数理解析研究所講究録 1265 巻 2002 年 118-128

残差最小性に基づく Krylov 部分空間解法に対する可変的前処理

阿部 邦美 (Kuniyoshi ABE)* 張 紹良 (Shao-Liang ZHANG)†
* 理化学研究所情報環境室 Computer and Information Division, RIKEN
†東京大学大学院工学系研究科 Graduate School of Engineering, University of Tokyo

1 はじめに

偏微分方程式を有限要素法や差分法を用いて離散化することによって得られる，疎で非対称な係数行列をもつ連立一次方程式

$$Ax = b \tag{1.1}$$

を前処理付き Krylov 部分空間解法によって解くことを考える．

一般の前処理付き Krylov 部分空間解法のアルゴリズムでは，まず係数行列 A に近似的に等しく，$K^{-1}\boldsymbol{v}_k$ の計算が容易にできるような前処理行列 K を定め，反復の過程で $K^{-1}\boldsymbol{v}_k$ を直接的に計算する．このような従来の前処理では，各反復で常に同じ前処理行列が適用される．一方，可変的前処理は各反復で異なった前処理を適用することができる方法である [1]．この方法は，式 (1.1) を解く過程（外部反復と呼ぶ）と従来の $K^{-1}\boldsymbol{v}_k$ を計算する過程の代わりに各反復で $A^{-1}\boldsymbol{v}_k$ の近似を求める過程（内部反復と呼ぶ）から構成されている．内部反復では，$A^{-1}\boldsymbol{v}_k$ の近似を求めるために方程式 $A\boldsymbol{z} = \boldsymbol{v}_k$ を反復解法である所要精度を満たすように解く．このとき，各反復における所要反復回数が変化するため，異なった前処理が適用されたことになる．これが可変的前処理（Variable Preconditioning）と呼ばれる所似である．

可変的前処理を実装する場合，従来の前処理付き Krylov 部分空間解法のアルゴリズムで計算される $K^{-1}\boldsymbol{v}_k$ の代わりに $A^{-1}\boldsymbol{v}_k$ の近似を求めるように書き直せばよい．[1] では，可変的前処理が Generalized Conjugate Residual method（一般化共役残差法，GCR 法)[3] に適用されている．そして，GCR(m) 法の内部反復では，Successive Over-Relaxation method (SOR 法) [4, 13] によって $A^{-1}\boldsymbol{v}_k$ の近似が求められている．このように外部反復に GCR(m) 法，内部反復に SOR 法を用いたとき，従来の不完全 LU 分解 (Incomplete LU factorization, ILU)[6] による前処理よりも有効であることが報告されている [1]．さらに，方程式 $A\boldsymbol{z} = \boldsymbol{v}_k$ を解く際，様々な反復解法を適用したときの効果の違いについても報告がある．すなわち，SOR 法に加えて，Bi-CGSTAB 法（前処理：なし，ILU(0) 付き）[11]，GCR(m) 法（前処理：なし，ILU(0) 付き）を用いる可変的前処理が GCR(m) 法の内部反復に適用され，それらの収束性が比較されている．その結果，SOR 法を用いる可変的前処理がもっとも効果的であることがわかっている [2].

内部反復に使用する解法を変えたときの効果については明らかにされているので，次に外部反復に適用する解法を変えた場合の収束性，およびその効率を調べる必要がある．そこで，本論文では，外部解法として 3 つの残差最小性に基づく解法，すなわち GCR 法，Generalized Minimal RESidual method（GMRES 法）[9]，および GMRESR 法 [12] の中で提案された GMRES 法（van der Vorst version）を取り上げ，これらの解法のリスタート版 (Restarted version)，および切断版 (Truncated version) に SOR 法を用いる可変的前処理を実装したときの収束性の違いを比較する．

2　可変的前処理

本節では，[1] において提案された可変的前処理の概略，および可変的前処理付き GCR(m) 法のアルゴリズムとその収束定理について述べる．

2.1　可変的前処理の概略

従来の前処理では，まず K を定め，反復過程で $K^{-1}\boldsymbol{v}_k$ を計算する．一方，可変的前処理とは，前処理行列 K が係数行列 A と近似的に等しいという性質に着目して，$K^{-1}\boldsymbol{v}_k$ を計算する代わりに反復解法を用いて $A^{-1}\boldsymbol{v}_k$ の近似を求める方法である [1].

