

## リスタート周期を動的に変える GMRES( $m$ ) 法

羽 部 充† 野 寺 隆††

大型で疎な非対称行列を係数とする連立1次方程式  $Ax = b$  の解法の一つに GMRES( $m$ ) 法がある。通常 GMRES( $m$ ) 法のリスタート周期  $m$  は固定した値で計算するのだが、Sosonkina ら<sup>5)</sup> は、残差ノルムの収束対応してリスタート周期を変化させる Adaptive GMRES( $m, itmax$ ) 法を提案した。本稿では、Adaptive GMRES( $m$ ) 法を基本算法として、適応的にリスタート周期を決定する Adaptive GMRES( $m, l, itmax$ ) 法を提案し、数値実験によって有効性を示す。

### GMRES( $m$ ) method with varying its restart frequency adaptively

MITSURU HABU† and TAKASHI NODERA††

The restarted GMRES( $m$ ) algorithm is one of the most popular iterative procedures for the solution of large linear systems of equations  $Ax = b$  with nonsymmetric and sparse coefficient matrix. An adaptive GMRES( $m, itmax$ ) procedure is proposed by Sosonkina etc.<sup>5)</sup> to choose the restart frequency according to the convergence and work requirement. This paper presents a new adaptive GMRES( $m, l, itmax$ ) algorithm which based on the adaptive GMRES( $m, itmax$ ) algorithm. This algorithm seeks the Adaptive GMRES( $m, itmax$ ) to determine restart frequency  $m$  adaptively at each cycle. Numerical experiments show that this modified approach gives a more robust scheme than the original algorithm.

#### 1. はじめに

偏微分方程式の境界値問題を数値的に解くことは様々な分野において重要である。通常そのような問題は有限要素法や有限差分法で離散化することによって得られる連立1次方程式

$$Ax = b \quad (1)$$

を解くことになる。ただし、係数行列  $A$  は正則行列とする。  $A$  が対称行列の場合には、CG 法<sup>1)</sup> が有効である。しかし、係数行列  $A$  が非対称の場合は GMRES 法がよく利用される算法の一つで、一般にはリスタート版である GMRES( $m$ ) 法が用いられる。GMRES( $m$ ) 法のリスタート周期  $m$  はある一定の値をとるが、近年、 $m$  を適応的に変化させる方法がいくつか提案されている<sup>5), 11)</sup>。

第2節では、GMRES 法と GMRES( $m$ ) 法について述べる。次に、第3節では、Sosonkina らが提案した Adaptive GMRES( $m, itmax$ ) 法を説明する。第4節では、Adaptive GMRES( $m, l, itmax$ ) 法を提案する。

† 慶應義塾大学大学院理工学研究科

Graduate School of Science and Technology, Keio University

†† 慶應義塾大学理工学部

Faculty of Science and Technology, Keio University

最後に第5節において、数値実験によって各算法を比較検証し、次の節で結論を述べる。

#### 2. GMRES 法と GMRES( $m$ ) 法について

この節では GMRES 法と GMRES( $m$ ) 法の算法と、その特性について簡単に述べる。

##### 2.1 GMRES 法

1986 年に Saad ら<sup>2)</sup> によって提案された GMRES 法は、クリロフ部分空間反復解法の一つで、大型で疎な非対称行列を係数行列とする連立1次方程式の解法である。初期近似解を  $x_0$ 、初期残差ベクトルを  $r_0 = b - Ax_0$  とすると、すなわち、 $i$  回目の反復における残差ノルムは次式で決定できる。

$$\min_{z \in K_i} \|b - A(x_0 + z)\|_2 = \min_{z \in K_i} \|r_0 - Az\|_2 \quad (2)$$

ただし、 $z$  はクリロフ部分空間  $K_i$  の正規直交系  $\{v_1, v_2, \dots, v_i\} = V_i$  によって  $z = V_i y$  と表され、 $y$  は残差ノルムが最小になるように選ばれる。よって、式(2)は、以下の最小2乗問題に帰着できる

$$\begin{aligned} J(y) &= \|\beta v_1 - AV_i y\|_2 \\ &= \|V_{i+1}(\beta e_1 - \bar{H}_i y)\|_2 \\ &= \|\beta e_1 - \bar{H}_i y\|_2 \end{aligned} \quad (3)$$

