \prod_{j=0}^{\ell-1} (1 - t/\lambda_j^{exact}) \quad (2)$$

となる. 従って, ℓ 回目の残差ベクトルは残差多項式 (2) を用いて

$$r_\ell = \Psi_\ell^{exact}(A)r_0 \quad (3)$$

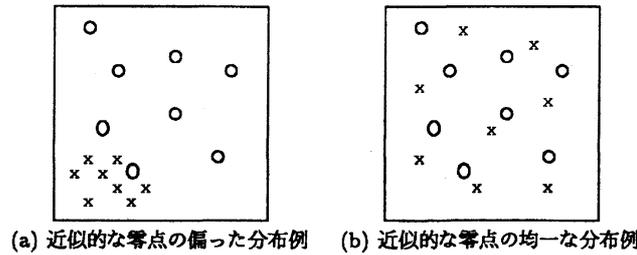


図1 残差多項式の零点分布の例 (o: 理想的な零点, x: 近似的な零点)

と表すことができる。固有値 λ_j^{exact} のことを通常は残差多項式 (2) の零点と呼ぶ。しかし、係数行列 A が大規模になると、これらの零点を求めることは困難になるので、GMRES法の残差多項式の代わりに、GMRE(m)法の残差多項式を用いて残差ベクトルを表すことになる。なお、GMRES法における残差多項式の厳密な零点のことを本稿では「理想的な零点」と呼ぶことにする。

2.2 GMRES($\leq m_{max}$)法の残差多項式

GMRES($\leq m_{max}$)法 [4] は残差多項式の零点分布を基準として、GMRES(m)法のリスタート周期を動的に決定する算法である。ここで、リスタートが i 回行われたと仮定し、 i 回目のリスタートを行うまでにかかった反復回数を $\bar{\ell} = \sum_{j=1}^i \bar{m}_j$ 、最後にリスタートを行った以降の反復回数を k とする。このとき、GMRES($\leq m_{max}$)法の残差多項式は

$$\Psi_k^{(i+1)}(t) = \prod_{s_1=1}^k (1 - t/\lambda_{s_1}^{(i+1)}), \quad (k \leq m_{max}) \quad (4)$$

$$\Psi_{\bar{m}_j}^{(j)}(t) = \prod_{s_2=1}^{\bar{m}_j} (1 - t/\lambda_{s_2}^{(j)}), \quad (j = 1, 2, \dots, i), \quad (m_j \leq m_{max}) \quad (5)$$

と表すことができる。従って、 $\ell (= \bar{\ell} + k)$ 回目の反復の残差ベクトル r_ℓ は残差多項式 (4) と (5) を用いて

$$r_\ell = \Psi_k^{(i+1)}(A) \{ \prod_{j=1}^i \Psi_{\bar{m}_j}^{(j)}(A) r_0 \} \quad (6)$$

と書くことができる。ただし、 \bar{m}_j は $j-1$ 回目のリスタート直後から j 回目のリスタートが行われるまでにかかった反復回数であり、 $\bar{m}_j \leq m_{max}$ である。以降、 m_j のことを j 回目のリスタート周期と呼ぶことにする。特に、 $m_j = m$ 、 $m_{max} = m$ のとき式 (4) と式 (5) は GMRES(m)法の残差多項式と一致する。なお、 $\lambda_{s_1}^{(i+1)}$ と $\lambda_{s_2}^{(j)}$ がおのおのの残差多項式の零点となるが、本稿ではこれらの零点のことを「近似的な零点」もしくは単に「零点」と呼ぶことにする。

3 リスタートを行う基準

残差ノルムの収束判定をするパラメータを基準にしてリスタートを行う方法を新たに導入し、2つの基準からリスタート周期を決定する GMRES($\leq m_{max}$)法の改良版を提案する。

3.1 残差多項式の零点分布を基準とするリスタート

残差多項式 (5) の零点 $\lambda_{s_2}^{(j)}$ は、最後のリスタート以前に求められた $\bar{\ell}$ 個の固定された零点である。それに対して、残差多項式 (4) の零点 $\lambda_{s_1}^{(i+1)}$ は、最後にリスタートした以降に求められる k