前処理行列 K が係数行列 A の近似となるように構築されるという性質に着目すれば，$K^{-1}\boldsymbol{v}_k$ は次のように近似される．

$$K^{-1}\boldsymbol{v}_k \approx A^{-1}\boldsymbol{v}_k.$$

このとき，K が A を十分に良く近似していると，言い換えれば $K^{-1}\boldsymbol{v}_k$ が $A^{-1}\boldsymbol{v}_k$ を十分に良く近似していると，前処理の効果は大きいと期待できる．したがって，$A^{-1}\boldsymbol{v}_k$ を求めることが理想であるが，一般には計算量の面で困難がある．

そこで，$A^{-1}\boldsymbol{v}_k$ の近似を求めることを考える．すなわち，反復解法を用いて適当な精度を満たすように方程式（2.1）を解くことによって $A^{-1}\boldsymbol{v}_k$ の近似を求める．

$$A\boldsymbol{z} = \boldsymbol{v}_k. \tag{2.1}$$

ここで，方程式（2.1）を解く場合，FGMRES 法 [7] や GMRESR 法 [12] のように一定回数の反復を行なうのではなく，精度と反復回数の両方を停止条件として設定する．すると，各反復で式（2.1）を解く際の所要反復回数が異なり，異なった前処理が適用できる．その停止条件を [1] に拠って記述する．ただし，式（2.1）を計算するとき，Krylov 部分空間解法を使用する場合は停止条件 1(A)，定常反復解法を使用する場合は停止条件 1(B) を用いる．また，$\boldsymbol{z}_k^{(l)}$ は k 回目の外部反復における内部反復の l 回目に求められた近似解を表す．

内部反復の停止条件：

条件 1，2 のいずれか一方の条件を満たした場合に 内部反復を停止する．

1. (A) $\|\boldsymbol{v}_k - A\boldsymbol{z}_k^{(l)}\|/\|\boldsymbol{v}_k\| \le \delta$

   (B) $\|\boldsymbol{z}_k^{(l)} - \boldsymbol{z}_k^{(l-1)}\|_\infty/\|\boldsymbol{z}_k^{(l)}\|_\infty \le \delta$

2. （内部反復における最大反復回数 l）$= N_{\max}$

2.2 可変的前処理付き GCR 法

可変的前処理を施した GCR 法のアルゴリズムを [1] に拠って記述する.

可変的前処理付き GCR 法のアルゴリズム：

Let $\boldsymbol{x}_0$ be an initial guess.

set $\boldsymbol{r}_0 = b - A\boldsymbol{x}_0$

roughly solve $A\boldsymbol{p} = \boldsymbol{r}_0$ using some iterative method to get $\boldsymbol{p}_0$

set $\boldsymbol{q}_0 = A\boldsymbol{p}_0$

for $k = 0, 1, \ldots$

$$\alpha_k = \frac{(\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{q}_k)}{(\boldsymbol{q}_k, \boldsymbol{q}_k)}$$

$\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{x}_k + \alpha_k \boldsymbol{p}_k$

$\boldsymbol{r}_{k+1} = \boldsymbol{r}_k - \alpha_k \boldsymbol{q}_k$

if $\| \boldsymbol{r}_{k+1} \|_2 \leq \varepsilon_{\mathrm{TOL}} \cdot \| \boldsymbol{r}_0 \|_2$ then exit

roughly solve $A\boldsymbol{z} = \boldsymbol{r}_{k+1}$ using some iterative method to get $\boldsymbol{z}_{k+1}$

for $i = 0, 1, \ldots, k$ (set $\boldsymbol{p}_k^{(0)} = \boldsymbol{q}_k^{(0)} = \boldsymbol{0}$)

$$\beta_i = -\frac{(A\boldsymbol{z}_{k+1}, \boldsymbol{q}_i)}{(\boldsymbol{q}_i, \boldsymbol{q}_i)}$$

$\boldsymbol{p}_k^{(i+1)} = \boldsymbol{p}_k^{(i)} + \beta_i \boldsymbol{p}_i$

$\boldsymbol{q}_k^{(i+1)} = \boldsymbol{q}_k^{(i)} + \beta_i \boldsymbol{q}_i$

end for

$\boldsymbol{p}_{k+1} = \boldsymbol{z}_{k+1} + \boldsymbol{p}_k^{(k+1)}$

$\boldsymbol{q}_{k+1} = A\boldsymbol{z}_{k+1} + \boldsymbol{q}_k^{(k+1)}$

end for

この可変的前処理付き GCR 法の残差ベクトル $\boldsymbol{r}_k$ について，次のような定理が成り立つ.