ただし、 $\beta = \|r_0\|_2$  である。式(3)は、 $\bar{H}_i$  をギブンス

```

choose  $x_0$ ,
 $r_0 := b - Ax_0$ ;
 $\beta := \|r_0\|$ ;  $v_1 := r_0/\beta$ ;
 $m_1 := 1$ ;  $m_2 := m$ ;
 $k := 0$ ;
start
for  $i := m_1$  to  $m_2$  do
begin
 $\hat{v} := Av_i$ ;
for  $j := 1$  to  $i$  do
begin
 $h_{j,i} := \hat{v}^T v_j$ ;
 $\hat{v} := \hat{v} - h_{j,i} v_j$ ;
end
 $h_{i+1,i} := \|\hat{v}\|$ ;
 $v_{i+1} := \hat{v}/h_{i+1,i}$ ;
compute  $y_i := \min_y \| \beta e_1 - \hat{H}_i y \|$ ;
if  $\|b - Ax_i\| \leq tol$  then
stop iteration
endif
end
 $test := m_2 \times \frac{\log [tol / \|r^{new}\|]}{\log [\|r^{new}\| / (1.0 + 10u) \|r^{old}\|]}$ ;
if  $m_2 \leq mmax - p$  and
 $test \geq smv \times (itmax - itno)$  then
 $m_1 := m_2 + 1$ ;
 $m_2 := m_2 + p$ ;
goto start
endif
 $x_0 := x_{m_2}$ ;  $r_0 := b - Ax_0$ ;
 $\beta := \|r_0\|$ ;  $v_1 := r_0/\beta$ ;
 $m_1 := 1$ ;  $k := k + 1$ ;
if  $k = l$  then
 $m_2 := m$ ;  $k := 0$ ;
goto start

```

図1 A-GMRES( $m, l, itmax$ )法の算法

回転行列を用いてQR分解することによって解くことができる。こうして得られた  $y$  を用いて、 $i$  回目の反復における GMRES 法の近似解  $x_i$  は、 $x_i = x_0 + V_i y$  で求められることになる。

## 2.2 GMRES( $m$ ) 法

GMRES 法は近似解  $x_i$  を計算するために、正規直交系  $V_i$  と上ヘッセンベルグ行列  $\hat{H}_i$  を保存しておかなければならない。そのため反復回数が増えるにつれ、記憶容量と計算量が増加していくので、そのままでは実用的ではない。そこで実際には、 $m$  回の反復ごとにその時点での近似解  $x_m$  を初期近似解  $x_0$  として再出発する GMRES( $m$ ) 法が使われている。ただし、 $m$  はリスタート周期と呼ばれる。この  $m$  の値を動的に変化させる方法を第3節で述べる。

## 3. Adaptive GMRES( $m, itmax$ ) 法

1998年に Sosonkina ら<sup>5)</sup>によって提案された Adap-

tive GMRES( $m, itmax$ ) 法 (A-GMRES( $m, itmax$ ) 法と呼ぶ) は、GMRES( $m$ ) 法のリスタート周期を適応的に変化させる方法の一つである。すなわち、残差ノルムの縮小の割合に応じてリスタート周期を増加させることにより、収束までの計算時間を短縮させる方法である。A-GMRES( $m, itmax$ ) 法は、次式で収束までのおおよその反復回数  $test$  を見積もり、その値によってリスタート周期を増加させるかどうかを決定する算法である。

$$test = m \times \frac{\log [tol / \|r^{new}\|]}{\log [\|r^{new}\| / (1.0 + 10u) \|r^{old}\|]} \quad (4)$$