個の固定されていない零点である。ここで零点が固定されたというのは、零点の値が既に確定されており、反復を行っても零点の値が変わらないことを意味する。それに対して、零点が固定されていないとは、反復する度に零点の値が変化することの意味する。これら固定されていない k 個の零点が、以前に求まっていた $\bar{\ell}$ 個の固定された零点に対してできる限り分散している方がより理想的な零点の分布に近づく可能性が高い。例えば、図 1 のように理想的な零点が分布していたとする。このとき、図 1.(a) のように近似的な零点が偏って存在すると、近似的な零点分布が理想的な零点分布を近似できない可能性が高くなる。それに対して、図 1.(b) のように近似的な零点が分散して存在すると、理想的な零点分布を近似できる可能性が高くなる。この事実を元にして津野ら [4] は以下の条件を満たすときリスタートを行っている。

[条件 A] 任意の固定されていない零点 $\lambda_{s_1}^{(i+1)}$ を中心とする長方形領域

$$T(\lambda_{s_1}^{(i+1)}) := \left\{ z \in C \mid \operatorname{re}|\lambda_{s_1}^{(i+1)} - z| < \frac{1}{2}M_{\operatorname{re}}/(\ell-1), \operatorname{im}|\lambda_{s_1}^{(i+1)} - z| < \frac{1}{2}M_{\operatorname{im}}/(\ell-1), \right\}$$

に任意の固定された零点 $\lambda_{s_2}^{(j)}$ が存在しない。ただし、

$$\begin{aligned} M_{\operatorname{re}} &= \max_{s_1, s_2, j} \{ \operatorname{re}(\lambda_{s_1}^{(i+1)}), \operatorname{re}(\lambda_{s_2}^{(j)}) \} - \min_{s_1, s_2, j} \{ \operatorname{re}(\lambda_{s_1}^{(i+1)}), \operatorname{re}(\lambda_{s_2}^{(j)}) \} \\ M_{\operatorname{im}} &= \max_{s_1, s_2, j} \{ \operatorname{im}(\lambda_{s_1}^{(i+1)}), \operatorname{im}(\lambda_{s_2}^{(j)}) \} - \min_{s_1, s_2, j} \{ \operatorname{im}(\lambda_{s_1}^{(i+1)}), \operatorname{im}(\lambda_{s_2}^{(j)}) \} \end{aligned}$$

である。

“条件 A” は、複素平面上に $M_{\operatorname{im}} \times M_{\operatorname{re}}$ の長方形があり、その範囲に任意の固定されていない零点 $\lambda_{s_2}^{(j)}$ が、任意の固定された零点 $\lambda_{s_1}^{(i)}$ に対してある一定の距離を隔てて存在することを意味する。ただし、複素数の零点は必ず共役で存在するので、これらは必ず複素平面の実軸に関して対称に分布する。従って、実軸と実軸より上の平面に存在する零点の分布しか考慮しない。“条件 A” によるリスタートの判定は、反復回数が偶数のときのみ行われる。なぜなら、反復回数が奇数であると近似的な零点の少なくとも 1 つは必ず実数の零点になるためである。このとき、理想的な零点がすべて複素数であり、かつ近似的な零点に実数が存在すると、その実数の近似的な零点はどの理想的な零点も近似することができなくなる。また、最初は固定された零点は存在しないので、反復回数が 2 のときには最初の固定された零点を計算するために無条件でリスタートを行う。

3.2 残差ノルムの収束判定条件を適用した GMRES ($\leq m_{\max}$) 法

GMRES ($\leq m_{\max}$) 法の $\ell (= \bar{\ell} + k)$ 回目の反復における近似解を漸化式を用いて表すと

$$\mathbf{x}_\ell = \mathbf{x}_{\bar{\ell}} + V_k \mathbf{y}_k \quad (7)$$

となる [1, 4]。ただし、 $\bar{\ell} = \sum_{j=1}^i \bar{m}_j$ であり、 $\mathbf{x}_{\bar{\ell}}$ は最後にリスタートを行った時点での近似解である。従って、そのときの残差ベクトルは

$$\mathbf{r}_\ell = \mathbf{b} - A\mathbf{x}_\ell = \mathbf{r}_{\bar{\ell}} - AV_k \mathbf{y}_k \quad (8)$$