定理 1 $\boldsymbol{r}_k \neq \boldsymbol{0}$，かつ A が正則であるとき，$0 < \theta_k < 1$ に対して

$$\|\boldsymbol{r}_k - A\boldsymbol{z}_k\| \leq \theta_k \|\boldsymbol{r}_k\| \tag{2.2}$$

となるような $\boldsymbol{z}_k$ が存在するならば，$\|\boldsymbol{r}_{k+1}\| \leq \theta_k \|\boldsymbol{r}_k\|$ が成り立つ. □

3 残差最小性に基づく解法への適用

本節では，GCR 法の切断版である Orthomin(m) 法 [14]，Saad らによって提案された GMRES 法 [9]，および van der Vorst らによって提案された GMRES 法（van der Vorst version）[12] を取り上げ，それらのアルゴリズムに可変的前処理を適用する.

定理1から，可変的前処理付き GCR 法は，式（2.1）に適用する解法に依存することなく収束することがわかる．したがって，理論的には，式（2.1）を解くために如何なる解法を用いて良い．そこで，[2] では，式（2.1）を解くために SOR 法，Bi-CGSTAB 法（前処理：なし，ILU(0) 付き），GCR(m) 法（前処理：なし，ILU(0) 付き）が用いられた．その結果，SOR 法がもっとも有効に働いた．そこで，本節で取り上げる解法の内部反復には，もっとも効果が期待できる SOR 法を用いる可変的前処理を使用する．

3.1 Orthomin(m) 法への適用

GCR 法は反復回数の増加にともない，それまでのベクトル列を保存しなければならないため，演算量，記憶容量が増加する．そのため，m 回反復した後に得られた近似解をあらためて初期値として，再度，反復を行なうリスタート版，または反復過程で求められた最新の m 個のベクトルなどの情報を記憶しておく切断版が使用される．リスタート版は GCR(m) 法，切断版は Orthomin(m) 法として知られている．リスタート版である GCR(m) 法に可変的前処理を実装した場合の効果については，すでに報告がある [1]．そこで，切断版である Orthomin(m) 法に SOR 法を用いる可変的前処理を適用し，リスタート版と切断版の効果の違いを調べる．ここで，可変的前処理付き Orthomin(m) 法（切断版）の収束性は，GCR(m) 法（リスタート版）と同様，定理1によって保証される．

3.2 GMRES 法への適用

従来の前処理付き GMRES 法のアルゴリズムを [8, 9] に拠って記述する．ただし，H_k は式（3.2），(3.4) で計算される $h_{k+1,k}$ を要素にもつ $(k+1)\times k$ の Hessenberg 行列，Z_k は ベクトル $\boldsymbol{z}_k$ を列ベクトルにもつ行列，$\boldsymbol{e}_1$ は $(1,0,\ldots,0)^{\mathrm{T}}$ と表されるベクトル，さらに s_k, c_k は Givens 回転行列 Q_k で現れる成分とする．

GMRES 法のアルゴリズム：

Let $\boldsymbol{x}_0$ be an initial guess.

set $\boldsymbol{r}_0 = b - A\boldsymbol{x}_0,\quad \boldsymbol{u}_1 = \boldsymbol{r}_0/\|\boldsymbol{r}_0\|_2 \quad \gamma_1 = \|\boldsymbol{r}_0\|_2$

for $k = 1, 2, \ldots$

$\boldsymbol{z}_k = K^{-1}\boldsymbol{u}_k$

$\hat{\boldsymbol{u}}_{k+1} = A\boldsymbol{z}_k$

(3.1) for $i = 1, 2, \ldots, k$

(3.2) $h_{i,k} = (\hat{\boldsymbol{u}}_{k+1}, \boldsymbol{u}_i)$

$\hat{\boldsymbol{u}}_{k+1} = \hat{\boldsymbol{u}}_{k+1} - h_{i,k}\boldsymbol{u}_i$

(3.3) end for

(3.4) $h_{k+1,k} = \|\hat{\boldsymbol{u}}_{k+1}\|_2$

$$\boldsymbol{u}_{k+1} = \frac{\hat{\boldsymbol{u}}_{k+1}}{h_{k+1,k}}$$

$$
\begin{aligned}
&\text{for} \quad i = 1, 2, \ldots, k-1 \\
&\qquad h_{i,k} = c_i h_{i,k} - s_i h_{i+1,k} \\
&\qquad h_{i+1,k} = s_i h_{i,k} + c_i h_{i+1,k} \\
&\text{end for} \\
&\gamma_{k+1} = s_k \gamma_k \\
&\gamma_k = c_k \gamma_k \\
&h_{k,k} = \sqrt{h_{k+1,k}^2 + h_{k,k}^2} \\
&h_{k+1,k} = 0 \\
&\text{if } |\gamma_{k+1}| \le \varepsilon_{\mathrm{TOL}} \cdot \| \boldsymbol{r}_0 \|_2 \ \text{ then} \\
&\text{Compute } \ \boldsymbol{y}_k = \min \| \|\boldsymbol{r}_0\|_2 \boldsymbol{e}_1 - H_k \boldsymbol{y} \|_2 \\
&\boldsymbol{x}_k = \boldsymbol{x}_0 + Z_k \boldsymbol{y}_k \\
&\text{end if and exit} \\
\text{end for}&
\end{aligned}
\tag{3.5}
$$