ただし、 $r^{new}$  はその時点での残差ベクトル、 $r^{old}$  は一つ前のリスタート時の残差ベクトル、 $tol$  は収束判定条件、 $u$  は計算機イブシロンの値である。10u は停滞によって残差ベクトルのノルムの縮小がごくわずかで、計算精度によっては  $\|r^{new}\| = \|r^{old}\|$  とみなされる場合に分母が0になるのを防ぐための処置である。すなわち、リスタートをした時点で式(4)の値を参照し、残差ノルムの縮小が不十分で、最大反復回数までに収束できないと判断した場合には、残差ノルムが十分に縮小するまでリスタート周期を増加させる。また、反復開始時の初期リスタート周期を小さくすることで、反復を繰り返しながら次第にリスタート周期が増加することになる。よって、この処理をすることにより、ある程度ではあるが、問題に応じたリスタート周期をとることができる。A-GMRES( $m, itmax$ ) 法はリスタート周期を減らす処置がないために問題によっては有効でない場合がある。そこで次節では、A-GMRES( $m, itmax$ ) 法を基にリスタート周期を増減させる方法を提案する。

## 4. リスタート周期の増減過程を持つ GMRES( $m$ ) 法

GMRES( $m$ ) 法はリスタート周期が大きいほど1回の反復にかかる計算時間が増加するために、問題によっては小さなリスタート周期の方が速く収束する場合がある。A-GMRES( $m, itmax$ ) 法は、リスタート周期を減らす過程がないため、一旦リスタート周期を増加させた場合、収束するまでそれ以上のリスタート周期で反復することになる。しかし、リスタート周期を増加させた後、式(4)による見積もりが極端に小さくなった場合には、小さなリスタート周期の方が速く収束する可能性がある。そこで我々は Adaptive GMRES( $m, l, itmax$ ) 法 (A-GMRES( $m, l, itmax$ ) 法と呼ぶ) を提案する。A-GMRES( $m, l, itmax$ ) 法はリスタート周期を動的に変化させる過程を持つ GMRES( $m$ ) 法である。ただし、 $l$  はある整数である。実際にはリスタート周期の増加過程と減少過程は分かれており、リスタート周期  $m$  を増やす過程は A-GMRES( $m, itmax$ ) 法と同じで

表 1 Origin 2000 の仕様

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

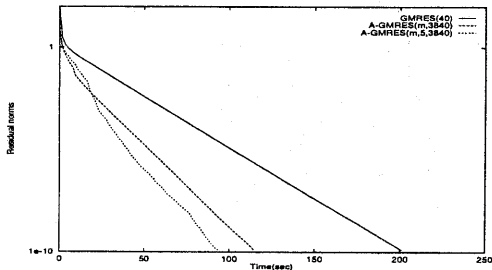


図 2 数値例 1 ( $\alpha = 1000$ ): 計算時間に対する残差ノルム

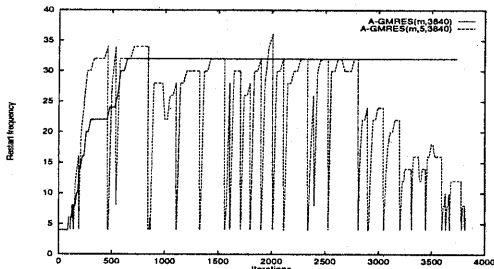


図 3 数値例 1 ( $\alpha = 1000$ ): 反復回数に対するリスタート周期

ある。リスタート周期  $m$  を減らす過程は  $l$  に依存しており、 $l$  回毎のリスタート時に初期リスタート周期に戻す処置を行なう。すなわち  $A-GMRES(m, l, itmax)$  法は、通常は  $A-GMRES(m, itmax)$  法と全く同じであるが、リスタートの回数が  $l$  の倍数になった時に、 $A-GMRES(m, itmax)$  法のリスタート周期を初期リスタート周期に戻す方法である。増やす過程は  $A-GMRES(m, itmax)$  法と同じであるので、大きなリスタート周期が必要と判断した場合にはすぐにリスタート周期を増加させることができる。また、式 (4) による見積もりが小さい場合には、小さなリスタート周期のままで反復を続けることができる。この  $l$  の値を 1 とした場合にはリスタート毎に初期リスタート周期に戻るため、収束の急激なふるまいの変化に最も速く対応できる可能性がある。ここで、 $A-GMRES(m, l, itmax)$  法の算法を図 1 に示す。