である。ここで、探索ベクトルを $\mathbf{d}_k = AV_k \mathbf{y}_k$ として

$$\cos(\mathbf{r}_{\bar{\ell}}, \mathbf{d}_k) = \frac{|\langle \mathbf{r}_{\bar{\ell}}, \mathbf{d}_k \rangle|}{\|\mathbf{r}_{\bar{\ell}}\|_2 \|\mathbf{d}_k\|_2} = \sqrt{1 - \|\mathbf{r}_\ell\|_2^2 / \|\mathbf{r}_{\bar{\ell}}\|_2^2}$$

```

BC-GMRES( $\leq m_{max}$ ) method

Choose  $x_0$ 
 $r_0 = b - Ax_0$ ,  $\ell = 0$ ,  $\bar{\ell} = 0$ ,  $k = 1$ 
start:
 $\ell = \ell + 1$ 
Compute  $V_k$  through Arnoldi process.
Update  $x_\ell$ ,  $r_\ell$  and  $d_k$ .
if  $\|r_\ell\|_2$  is small enough then
  Stop iterations
endif
if  $(k \bmod 2) = 0$  then
  Compute  $k$  new zero points and  $\cos(r_{\bar{\ell}}, d_k)$ 
  if "Condition A" is satisfied or  $\ell = 2$  then
    set the current  $\cos(r_{\bar{\ell}}, d_k)$  to  $\varepsilon$ 
    Fix  $k$  new zero points
     $k = 1$ ,  $\bar{\ell} = \ell$ ,  $x_{\bar{\ell}} = x_\ell$ ,  $r_{\bar{\ell}} = r_\ell$ 
    goto start
  endif
  if the condition (9) is satisfied or  $k = m_{max}$  then
    Fix  $k$  new zero points
     $k = 1$ ,  $\bar{\ell} = \ell$ ,  $x_{\bar{\ell}} = x_\ell$ ,  $r_{\bar{\ell}} = r_\ell$ 
    goto start
  endif
endif
 $k = k + 1$ 
goto start

```

図2 BC-GMRES($\leq m_{max}$)法

を定義する。式(9)では、最後にリスタートした時点で求まっていた残差ベクトル $r_{\bar{\ell}}$ と探索ベクトル d_k のなす角度が小さくなるにつれ、その値は大きくなり残差ノルムの収束を加速させる傾向がある[5]。従って、ある閾値を ε とすると

$$\cos(r_{\bar{\ell}}, d_k) > \varepsilon \quad (9)$$

であるなら、残差ノルムは収束停滞を起こしていないとみなして零点の分布に関係なくリスタートを行うことにする。ただし、 ε は反復の途中で適応的に設定されることになる。具体的には、偶数回の反復でリスタートの判定を行うときは k 個の零点 $\lambda_{s_i}^{(j)}$ と $\cos(r_{\bar{\ell}}, d_k)$ を計算する。もしリスタートが行われたなら、このとき計算されていた $\cos(r_{\bar{\ell}}, d_k)$ をリスタートを行った実績のある $\cos(r_{\bar{\ell}}, d_k)$ とみなして ε に設定する。これ以降のリスタートの判定では、 ε が以前にリスタートを行ったときの $\cos(r_{\bar{\ell}}, d_k)$ となり、現在求まっている $\cos(r_{\bar{\ell}}, d_k)$ がこの値を上回ったときに、リスタートを行うのに十分な残差ノルムの収束性があると判断する。以上をまとめると、次のような条件のいずれかが成立するときリスタートを決定することになる。

- (1-a) 全体の反復回数が2ならリスタートを行う。零点の初期分布と閾値 ε の初期値を決定するために、このとき ε は、この時点で計算されていた $\cos(r_{\bar{\ell}}, d_k)$ の値に設定される。
- (1-b) “条件A”が成立するときリスタートを行う。このとき ε は、この時点で計算されていた $\cos(r_{\bar{\ell}}, d_k)$ の値に設定される。
- (1-c) $\cos(r_{\bar{\ell}}, d_k) > \varepsilon$ ならリスタートを行う。このとき ε は更新しない。

表 1 数値例 1 の計算結果 (time: 計算時間 (秒), iter: 反復回数)