従来の前処理付き GMRES 法のアルゴリズムでは前処理のために $K^{-1}\boldsymbol{u}_k$ を計算するので，$A^{-1}\boldsymbol{u}_k$ の近似を求めるように書き直せば可変的前処理が適用できる．このとき得られたアルゴリズムは FGMRES 法 [7] と同一のアルゴリズムとなる．しかし，内部反復では，[7] のように Krylov 部分空間解法（主に GMRES 法）を用いて一定回数の反復を行なうのではなく，SOR 法と 2節で述べた停止条件を使用する．したがって，FGMRES 法とは異なる基底の計算，また各反復で異なった前処理の適用が可能となる．さらに，前処理のために解く方程式の右辺項は残差ベクトル $\boldsymbol{r}_k$ ではないためにその収束性は定理 1によって保証できないが，FGMRES 法の収束定理が利用できる．そこで，SOR 法を用いる可変的前処理を施した GMRES 法のリスタート版，および切断版の効果を調べる．

ところで，切断版のアルゴリズムでは，通常，最新の m 個のベクトルなどの情報しか記憶されないため，前述のアルゴリズムでは近似解を構成できない．したがって，近似解を漸化的に構成できるようなアルゴリズムとして書き換えなければならない．そのようなアルゴリズムは，Direct Quasi-GMRES (DQGMRES) 法 [8, 10] として知られており，式 (3.1) から式 (3.3) までの間，および式 (3.5) 以下を次のように書き換えることによって，近似解が構成される．

$$
\begin{aligned}
&\quad\vdots \\
&\text{for} \quad i = \min\{1, k-m+1\}, \ldots, k \\
&\qquad h_{i,k} = (\hat{\boldsymbol{u}}_{k+1}, \boldsymbol{u}_i) \\
&\qquad \hat{\boldsymbol{u}}_{k+1} = \hat{\boldsymbol{u}}_{k+1} - h_{i,k} \boldsymbol{u}_i \\
&\text{end for} \\
&\quad\vdots \\
&\boldsymbol{p}_k = (\boldsymbol{z}_k - \sum_{i=m-k+1}^{k-1} h_{i,k} \boldsymbol{p}_i)/h_{k,k} \quad (\text{for } \ i \le 0 \ \text{ set } \ h_{i,k}\boldsymbol{p}_i = 0)
\end{aligned}
$$

$$\boldsymbol{x}_k = \boldsymbol{x}_{k-1} + \gamma_k \boldsymbol{p}_k$$
if $|\gamma_{k+1}| \leq \varepsilon_{\mathrm{TOL}} \cdot \| \boldsymbol{r}_0 \|_2$ then exit
end for

3.3 GMRES 法（van der Vorst version）への適用

GMRES 法（van der Vorst version）は，GMRESR 法 [12] が提案されたときに導出されたアルゴリズムで，残差ベクトルや解ベクトルを漸化的に計算できる点で Saad らによって提案された GMRES 法 [9] とは異なる．そのアルゴリズムを [12] に拠って記述する．

GMRES 法（van der Vorst version）のアルゴリズム：

Let $\boldsymbol{x}_0$ be an initial guess.
set $\boldsymbol{r}_0 = b - A\boldsymbol{x}_0$
for $k = 0, 1, \ldots$
$\quad \boldsymbol{z}_k^{(0)} = K^{-1}\boldsymbol{r}_k$
$\quad \boldsymbol{q}_k^{(0)} = A\boldsymbol{z}_k^{(0)}$
$\quad$ for $i = 0, 1, \ldots, k-1$
$\qquad \alpha_i = (\boldsymbol{q}_k, \boldsymbol{q}_k^{(i)})$
$\qquad \boldsymbol{q}_k^{(i+1)} = \boldsymbol{q}_k^{(i)} - \alpha_i \boldsymbol{q}_i$
$\qquad \boldsymbol{z}_k^{(i+1)} = \boldsymbol{z}_k^{(i)} - \alpha_i \boldsymbol{z}_i$
$\quad$ end for
$\quad \boldsymbol{q}_k = \boldsymbol{q}_k^{(k)} / \|\boldsymbol{q}_k^{(k)}\|_2$
$\quad \boldsymbol{z}_k = \boldsymbol{z}_k^{(k)} / \|\boldsymbol{q}_k^{(k)}\|_2$
$\quad \beta_k = (\boldsymbol{q}_k, \boldsymbol{r}_k)$
$\quad \boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{x}_k + \beta_k \boldsymbol{z}_k$
$\quad \boldsymbol{r}_{k+1} = \boldsymbol{r}_k - \beta_k \boldsymbol{q}_k$
$\quad$ if $\| \boldsymbol{r}_{k+1} \|_2 \leq \varepsilon_{\mathrm{TOL}} \cdot \| \boldsymbol{r}_0 \|_2$ then exit
end for