## 5. 数値実験

この節では、 $GMRES(m)$  法、 $A-GMRES(m, itmax)$  法、 $A-GMRES(m, l, itmax)$  法の数値実験による比較を行う。

### 5.1 Origin 2000 での実装

本稿で述べた算法を並列計算機 Origin 2000 上で実装し実行した。並列化した部分は、次の四つである。

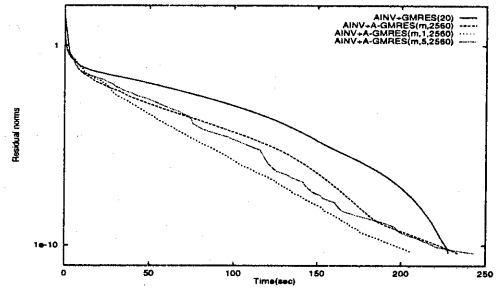


図 4 数値例 2 ( $Dh = 2^{-6}$ ): 計算時間に対する残差ノルム

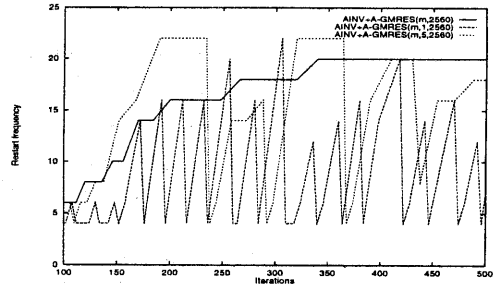


図 5 数値例 2 ( $Dh = 2^{-6}$ ): 反復回数に対するリスタート周期

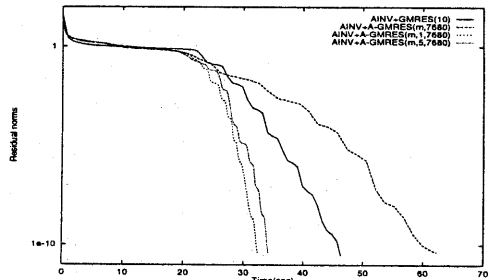


図 6 数値例 2 ( $Dh = 2^{-1}$ ): 計算時間に対する残差ノルム

- (1) ベクトルどうしの和
- (2) ベクトルのスカラー倍
- (3) ベクトルの内積
- (4) 行列とベクトルの積

使用するプロセッサの数を  $p$  とし、ベクトルの次元を  $n$  とすると、各プロセッサに割り当てられるベクトルの要素数は  $\tilde{n} = n/p$  となり、 $i$  番目のプロセッサはベクトルの  $\tilde{n}(i-1) + 1$  行目から  $\tilde{n}i$  行目まで割り当てられる。ベクトルどうしの和、ベクトルのスカラー倍、行列とベクトルの積は通信することなく各プロセッサが、割り当てられたベクトルの要素に対して計算を進めていくことができる。ベクトルの内積については、まず各プロセッサが局所的な  $\tilde{n}$  個の内積を計算し、その後でそれら  $p$  個の値の和をとって計算する。

表 2 数値例 1 の結果

Algorithm	$\alpha$					
	0.001		1		1000	
	sec	iter	sec	iter	sec	iter
GMRES(10) 法	—	—	—	—	—	—
GMRES(20) 法	197.6	9473	197.4	9446	202.0	9444
GMRES(40) 法	189.8	4970	200.7	4969	198.1	4957
A-GMRES( $m$ , 3840) 法	123.7	3820	122.5	3774	118.5	3736
	$m : 4 \rightarrow 36$		$m : 4 \rightarrow 36$		$m : 4 \rightarrow 32$	
A-GMRES( $m$ , 1, 3840) 法	95.0	3838	94.0	3839	95.6	3837
A-GMRES( $m$ , 2, 3840) 法	96.4	3830	90.1	3527	114.1	3830
A-GMRES( $m$ , 3, 3840) 法	97.2	3837	105.1	3801	100.5	3817
A-GMRES( $m$ , 5, 3840) 法	95.6	3777	107.5	3828	93.0	3826