算法	Dh							
	2^{-5}		2^{-4}		2^{-3}		2^{-2}	
	time	iter	time	iter	time	iter	time	iter
GMRES(10)
GMRES(20)	2162.0	41150	1365.0	26890	1232.0	24449	1069.0	21255
GMRES(30)	1546.0	21478	1088.0	15510	1490.0	20181	1014.0	14034
GMRES(40)	1297.0	14666	1316.0	14272	1112.0	12562	921.0	10460
GMRES(50)	2044.0	18521	1160.0	10335	1107.0	9866	1203.0	10213
GMRES(≤ 10)	549.0	16351	557.0	16455	414.0	12751	625.0	18267
GMRES(≤ 20)	669.0	12837	737.0	14158	719.0	13411	822.0	14675
GMRES(≤ 30)	690.0	9745	601.0	8609	663.0	9635	788.0	10921
GMRES(≤ 40)	581.0	7803	634.0	8553	731.0	9651	716.0	9453
GMRES(≤ 50)	630.0	7717	723.0	9056	757.0	9449	836.0	10288
BC-GMRES(≤ 10)	305.0	12345	271.0	11040	275.0	11088	271.0	11676
BC-GMRES(≤ 20)	232.0	8497	300.0	11254	231.0	8975	254.0	10626
BC-GMRES(≤ 30)	267.0	9843	302.0	11254	248.0	9764	223.0	9446
BC-GMRES(≤ 40)	229.0	7958	297.0	11254	254.0	9764	226.0	9446
BC-GMRES(≤ 50)	231.0	7958	298.0	11254	252.0	9764	227.0	9446

(...): 50000 回の反復回数で収束しなかった場合

このようなリスタートの決定法を取り入れた GMRES($\leq m_{max}$) 法の改良版を図 2 に示す。ただし, “Fix k new zero points” とは, 固定されていなかった k 個の零点の値をこの時点で求めていた値に決定することを意味する。図 2 に示したような 2 つの基準に従って, リスタート周期を $2 \leq m_j \leq m_{max}$ の範囲で動的に決定する GMRES($\leq m_{max}$) 法のことを本稿では BC-GMRES($\leq m_{max}$) 法 (Bi-Condition-GMRES($\leq m_{max}$) 法の略) と呼ぶ。

4 数値実験

COMPAQ 社の MIMD 型並列計算機 Beowulf を用いて, 本稿で提案した BC-GMRES($\leq m_{max}$) 法の残差ノルムの収束に要する計算時間を GMRES(m) 法, GMRES($\leq m_{max}$) 法と比較する。ただし, 使用したセルは 16 台である。

4.1 数値例 1 (2 次元偏微分方程式の境界値問題の例)

領域 $\Omega = [0, 1]^2$ における偏微分方程式の境界値問題を考える [3].

$$-u_{xx} - u_{yy} + D\{(y - 1/2)u_x + (x - 2/3)(x - 1/3)u_y\} = f$$

$$u(x, y)|_{\partial\Omega} = 1 + xy$$

ただし, 右辺 f は厳密解が $u(x, y) = 1 + xy$ となるように設定する。領域 Ω を格子点数 512^2 で区切り 5 点中心差分によって離散化すると, 係数行列の次元が 262,144 である連立 1 次方程式が得られる。ここで, 反復の初期近似解 x_0 を零ベクトル, 残差ノルムの収束判定条件を

$$\|r_k\|_2 / \|b\|_2 < 1.0 \times 10^{-12} \quad (10)$$

とし, 表 1 に残差ノルムの収束判定条件の式 (10) を満たすまでに要した計算時間と反復回数を示す。ただし, h は隣合う格子点間の距離であり $h = 1/513$ である。GMRES(m) 法では, 計算時間はいずれの場合も 1000 秒を超えている。それに対して, GMRES($\leq m_{max}$) 法では, いずれも 900 秒を切っておりその計算時間は最大で GMRES(m) 法の場合の $1/3$ 以下まで減少している。

表 2 数値例 2 の連立 1 次方程式 (14) を解くのにかった計算時間と反復回数 ($Dh = 2^{-2}$, time: 計算時間 (秒), iter: 反復回数)