GMRES 法（van der Vorst version）のアルゴリズムでは，前処理のために $K^{-1}\boldsymbol{r}_k$ を計算するので，GCR 法と同様，$A^{-1}\boldsymbol{r}_k$ の近似を求めるように書き直せば可変的前処理が適用できる．そのとき得られたアルゴリズムは GMRESR 法 [12] と同一のものとなる．しかし，内部反復では，[12] のように GMRES 法を用いて一定回数の反復を行なうのではなく，SOR 法と 2節で述べた停止条件を使用する．したがって，GMRESR 法とは異なる基底の計算，また各反復で異なった前処理の適用が可能となる．さらに，前処理のために解く方程式の右辺項は残差ベクトル $\boldsymbol{r}_k$ であるため，その収束性は定理 1によって保証できる．そこで，SOR 法を用いる可変的前処理を施した GMRES 法（van der Vorst version）のリスタート版，および切断版の効果を調べる．

4 数値実験

4.1–4.2小節で取り上げる偏微分方程式の離散化から得られる行列を係数にもつ連立一次方程式を GCR(m) 法（リスタート版），Orthomin(m) 法（切断版），GMRES(m) 法のリスタート版，および切断版，GMRES(m) 法（van der Vorst version）のリスタート版，および切断版の 6 種類のアルゴリズムによって解き，それらの収束性，および計算時間の比較を行なう．ただし，これらの前処理には SOR 法を用いる可変的前処理を使用する．

数値実験では，PC-AT 互換機（Pentium III 800MHz）において富士通 Fortran コンパイラの倍精度演算によって実行された．さらに，外部反復において，初期ベクトル $\boldsymbol{x}_0 = \boldsymbol{0}$，収束判定条件 $\epsilon_{\mathrm{TOL}} = 10^{-12}$ を採用した．

4.1 モデル問題 1

正方領域 $\Omega = (0,1) \times (0,1)$ で全周 Dirichlet 境界条件を課した次の偏微分方程式の離散近似解を求める．

$$-u_{xx} - u_{yy} + \gamma(xu_x + yu_y) + \beta u = f(x,y). \tag{4.1}$$

右辺項は，解 $\hat{\boldsymbol{x}} = (1,\cdots,1)$ を与えて $\boldsymbol{b} = A\hat{\boldsymbol{x}}$ と計算する [7]．この境界値問題に対して格子幅を $h = \frac{1}{201}$，$\frac{1}{401}$ $(M+1 = \frac{1}{h})$ と変えて，x, y 方向ともに等間隔で離散近似して得られた連立一次方程式を GCR(m) 法（リスタート版），Orthomin(m) 法（切断版），GMRES(m) 法のリスタート版，および切断版，GMRES(m) 法（van der Vorst version）のリスタート版，および切断版に SOR 法を用いる可変的前処理を適用して解く．ただし，解法のリスタート係数，切断係数 m は，それぞれ 15（GMRES 法は 16）とした．さらに，SOR 法の加速パラメータは 1.9 とし，内部反復における停止条件は $\delta = 10^{-1.75}$，$N_{\max} = 60$ を採用した．

式（4.1）のパラメータを $\gamma = 10, \beta = -100$，分割数を $M = 200$，400 と変化させて実験した結果を Table 1 に示す．従来の ILU(0) 前処理を用いた場合には停滞し，収束しなかった．

[考察]

はじめに，リスタート版と切断版の収束性の違いを考察する．分割数が小さい（$M = 200$）場合，すべての解法が収束する．このとき，リスタート版より切断版の方が反復回数は少なく，また計算時間も短い．ところが，分割数が大きい（$M = 400$）場合，切断版の残差ノルムは停滞する，またはアルゴリズムの中で計算された残差ベクトル $\boldsymbol{r}_k$ の相対残差ノルムが収束しているにもかかわらず，十分な精度の解を求めることができない．一方，リスタート版は十分な精度の解を求めることができる．したがって，リスタート版に可変的前処理を適用した方がロバストなことがわかる．

