

## GMRES( $k$ ) 法のリスタート時における収束性改善のための工夫

日下部雄三 藤野清次†

(九州大学大学院システム情報科学府 †九州大学情報基盤研究開発センター)

リスタート周期つき GMRES( $k$ ) 法で得られた近似解に対して、数理的洞察に基づき、近似解を反復的に改良する方法である IR-GMRES( $k$ ) 法が今倉らによって新しく提案された。そこで、本研究では、IR-GMRES( $k$ ) 法におけるリスタート時の初期近似解の与え方について考察した。そこで、本稿では、考察した初期近似解の与え方の中からいくつかを提示し、数値実験によりそれらの方法の妥当性、有用性を比較検討する。

### Strategies of GMRES( $k$ ) method with restart and iterative refinement for gaining robustness of convergence

Yuzo Kusakabe Seiji Fujino†

(Graduate School of Information Science and Electrical Engineering, Kyushu University

†Research Institute for Information Technology, Kyushu University)

**Abstract:** IR-GMRES( $k$ ) method proposed by Imakura *et al.* is assumed to be a kind of GMRES( $k$ ) method with restart cycle by means of iterative refinement process for approximated solutions. Accordingly, in IR-GMRES( $k$ ) method, the initial approximated solutions adopted at restart timing has great influence on improvement of convergence rate. In this article, we consider reasonable givings for the initial approximated solutions when IR-GMRES( $k$ ) method restarts, and discuss validity and robustness through several numerical experiments.

## 1 はじめに

非対称行列を係数行列に持つ連立一次方程式の解法としてリスタートつき GMRES (Generalized Minimal Residual) ( $k$ ) 法 ( $k$  はリスタート周期を表す) が知られている。最近、反復改良法の各反復における誤差方程式の解法として GMRES( $k$ ) 法を適用した IR-GMRES (Iterative Refinement GMRES) ( $k$ ) 法が提案された [1][2]。IR-GMRES( $k$ ) 法の収束性を向上させるためには、誤差方程式の初期近似解  $e_0$  の与え方が重要である。本稿では、 $e_0$  の与え方に MR (Minimized Residual) 法および MR( $m$ ) 法 [3] の考えを取り入れた IR-GMRES( $k$ )-MR 法、IR-GMRES( $k$ )-MR(2) 法、および IR-GMRES( $k$ )-GCR(1) 法を提案し、その有用性を数値実験を通して検証する。

本稿の構成を次に示す。第 2 節では GMRES( $k$ ) 法について述べる。第 3 節では IR-GMRES( $k$ ) 法の概要 [2] を記述する。第 4 節では提案する IR-GMRES( $k$ )-MR 法、IR-GMRES( $k$ )-MR(2) 法、IR-GMRES( $k$ )-GCR(1) 法について記述する。第 5 節では数値実験にて新たな初期近似解  $e_0$  の与え方の有用性を検証する。第 6 節でまとめを行う。

## 2 GMRES( $k$ ) 法

解くべき連立一次方程式を

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

とする。ここで、 $A$  は  $N \times N$  の実数非対称行列、 $x$  は次元数  $N$  の解ベクトル、 $b$  は次元数  $N$  の右辺ベクトルとする。初期近似解を  $x_0$  とし、初期残差  $b - Ax_0$  を  $r_0$  とする。GMRES 法は空間条件：

$$K_i(A; r_0) = \text{span}\{r_0, Ar_0, \dots, A^{i-1}r_0\}, \quad (2)$$

$$x_i = x_0 + z_i, \quad z_i \in K_i(A; r_0) \quad (3)$$

および最小残差条件：

$$z_i = \arg \min_{z_i \in K_i(A; r_0)} \|b - A(x_0 + z)\|_2 \quad (4)$$

を用いて解  $x_i$  を求める解法である。しかし、GMRES 法では反復回数の増加に従い計算量と記憶容量が増加するため、 $k$  回目の反復で得られた近似解  $x_k$  を初期近似解  $x_0$  として再度反復を開始するリスタートを適用した GMRES( $k$ ) 法が一般に使用される。

### 3 IR-GMRES( $k$ ) 法

ここでは、まず IR-GMRES( $k$ ) 法の概要を述べることにする(今倉, 曾我部, 張による文献[2] 参照). 今倉らによって提案された IR-GMRES( $k$ ) 法は、直接法でよく知られた近似解を完全 LU 分解の結果を利用して補正 (refinement) する方法の一つとも位置づけられる. ただし、近似解に対する補正を適当な反復法で行なうところに数理的な独自性があり新規性も高い.