表 3 数値例 2 の結果

Algorithm	$Dh$					
	$2^{-6}$		$2^{-5}$		$2^{-4}$	
	sec.	iter.	sec.	iter.	sec.	iter.
GMRES(10)	—	—	—	—	292.0	4199
GMRES(20)	—	—	457.9	4158	229.3	2029
GMRES(40)	597.6	2973	410.8	2163	283.4	1309
A-GMRES( $m$ , 7680)	591.2	4573	373.2	3540	207.3	1778
	$m : 4 \rightarrow 26$		$m : 4 \rightarrow 24$		$m : 4 \rightarrow 28$	
A-GMRES( $m$ , 1, 7680)	609.1	7564	472.0	7321	392.4	6739
A-GMRES( $m$ , 2, 7680)	635.2	7644	526.6	7531	337.0	6784
A-GMRES( $m$ , 3, 7680)	676.2	7555	486.8	7376	340.3	6808
A-GMRES( $m$ , 5, 7680)	575.6	7035	455.7	7282	314.5	6442
A-GMRES( $m$ , 10, 7680)	560.8	7008	533.5	7004	388.6	7286
AINV+GMRES(10)	382.1	3988	218.7	2426	102.7	1078
AINV+GMRES(20)	206.0	1527	159.0	1151	105.2	722
AINV+GMRES(40)	330.2	1351	237.1	925	184.5	771
AINV+A-GMRES( $m$ , 2560)	212.1	1836	195.3	1198	216.6	853
	$m : 4 \rightarrow 20$		$m : 4 \rightarrow 24$		$m : 4 \rightarrow 60$	
AINV+A-GMRES( $m$ , 7680)	412.6	5454	336.2	4679	161.8	2080
	$m : 4 \rightarrow 8$		$m : 4 \rightarrow 8$		$m : 4 \rightarrow 8$	
AINV+A-GMRES( $m$ , 1, 2560)	201.0	2466	169.0	2360	136.1	1647
AINV+A-GMRES( $m$ , 2, 2560)	224.1	2538	199.6	2515	167.9	2148
AINV+A-GMRES( $m$ , 3, 2560)	215.2	2453	179.5	2398	173.2	2311
AINV+A-GMRES( $m$ , 5, 2560)	228.3	2464	191.3	2382	251.8	1556
AINV+A-GMRES( $m$ , 10, 2560)	255.6	2440	231.2	2531	261.3	2277
AINV+A-GMRES( $m$ , 1, 7680)	336.4	5678	299.8	4922	161.0	2735
AINV+A-GMRES( $m$ , 2, 7680)	471.4	7009	269.2	4533	137.3	2248
AINV+A-GMRES( $m$ , 3, 7680)	396.8	6632	326.3	5202	170.8	2416
AINV+A-GMRES( $m$ , 5, 7680)	332.7	5365	239.4	3858	184.1	2934
AINV+A-GMRES( $m$ , 10, 7680)	369.3	6159	274.4	4420	171.8	2875

5.2 前 処 理

数値実験で前処理行列として使用した近似逆行列<sup>11)</sup>の構成法について述べる. 前処理行列  $M$  を  $A^{-1}$  に近似するために, 次のような最小 2 乗問題を考える.

$$\min \|AM - E\|_F^2 = \sum_{k=1}^n \min \|AM_k - e_k\|_2^2 \quad (5)$$

ただし,  $E$  は単位行列,  $M_k$ ,  $e_k$  は行列  $M$ ,  $E$  の  $k$  番目の列ベクトルの成分とする. ここでベクトル  $M_k$  が疎であると仮定すると, 式 (5) は以下のようにできる.

$$\min \|AM_k - e_k\|_2^2, \quad k = 1, \dots, n \quad (6)$$

式 (6) を解く手法は様々あるが, 本稿の数値実験では Givens 法での QR 分解を用いた. また,  $M_k$  の非ゼロ要素のインデックスは, 係数行列  $A$  の非ゼロ要素のインデックス集合として  $M$  を決定した.

5.3 数 値 例

数値実験は SGI の並列計算機 Origin 2000 によって行った. その際セルの台数は 8 個とした.