次に，それぞれの解法のリスタート版について考察を行なう．分割数が小さい（$M = 200$）場合，各解法のリスタート版の所要反復回数，計算時間はほぼ同じである．分割数が大きい（$M = 400$）場合，GMRES(m) 法（van der Vorst version）リスタート版の計算時間がもっとも短く，GMRES(m) 法リスタート版がもっとも計算時間を必要とする．また，GCR(m)

Table 1. SOR 法を用いる可変的前処理（停止条件は $\delta = 10^{-1.75}$，$N_{\max} = 60$）を適用した GCR 法，GMRES 法，GMRES 法（van der Vorst version）のリスタート版，切断版の所要反復回数，計算時間，および真の残差 $(\log_{10}(\|\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_k\|_2/\|\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_0\|_2))$.

内部反復に適用する解法	$M = 200$			$M = 400$		
	反復回数	計算時間	真の残差	反復回数	計算時間	真の残差
GCR (m) （リスタート版）	26	24.2 sec	−12.6	146	545.7 sec	−12.0
Orthomin (m) （切断版）	20	17.7 sec	−12.0	Stag.	∞	−4.4
GMRES(m) リスタート版	28	23.2 sec	−12.5	177	553.7 sec	−12.0
GMRES(m) 切断版	22	18.3 sec	−12.6	237	816.0 sec	−4.5
GMRES(m)-V リスタート版	26	23.9 sec	−12.7	146	520.8 sec	−12.0
GMRES(m)-V 切断版	20	18.0 sec	−12.0	Stag.	∞	−4.4

GMRES(m)-V は GMRES 法 van der Vorst version を意味する.

法（リスタート版）と GMRES(m) 法（van der Vorst version）リスタート版の所要反復回数はほぼ等しく，GMRES(m) 法リスタート版は他の解法より多い.

4.2 モデル問題 2

正方領域 $\Omega = (0,1) \times (0,1)$ で全周 Dirichlet 境界条件を課した次の偏微分方程式の離散近似解を求める.

$$-u_{xx} - u_{yy} + D\left\{(y - \frac{1}{2})u_x + (x - \frac{1}{3})(x - \frac{2}{3})u_y\right\} - 43\pi^2 u = f(x,y). \tag{4.2}$$

右辺項は，厳密解 $u(x,y) = 1 + xy$ を与えて計算する [5]. これらの境界値問題に対して格子幅を $h = \frac{1}{129}$ とし，x, y 方向ともに等間隔で離散近似して得られた連立一次方程式を GCR(m) 法（リスタート版），Orthomin(m) 法（切断版），GMRES(m) 法のリスタート版，および切断版，GMRES(m) 法（van der Vorst version）のリスタート版，および切断版に SOR 法を用いる可変的前処理を適用して解く．ただし，解法のリスタート係数，切断係数 m は，それぞれ 40（GMRES 法は 41）とした．さらに，SOR 法の加速パラメータは 1.9 とし，内部反復における停止条件は $\delta = 10^{-1.0}$，$N_{\max} = 60$ を採用した.

式 (4.2) のパラメータを $Dh = 2^{-1}, 2^{-2}$ として実験した結果を Table 2に示す．従来の ILU(0) 前処理を用いた場合には停滞し，収束しなかった.

[考察]

はじめに，リスタート版と切断版の収束性の違いを考察する．パラメータが $Dh = 2^{-2}$ の場合，各解法のリスタート版は収束する．一方，GMRES(m) 法（van der Vorst version）切断版は収束しない．また，Orthomin(m) 法（切断版），GMRES(m) 法切断版はアルゴリズムの中で計算された残差ベクトル $\boldsymbol{r}_k$ の相対残差ノルムが収束しているにもかかわらず，十分な精度の解を求めることができない．さらに，パラメータが $Dh = 2^{-1}$ の場合，各解法のリスタート版の残差ノルムは収束する一方，切断版は停滞してしまう．したがって，リスタート版に可変的前処理を適用した方がロバストなことがわかる.

Table 2. SOR 法を用いる可変的前処理（停止条件は $\delta = 10^{-1.0}$，$N_{\max} = 60$）を適用した GCR 法，GMRES 法，GMRES 法（van der Vorst version）のリスタート版，切断版の所要反復回数，計算時間，および真の残差 ($\log_{10}(\|\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_k\|_2/\|\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_0\|_2)$).