算法	漸化式 (14) の反復回数									
	1 回目		2 回目		3 回目		4 回目		5 回目	
	time	iter	time	iter	time	iter	time	iter	time	iter
GMRES(10)	318.0	1663	374.0	1985	397.0	2090	384.0	2031	583.0	3052
GMRES(20)	277.0	914	318.0	1052	270.0	880	261.0	855	398.0	1203
GMRES(30)	335.0	698	272.0	657	273.0	657	287.0	689	471.0	1123
GMRES(40)	298.0	577	349.0	664	364.0	685	366.0	680	508.0	836
GMRES(50)	352.0	552	412.0	645	425.0	650	392.0	611	571.0	871
GMRES(≤ 10)	129.0	693	149.0	804	159.0	870	179.0	958	230.0	1209
GMRES(≤ 20)	202.0	690	238.0	802	301.0	796	218.0	765	270.0	913
GMRES(≤ 30)	236.0	610	261.0	664	247.0	618	243.0	622	356.0	900
GMRES(≤ 40)	260.0	597	283.0	610	248.0	571	261.0	596	385.0	870
GMRES(≤ 50)	263.0	597	278.0	611	276.0	652	279.0	635	380.0	866
BC-GMRES(≤ 10)	109.0	903	126.0	1030	93.0	791	122.0	974	167.0	1266
BC-GMRES(≤ 20)	105.0	903	92.0	793	95.0	758	94.0	830	169.0	1282
BC-GMRES(≤ 30)	107.0	903	95.0	793	98.0	758	97.0	830	173.0	1282
BC-GMRES(≤ 40)	108.0	903	95.0	793	100.0	758	96.0	830	173.0	1282
BC-GMRES(≤ 50)	108.0	903	95.0	793	98.0	758	97.0	830	172.0	1282

さらに, BC-GMRES($\leq m_{max}$) 法では, GMRES($\leq m_{max}$) 法に比べて計算時間が最大で 30%, GMRES(m) 法と比べて最大で 10%程度に短縮されている。また, BC-GMRES($\leq m_{max}$) 法は GMRES($\leq m_{max}$) 法と異なり, m_{max} が 40 以上のときはリスタート周期が最大値まで使われることがなく, m_{max} が 40 と 50 のときで結果は同じになった。従って, BC-GMRES($\leq m_{max}$) 法は, GMRES($\leq m_{max}$) 法よりリスタート周期の取りうる値の範囲が狭く, m_{max} の値を 30 以上に設定しても収束性は一定である。

4.2 数値例 2 (3 次元連立非線形偏微分方程式の境界値問題の例)

領域 $\Omega = [0, 1]^3$ 上での次のような非線形偏微分方程式の境界値問題を考える [2].

$$\begin{aligned} u_{xx} + u_{yy} + u_{zz} + D(uu_x + vu_y + wu_z) + u &= f_1 \text{ on } \Omega \\ v_{xx} + v_{yy} + v_{zz} + D(vv_x + vv_y + vv_z) + v &= f_2 \text{ on } \Omega \\ w_{xx} + w_{yy} + w_{zz} + D(wv_x + vw_y + ww_z) + w &= f_3 \text{ on } \Omega \end{aligned}$$

ただし, 右辺の関数 f_1, f_2, f_3 と境界条件は厳密解が

$$\begin{aligned} u(x, y, z) &= \sin(\pi x) \cos(\pi y) \cos(\pi z), \quad v(x, y, z) = \cos(\pi x) \sin(\pi y) \cos(\pi z), \\ w(x, y, z) &= \cos(\pi x) \cos(\pi y) \sin(\pi z) \end{aligned}$$

となるように設定する。領域 Ω を格子点数 80^3 で区切り 7 点中心差分によって離散化すると, 格子点 $(ih, jh, kh), i, j, k = 1, 2, \dots, 80$ に対応して次元が 1,536,000 の非線形な連立方程式

$$\begin{aligned} a_{1,i,j,k} g_{i,j,k-1} + a_{2,i,j,k} g_{i,j-1,k} + a_{3,i,j,k} g_{i-1,j,k} + (h^2 - 6) g_{i,j,k} \\ + a_{4,i,j,k} g_{i,j,k+1} + a_{5,i,j,k} g_{i,j+1,k} + a_{6,i,j,k} g_{i+1,j,k} - h^2 f_{i,j,k} = 0 \end{aligned} \quad (11)$$