GMRES( $m$ ) 法のリスタート周期は 10, 20, 40 の 3 通り, A-GMRES( $m$ ,  $itmax$ ) 法, A-GMRES( $m$ ,  $l$ ,  $itmax$ ) 法は初期のリスタート周期を 4 とし,

表 4 数値例 2 の結果 (その 2)

Algorithm	$Dh$					
	$2^{-3}$		$2^{-2}$		$2^{-1}$	
	sec.	iter.	sec.	iter.	sec.	iter.
GMRES(10)	163.3	2148	70.3	912	59.8	863
GMRES(20)	140.5	1260	119.0	1020	121.1	1023
GMRES(40)	221.2	1149	291.8	1320	263.5	1280
A-GMRES( $m, 7680$ )	263.7	1443	699.6	1988	668.5	1920
	$m: 4 \rightarrow 52$		$m: 4 \rightarrow 100$		$m: 4 \rightarrow 100$	
A-GMRES( $m, 1, 7680$ )	220.8	3925	125.5	1597	165.8	1191
A-GMRES( $m, 2, 7680$ )	161.5	2855	147.2	1653	145.2	1076
A-GMRES( $m, 3, 7680$ )	223.4	4337	134.9	1726	134.0	1125
A-GMRES( $m, 5, 7680$ )	215.8	3500	185.5	1769	169.5	1261
A-GMRES( $m, 10, 7680$ )	198.8	2739	144.8	1629	126.2	1106
AINV+GMRES(10)	51.4	546	46.5	500	48.9	528
AINV+GMRES(20)	79.7	576	85.8	580	99.0	716
AINV+GMRES(40)	161.7	755	196.2	955	250.9	993
AINV+A-GMRES( $m, 2560$ )	510.3	839	519.9	1069	388.6	771
	$m: 4 \rightarrow 94$		$m: 4 \rightarrow 100$		$m: 4 \rightarrow 100$	
AINV+A-GMRES( $m, 7680$ )	48.8	754	45.7	541	54.4	625
	$m: 4 \rightarrow 6$		$m: 4 \rightarrow 10$		$m: 4 \rightarrow 14$	
AINV+A-GMRES( $m, 1, 2560$ )	200.3	1003	138.1	730	137.8	639
AINV+A-GMRES( $m, 2, 2560$ )	126.9	936	150.8	730	139.5	662
AINV+A-GMRES( $m, 3, 2560$ )	94.3	911	102.6	649	235.5	772
AINV+A-GMRES( $m, 5, 2560$ )	293.6	1246	243.2	851	357.7	912
AINV+A-GMRES( $m, 10, 2560$ )	668.0	839	214.8	879	357.6	916
AINV+A-GMRES( $m, 1, 7680$ )	49.5	833	36.3	596	31.1	467
AINV+A-GMRES( $m, 2, 7680$ )	52.7	879	31.4	499	32.1	467
AINV+A-GMRES( $m, 3, 7680$ )	47.2	785	33.0	534	38.4	473
AINV+A-GMRES( $m, 5, 7680$ )	55.0	905	34.2	528	33.4	489
AINV+A-GMRES( $m, 10, 7680$ )	55.8	883	34.3	525	46.0	568

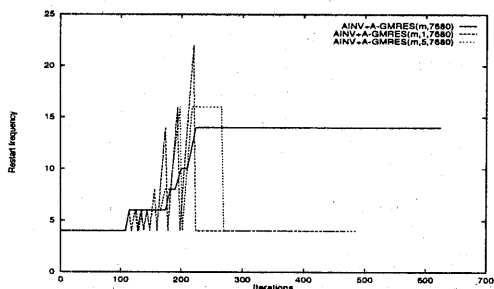


図 7 数値例 2 ( $Dh = 2^{-1}$ ): 反復回数に対するリスタート周期

最大のリスタート周期を 100 とした。また、A-GMRES( $m, itmax$ )法、A-GMRES( $m, l, itmax$ )法の最大反復回数は、前処理なしの場合には  $30\sqrt{N}$ 回、前処理付の場合には  $10\sqrt{N}$ 回と  $30\sqrt{N}$ 回とした。ただし、 $N$ は行列の次元である。GMRES( $m$ )法の最大反復回数は 10000 回とした。