内部反復に適用する解法	$Dh = 2^{-2}$			$Dh = 2^{-1}$		
	反復回数	計算時間	真の残差	反復回数	計算時間	真の残差
GCR (m)（リスタート版）	80	33.2 sec	−11.7	81	36.4 sec	−12.1
Orthomin (m)（切断版）	72	33.1 sec	−6.5	Stag.	∞	−5.1
GMRES(m) リスタート版	81	25.3 sec	−12.2	80	28.5 sec	−12.2
GMRES(m) 切断版	120	41.4 sec	−8.0	Stag.	∞	−6.0
GMRES(m)-V リスタート版	119	44.9 sec	−11.7	81	36.8 sec	−12.1
GMRES(m)-V 切断版	Stag.	∞	−6.5	Stag.	∞	−5.1

GMRES(m)-V は GMRES 法 van der Vorst version を意味する.

次に，それぞれの解法のリスタート版について考察を行なう．パラメータが $Dh = 2^{-2}$ の場合，GCR(m) 法（リスタート版）と GMRES(m) 法リスタート版の所要反復回数はほぼ同じである．計算時間は，反復 1 回当たりの計算量が少ない GMRES(m) 法リスタート版が GCR(m) 法（リスタート版）より短い．一方，GMRES(m) 法（van der Vorst version）リスタート版は他の解法と比べて所要反復回数，計算時間ともに多く必要とする．また，パラメータが $Dh = 2^{-1}$ の場合，すべての解法の所要反復回数はほぼ同じで，GMRES(m) 法リスタート版の計算時間がもっとも短い．

さらに，内部反復における停止条件を $\delta = 10^{-0.95}$，$N_{\max} = 60$ と変えて考察を行なう．そのときの所要反復回数，計算時間，および真の残差を Table 3に示す．

Table 3. SOR 法を用いる可変的前処理（停止条件は $\delta = 10^{-0.95}$，$N_{\max} = 60$）を適用した GCR 法，GMRES 法，GMRES 法（van der Vorst version）のリスタート版，切断版の所要反復回数，計算時間，および真の残差 ($\log_{10}(\|\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_k\|_2/\|\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_0\|_2)$).

内部反復に適用する解法	$Dh = 2^{-2}$			$Dh = 2^{-1}$		
	反復回数	計算時間	真の残差	反復回数	計算時間	真の残差
GCR (m)（リスタート版）	77	31.6 sec	−11.7	80	35.9 sec	−12.0
Orthomin (m)（切断版）	Stag.	∞	−6.5	Stag.	∞	−5.1
GMRES(m) リスタート版	79	25.0 sec	−12.1	114	39.5 sec	−12.1
GMRES(m) 切断版	Stag.	∞	−8.2	Stag.	∞	−2.9
GMRES(m)-V リスタート版	Stag.	∞	−8.9	81	36.4 sec	−12.0
GMRES(m)-V 切断版	Stag.	∞	−6.5	Stag.	∞	−5.1

GMRES(m)-V は GMRES 法 van der Vorst version を意味する.

[考察]

はじめに，リスタート版と切断版の収束性の違いを考察する．パラメータが $Dh = 2^{-2}$，2^{-1} の両ケースにおいて，リスタート版は収束する一方で，切断版は停滞する．ただし，パラメータが $Dh = 2^{-2}$ の場合の GMRES(m) 法（van der Vorst version）リスタート版は収

束しない．したがって，リスタート版に可変的前処理を適用した方がロバストなことがわかる．

次に，それぞれの解法のリスタート版について考察を行なう．パラメータが $Dh = 2^{-2}$ の場合，GMRES(m) 法（van der Vorst version）リスタート版は収束しない．また，GCR(m) 法（リスタート版）と GMRES(m) 法リスタート版はほぼ同じ所要反復回数で収束し，計算時間は GCR(m) 法（リスタート版）より GMRES(m) 法リスタート版の方が短い．したがって，GMRES(m) 法（van der Vorst version）リスタート版より GCR(m) 法（リスタート版），GMRES(m) 法リスタート版に可変的前処理を適用した方がロバストであると言える．さらに，パラメータが $Dh = 2^{-1}$ の場合，GCR(m) 法（リスタート版）と GMRES(m) 法（van der Vorst version）リスタート版の所要反復回数，および計算時間はほぼ等しく，これら 2 つの解法より GMRES(m) 法リスタート版の所要反復回数，計算時間は多い．したがって，GMRES(m) 法リスタート版は GCR(m) 法（リスタート版）より計算時間を必要とする可能性がある．また，停止条件が $\delta = 10^{-1.0}$ の場合と比較して，所要反復回数，および計算時間が大幅に増加しているので，内部反復の停止条件に影響され易いと言える．