が得られる。ただし,

$$\begin{aligned} a_{1,i,j,k} &= 1 - \frac{Dh}{2} w_{i,j,k}, \quad a_{2,i,j,k} = 1 - \frac{Dh}{2} v_{i,j,k}, \quad a_{3,i,j,k} = 1 - \frac{Dh}{2} u_{i,j,k}, \\ a_{4,i,j,k} &= 1 + \frac{Dh}{2} w_{i,j,k}, \quad a_{5,i,j,k} = 1 + \frac{Dh}{2} v_{i,j,k}, \quad a_{6,i,j,k} = 1 + \frac{Dh}{2} u_{i,j,k} \end{aligned}$$

表3 数値例2におけるリスタート周期の出現回数 ($Dh = 2^{-2}$, 漸化式 (14) の反復3回目)

リスタート 周期	出現回数					
	BC-GMRES(<20)			GMRES(<20)		
	零点分布	残差ノルム	強制	零点分布	残差ノルム	強制
2	55	80	-	9	0	-
4	1	74	-	1	0	-
6	8	0	-	0	0	-
8	7	0	-	0	0	-
10	5	0	-	0	0	-
12	3	0	-	0	0	-
20	0	0	0	0	0	38

かつ $h = 1/81$ である。また,

$$g_{i,j,k} = [u_{i,j,k}, v_{i,j,k}, w_{i,j,k}]^T \quad (12)$$

$$f_{i,j,k} = [f_{1,i,j,k}, f_{2,i,j,k}, f_{3,i,j,k}]^T \quad (13)$$

であり, $u_{i,j,k}, v_{i,j,k}, w_{i,j,k}, f_{1,i,j,k}, f_{2,i,j,k}, f_{3,i,j,k}$ は, それぞれ格子点 (ih, jh, kh) における関数 u, v, w, f_1, f_2, f_3 の値である。方程式 (11) は非線型なので, ニュートン法により解 $g_{i,j,k}$ を求めることにする。ニュートン法の l 回目の反復における近似解を

$$s_l = [g_{l,1,1,1}^T, g_{l,2,1,1}^T, \dots, g_{l,80,1,1}^T, g_{l,1,2,1}^T, g_{l,2,2,1}^T, \dots, \dots, g_{l,80,80,80}^T]^T$$

とおき, 式 (11) の左辺を $q_l(g_{l,i,j,k})$ とし, 残差ベクトルを

$$q_l(s_l) = [q_{l,1,1,1}(g_{l,1,1,1})^T, q_{l,2,1,1}(g_{l,2,1,1})^T, \dots, q_{l,80,1,1}(g_{l,80,1,1})^T, \\ q_{l,1,2,1}(g_{l,1,2,1})^T, q_{l,2,2,1}(g_{l,2,2,1})^T, \dots, \dots, q_{l,80,80,80}(g_{l,80,80,80})^T]^T$$

とする。このとき, $s_l, q_l(s_l)$ は 1,536,000 次元のベクトルとなり, 関数 u, v, w を求めるためのニュートン法の式は

$$s_{l+1} = s_l - J_l^{-1}(s_l)q_l(s_l) \quad (14)$$

となる。ただし, 行列 $J_l(s_l)$ はベクトル $q_l(s_l)$ のヤコビ行列である。また, 式 (14) における初期近似解 s_0 は, 任意の j, k について 2 点 $(0, jh, kh)$ と $(1, jh, kh)$ を結ぶ線形ラグランジュ補間によって求めた。ここで, 式 (14) においてニュートン法の反復 1 回につき $J_l^{-1}(s_l)q_l(s_l)$ の計算が 1 回必要となるが, $J_l(s_l)$ は非零の対角成分を 9 本もつ大型で疎な行列である。従って, $\delta s_l = J_l^{-1}(s_l)q_l(s_l)$ とすると, 連立 1 次方程式