反復回数の数え方は、1 クリロフ部分空間進む毎に 1 回とした。なお、計算時間の計測は、各算法とも 3 回行って、その平均値を取った。

各例題の数値実験は以下の条件のもとで行った。

- 収束判定条件:  $\|r_i\|/\|r_0\| \leq 1.0 \times 10^{-12}$
- 初期近似解:  $x_0 = (0, 0, \dots, 0)^T$

- 計算精度: 倍精度
- 計算機イプシロン:  $1.0 \times 10^{-16}$

### 5.3.1 数値例 1

下のような係数行列を持つ連立 1 次方程式を考える (Homer<sup>12</sup>)を参照)。

$$A = \begin{pmatrix} 1 & & & \alpha \\ & 2 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & N \end{pmatrix}$$

ただし、右辺は  $b = (1, 1, \dots, 1)^T$  とし、 $\alpha$  を 0.001, 1, 1000 の場合について数値実験を行なった。行列の次元は 16384 とした。表 2 に数値例の結果を示した。表の中で数値がないところは最大反復回数までに収束しなかったものである。 $\alpha$  がどの値でも A-GMRES( $m, l, itmax$ )法が最も速く収束している。また、A-GMRES( $m, l, itmax$ )法と A-GMRES( $m, itmax$ )法を比較すると、すべての  $l$  において A-GMRES( $m, l, itmax$ )法の方が速く収束していることが分かる。 $\alpha = 1000$  の場合の残差ノルムの収束の様子とリスタート周期の値をそれぞれ、図 2 と図 3 に示した。図 3 で反復回数が約 3000 回以降では、A-GMRES( $m, 5, 3840$ )法はリスタート周期をそれまでよりも小さく取っていて、計算時間を短縮している。

### 5.3.2 数値例 2

矩形領域  $\Omega = [0, 1] \times [0, 1]$  における 2 階の偏微分方程式のディリクレ境界値問題を考える (Joubert<sup>6)</sup> を参照).

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

ただし, メッシュ幅を  $h = 1/257$  として 5 点中心差分近似で離散化し, 真の解を  $u(x, y) = 1 + xy$  と設定して右辺を決定する. なお, 行列の次元は 65536 となる.  $Dh$  の値を  $2^{-6}$  から  $2^{-1}$  までの 6 通りで数値実験し, 結果を表 3, 表 4 に示した. 表で AINV と表記されているものは, 係数行列  $A$  の近似逆行列による前処理を行なった算法である.  $Dh$  が  $2^{-6}$  と  $2^{-1}$  における残差ノルムの収束の様子を図 4 と図 6 に, そのときのリスタート周期の値の変化を図 5 と図 7 に示した. A-GMRES( $m, l, itmax$ ) 法が最も速く収束しているのは,  $Dh = 2^{-6}, 2^{-3}, 2^{-2}, 2^{-1}$  の場合である. 図 5 から,  $Dh = 2^{-6}$  での A-GMRES( $m, l, itmax$ ) 法のリスタート周期の値が小刻みに振動している様子が分かる. 特に AINV+A-GMRES( $m, 1, 2560$ ) 法のリスタート周期は, 大きな値と小さな値を交互に繰り返しており, 計算時間は最短となっている. 式 (4) の見積もりから決定されたリスタート周期は, 各々の局面で適切な値だったといえる.  $Dh = 2^{-1}$  では, A-GMRES( $m, l, itmax$ ) 法は一旦大きなリスタート周期で反復するが, その後, 反復回数 250 回前後からは最小のリスタート周期で収束に至っている. 図 6 において, 計算時間 20 秒以前では停滞が起きていて, それ以後急激に収束している. A-GMRES( $m, itmax$ ) 法はその停滞の時にリスタート周期を大きくしてしまうため, 計算時間がかかっている. 特に, A-GMRES( $m, 7680$ ) 法と AINV+A-GMRES( $m, 2560$ ) 法は, 最大リスタート周期まで上げてしまい, その結果膨大な計算時間となっている. しかし, AINV+A-GMRES( $m, 5, 2560$ ) 法や AINV+A-GMRES( $m, 10, 2560$ ) 法も計算時間がかかっている. これは  $l$  が大きいため, 収束の様子が急激に変化した際に, リスタート周期を減らす処置が遅れたためである.