5 まとめ

6 種類の残差最小性に基づく解法を取り上げ，それらの解法に可変的前処理を適用した場合の収束性，およびその効率を調べた．すなわち，GCR 法（Orthomin(m) 法を含む），GMRES 法，および GMRES 法（van der Vorst version）のリスタート版，切断版に SOR 法を用いる可変的前処理を適用した場合の効果を調べた．

リスタート版と切断版の収束性に着目すると，リスタート版が収束するのに対して，切断版は停滞する，または十分な精度の解を求めることができないことが多い．すなわち，切断版よりリスタート版に可変的前処理を適用した方がロバストなことがわかる．ただし，容易な問題（4.1小節モデル問題 1 で $M = 200$ の場合）に対してはリスタート版より切断版の方が速く収束することもある．

さらに，それぞれの解法のリスタート版の収束性に着目すると，GMRES(m) 法（van der Vorst version）リスタート版は収束しない，また他の 2 つ解法より多くの所要反復回数，計算時間を必要とする．したがって，GCR(m) 法（リスタート版），GMRES(m) 法リスタート版は GMRES(m) 法（van der Vorst version）リスタート版よりロバスト，または効率的であると判断できる．また，GCR(m) 法（リスタート版）と GMRES(m) 法リスタート版を比較すると，多くの場合，反復 1 回当たりの計算量が少ない GMRES(m) 法リスタート版の方がが短い計算時間で収束する．しかし，内部反復の停止条件を変えた場合，GMRES(m) 法リスタート版は GCR(m) 法（リスタート版）より多くの計算時間を必要とすることがある．したがって，GMRES(m) 法リスタート版は速く収束することが期待できる一方，内部反復の停止条件の設定によっては GCR(m) 法（リスタート版）より所要反復回数，計算時間が増加する可能性をもつ．

参考文献

[1] 阿部邦美, 張紹良, 長谷川秀彦, 姫野龍太郎, SOR 法を用いた可変的前処理付き一般化

共役残差法, 日本応用数理学会論文誌, **11**(2001), 11–24.

[2] 阿部邦美, 張紹良, 長谷川秀彦, 姫野龍太郎, GCR 法に対する可変的前処理法の性能評価, 京都大学数理解析研究所講究録, **1198**(2001), 195–203.

[3] EISENSTAT, S. C., ELMAN, H. C. and SCHULTZ, M. H., Variational iterative methods for nonsymmetric systems of linear equations, *SIAM J. Numer. Anal.*, **20**(1983), 345-357.

[4] GOLUB, H. G. and VAN LOAN, F. C., *Matrix Computations*, Third ed., The Johns Hopkins University Press, Baltimore and London, 1996.

[5] JOUBERT, W. D., Lanczos Methods for the Solution of Nonsymmetric Systems of Linear Equations, *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, **13** (1992), 926-943.

[6] MEIJERINK, J. A. and VAN DER VORST, H. A., An Iterative Solution Method for Linear Systems of which the Coefficient Matrix is a Symmetric M-matrix, *Mathematics of Computation*, **31** (1977), 148-162.

[7] SAAD, Y., A Flexible Inner-outer Preconditioned GMRES Algorithm, *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, **14** (1993), 461-469.

[8] SAAD, Y., *Iterative Methods for Sparse Linear Systems*, PWS, Boston, 1996.

[9] SAAD, Y. and SCHULTZ, M. H., GMRES: A Generalized Minimal Residual Algorithm for Solving Nonsymmetric Linear Systems, *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, **7** (1986), 856-869.

[10] SAAD, Y. and WU, K., DQGMRES: A Direct Quasi-minimal Residual Algorithm Based on Incomplete Orthogonalization, *Numerical Linear Algebra with Applics.*, **3** (1996), 329-343.

[11] VAN DER VORST, H. A., Bi-CGSTAB:A fast and smoothly converging variant of Bi-CG for the solution of nonsymmetric linear systems, *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, **13**(1992), pp.631-644.

[12] VAN DER VORST, H. A. and VUIK, C., GMRESR: A family of Nested GMRES Methods, *Numer. Linear Algebra with Applics.*, **1** (1994), 369-386.

[13] VARGA, R., *Matrix Iterative Analysis*, Prentice-Hall, New Jersey, 1962.

[14] VINSOM, P. K. W., Orthomin, An Iterative Method for Solving Sparse Sets of Simultaneous Linear Equations, in *Proc. Fourth Symposium on Reservoir Simulation*, Society of Petroleum Engineers of AIME, (1976), 149-159.