$$J_l(s_l)\delta s_l = q_l(s_l) \quad (15)$$

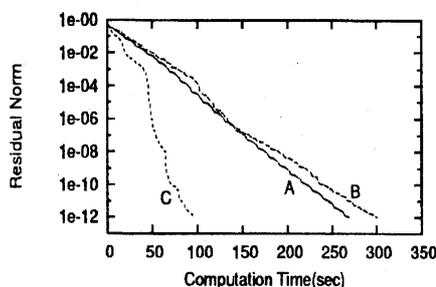
を 3 つの反復法で解き δs_l を求める必要がある。数値例 2 では, 式 (14) の反復終了条件を

$$\|q_l(s_l)\|_2 / \|q_0(s_0)\|_2 < 1.0 \times 10^{-12} \quad (16)$$

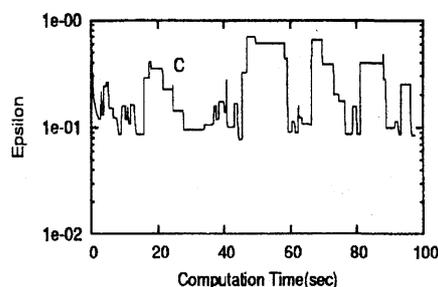
とし, 連立 1 次方程式 (15) の初期近似解と収束判定条件は数値例 1 と同じとする。最初に $Dh = 2^{-2}$ と設定して, 式 (16) で表される条件を満たすまでに要した式 (14) の反復回数を計測した。その結果, 式 (14) の反復回数は 5 回であった。従って, 式 (14) のおのおの反復回数について, 連立 1 次方程式 (15) の収束判定条件の式 (10) を満たすまでに要した計算時間と反復回数を表 2 に示す。ただし, 表 2 における “iter” とは連立 1 次方程式 (15) の反復回数を意味する。 m_{max} が

表 4 数値例 2 の計算結果 (time: 式 (14) の計算時間 (秒), iter: 式 (14) の反復回数)

算法	Dh							
	2^{-5}		2^{-4}		2^{-3}		2^{-2}	
	time	iter	time	iter	time	iter	time	iter
GMRES(10)	993.0	3	1365.0	4	1428.0	4	2056.0	5
GMRES(20)	893.0	3	1228.0	4	1277.0	4	1524.0	5
GMRES(30)	973.0	3	1306.0	4	1257.0	4	1638.0	5
GMRES(40)	920.0	3	1397.0	4	1405.0	4	1885.0	5
GMRES(50)	1148.0	3	1570.0	4	1546.0	4	2152.0	5
GMRES(≤ 10)	440.0	3	577.0	4	660.0	4	846.0	5
GMRES(≤ 20)	574.0	3	818.0	4	913.0	4	1229.0	5
GMRES(≤ 30)	654.0	3	915.0	4	996.0	4	1343.0	5
GMRES(≤ 40)	732.0	3	1046.0	4	1107.0	4	1437.0	5
GMRES(≤ 50)	745.0	3	1053.0	4	1069.0	4	1476.0	5
BC-GMRES(≤ 10)	440.0	3	625.0	4	439.0	4	617.0	5
BC-GMRES(≤ 20)	291.0	3	417.0	4	421.0	4	555.0	5
BC-GMRES(≤ 30)	306.0	3	419.0	4	429.0	4	570.0	5
BC-GMRES(≤ 40)	303.0	3	420.0	4	428.0	4	572.0	5
BC-GMRES(≤ 50)	297.0	3	420.0	4	438.0	4	570.0	5



(a) 残差ノルム vs. 計算時間

(b) ϵ vs. 計算時間図 3 数値例 2: 残差ノルムと ϵ の計算時間に対する変化の様子 ($Dh = 2^{-2}$, 漸化式 (14) の反復 3 回目), A: GMRES(20), B: GMRES(≤ 20), C: BC-GMRES(≤ 20)