### 6. まとめ

本稿では, 適応的にリスタート周期を決定する A-GMRES( $m, l, itmax$ ) 法を提案し, 数値実験で GMRES( $m$ ) 法, A-GMRES( $m, itmax$ ) 法との比較を行なった. A-GMRES( $m, itmax$ ) 法の問題点として, リスタート周期を大きくし過ぎてしまうために発生する計算時間のオーバーヘッドがあるが, A-GMRES( $m, l, itmax$ ) 法はそのオーバーヘッドを十分に縮小できた. その結果 A-GMRES( $m, l, itmax$ ) 法は, 多くの場合において最も速く収束した. しかし, 数値例 2 の  $Dh = 2^{-1}$  において, AINV+A-

GMRES( $m, 5, 2560$ ) 法や AINV+A-GMRES( $m, 10, 2560$ ) 法は収束までに多くの計算時間を必要とした. すなわち,  $l$  の値は計算時間の短縮に影響を与えていることがわかる. また, 最大反復回数によっても計算時間に大きな違いがある. 数値例 2 において,  $Dh = 2^{-6}, 2^{-5}$  では, AINV+A-GMRES( $m, l, 7680$ ) 法よりも AINV+A-GMRES( $m, l, 2560$ ) 法の方が短い計算時間で収束したが,  $Dh = 2^{-2}, 2^{-1}$  においては, 逆に AINV+A-GMRES( $m, l, 7680$ ) 法の方が AINV+A-GMRES( $m, l, 2560$ ) 法よりも速く収束している.

### 参考文献

- 1) Hestenes, M. R. and Stiefel, E.: Methods of conjugate gradients for solving linear systems, *J. Res. Nat. Bur. Standards*, Vol. 49, pp. 409-435 (1952).
- 2) Saad, Y. and Schultz, M. H.: GMRES: A generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems. *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, Vol. 7, pp. 856-869, (1986).
- 3) Lanczos, C.: Solution of systems of linear equations by minimize iteration, *J. Res. Nat. Bur. Standard*, Vol. 49, pp. 33-53 (1952).
- 4) Fletcher, R.: Conjugate gradient methods for indefinite systems, *Lecture Notes in Math.*, Vol. 506, pp. 73-89 (1976).
- 5) Sosonkina, M., Watson, L. N., Kapania, R. K. and Walker, H. F.: A new adaptive GMRES algorithm for high accuracy, *Numer. Linear Algebra Appl.*, Vol. 5, pp. 275-297 (1998).
- 6) Joubert, W.: Lanczos methods for the solution of nonsymmetric systems of linear equations, *SIAM J. Matrix. Anal. Appl.*, Vol. 13, pp. 928-943 (1992).
- 7) Gutknecht, M. H.: Variants of BiCGSTAB for matrices with complex spectrum, *SIAM J. Sci. Comput.*, Vol. 14, pp. 1020-1033 (1993).
- 8) 野寺, 野口: AP1000 における BiCGStab( $l$ ) 法の有効性について, *情報処理学会論文誌*, Vol. 38, No. 11, pp. 2089-2101 (1997).
- 9) 森屋, 野寺: 適応的に  $l$  を変化させる BiCGStab( $l$ ) 法, *情報処理学会論文誌*, Vol. 40, No. 6, pp. 2669-2678 (1999).
- 10) 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).
- 11) T. K. Hucl: Efficient Computation of Sparse Approximate Inverses, *Numer. Linear Algebra Appl.*, Vol. 5, pp. 57-71 (1998).
- 12) Homer, F. W.: Implementation of the GMRES method using Householder transformations, *SIAM J. Sci. Comput.*, Vol. 9, pp. 152-163 (1988).