10 であるときを除くと, BC-GMRES($\leq m_{max}$) 法は GMRES($\leq m_{max}$) 法と比べてその計算時間は 50%以下に短縮されている. ここで, 式 (14) の反復回数が 3 回目の場合について, 連立 1 次方程式 (15) を解いたときの計算時間に対する残差ノルムと BC-GMRES($\leq m_{max}$) 法の ϵ の振舞を 図 3 に示す. BC-GMRES(20) 法では 100 秒足らずで残差ノルムが収束しているが, 残りの 2 つの算法ではどちらも 300 秒近く計算時間がかかっている. そこで, リスタート周期の内訳を表 3 に示す. ただし, 一度も出現しなかったリスタート周期の値は表示していない. GMRES(≤ 20) 法では, リスタート周期が 20 未満でリスタートが行われたのは 48 回中 10 回だけであり, 零点分布によるリスタートが必ずしも有効に作用していない. 従って, このことが原因で残差ノルムの収束の振舞が GMRES(20) 法と同じになったと考えられる. ϵ に関しては, 反復の途中で動的に変化しているおり, ユーザが適切に設定する必要のないことを確認できる. また, この例でも BC-GMRES($\leq m_{max}$) 法の m_{max} が 20 のときはいずれもリスタート周期が m_{max} まで使われることはなく, リスタート周期は 12 までしか使われていないことが表 3 から確認できる. 従って, この例でも BC-GMRES($\leq m_{max}$) 法のリスタート周期の取り得る範囲は, GMRES($\leq m_{max}$) 法のそれよりも狭く, リスタート周期が m_{max} になる回数も少ない.

次に, Dh の値を変化させて $Dh = 2^{-2}$ の場合と同様の計算を行った. 表 4 には, 反復終了条件の式 (16) を満たすまでにかかった式 (14) の反復回数と計算時間を示す. ただし, 式 (14) の計算時

間は、式 (14) を計算する際にかかった連立 1 次方程式 (15) の計算時間の合計値として示す。例えば反復回数が 3 回の場合、式 (14) によって行われた反復回数が 3 回という意味なので、連立 1 次方程式 (15) が 3 回解かれたことになる。従って、この場合は連立 1 次方程式 (15) を 3 回解くのに要した合計の計算時間を掲載している。Dh を別の値に変化させた場合でも BC-GMRES($\leq m_{max}$) 法は有効に作用していることを確認できる。GMRES($\leq m_{max}$) 法と BC-GMRES($\leq m_{max}$) 法を比較したとき、計算時間は $Dh = 2^{-5}$, $m_{max} = 10$ の場合と同じ、 $Dh = 2^{-4}$, $m_{max} = 10$ の場合には 10% 程度 BC-GMRES($\leq m_{max}$) 法は余分にかかっている。しかし、それ以外の場合ではすべて BC-GMRES($\leq m_{max}$) 法の方が計算時間は少なく、特に m_{max} が 10 以外のとき GMRES($\leq m_{max}$) 法の計算時間の半分程度に短縮されている。従って、総合的に見ると、BC-GMRES($\leq m_{max}$) 法の方が GMRES($\leq m_{max}$) 法よりも性能が良いといえる。

5 結論

本稿では BC-GMRES($\leq m_{max}$) 法を提案した。このように、複数の基準からリスタートを行うことの長所は、1 つの基準からリスタートを行えなくとも、別の基準からリスタートを行えることである。5 章の数値実験の結果から、偏微分方程式の境界値問題を離散化して得られる連立 1 次方程式を解く場合について、BC-GMRES($\leq m_{max}$) 法の GMRES($\leq m_{max}$) 法と GMRES(m) 法に対する有効性を確認できた。従って、GMRES($\leq m_{max}$) 法のリスタート周期の決定は零点分布だけではなく、残差ノルムの収束状況からも判断することが望ましい。

参考文献

- [1] Saad, Y. and Schultz, M. K.: GMRES: A Generalized Minimal Residual Algorithm for Solving Nonsymmetric Linear Systems, *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, No. 7, pp. 856–869, (1986).
- [2] Schönauer, W.: *Scientific Computing on Vector Computers*, North Holland, (1987)
- [3] Joubert, W.: Lanczos Methods for the Solution of Nonsymmetric Systems of Linear Equations, *SIAM J. Matrix. Anal. Appl.*, Vol. 13, No. 3, pp. 928–943, (1992).
- [4] 津野, 野寺: 早期リスタートによる GMRES(m) 法の高速度化, *情報処理学会論文誌*, Vol. 40, No. 4, pp. 1760–1773, (1999).
- [5] Moriya, K. and Nodera, T.: The DEFLATED-GMRES(m, k) Method with Switching the Restart Frequency Dynamically, *Numer. Linear. Algebra. Appl.*, Vol. 7, pp. 569–584, (2000).