すなわち、リスタート時において方程式  $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$  を初期近似解  $\mathbf{x}_k$  の GMRES( $k$ ) 法で解く際の最小残差条件式が以下のように変形できる.

$$\mathbf{z}_i = \arg \min_{\mathbf{z}_i \in K_i(A; \mathbf{r}_0)} \|\mathbf{b} - A(\mathbf{x}_k + \mathbf{z})\|_2 \quad (5)$$

$$= \arg \min_{\mathbf{z}_i \in K_i(A; \mathbf{r}_0)} \|\mathbf{r}_k - A\mathbf{z}\|_2 \quad (6)$$

$$= \arg \min_{\mathbf{z}_i \in K_i(A; \mathbf{r}_0)} \|\mathbf{r}_k - A(\mathbf{0} + \mathbf{z})\|_2. \quad (7)$$

ここで、式 (7) は誤差に関する線形方程式

$$A\mathbf{e} = \mathbf{r}_k \quad (8)$$

を初期近似解  $\mathbf{0}$  で解く際の最小残差条件式 (4) である、と見なせる. また、初期近似解  $\mathbf{e}_0$  に  $\mathbf{0}$  を代入する必要性もないので、初期近似解を

$$\|\mathbf{r}_k - A\mathbf{e}_0\|_2 \leq \|\mathbf{r}_k\|_2 \quad (9)$$

を満たすように設定する.

#### IR-GMRES( $k$ ) 法の算法

Solve  $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$  by GMRES( $k$ ) method

with an initial guess  $\mathbf{x}_0$ , and get  $\mathbf{x}_k$ .

Set  $\mathbf{r}_k = \mathbf{b} - A\mathbf{x}_k$ . (10)

Solve  $A\mathbf{e} = \mathbf{r}_k$  by GMRES( $k$ ) method

with an initial guess  $\mathbf{e}_0$ , and get  $\mathbf{e}_k$ . (11)

Update  $\hat{\mathbf{x}}_k = \mathbf{x}_k + \mathbf{e}_k$ .

Repeat (go to (10))

IR-GMRES( $k$ ) 法の算法中の式 (11) において  $\mathbf{e}_k$  は次式で更新される. ここで、上付き添え字 ( $l$ ) はリスタート回数を意味する.

$$\mathbf{e}_k^{(l)} = \mathbf{e}_0^{(l)} + \mathbf{z}_k^{(l)}. \quad (12)$$

このとき、IR-GMRES( $k$ ) 法の算法 (11) における初期近似解  $\mathbf{e}_0$  は以下の式を満たすように設定する.

$$\mathbf{e}_0^{(l)} = \alpha \mathbf{z}_k^{(l-1)} + \beta \mathbf{z}_k^{(l-2)}, \quad (13)$$

$$\alpha, \beta = \arg \min_{\alpha, \beta \in R} \|\mathbf{r}_k^{(l)} - A\mathbf{e}_0^{(l)}\|_2. \quad (14)$$

### 4 初期近似解 $\mathbf{e}_0$ の与え方の考案

IR-GMRES( $k$ ) 法の収束性向上には、残差ノルム  $\|\mathbf{r}_k - A\mathbf{e}_0\|_2$  を最小化する初期近似解  $\mathbf{e}_0$ ,

$$\mathbf{r}_{k+1} = \mathbf{r}_k - A\mathbf{e}_0, \quad (15)$$

$$\|\mathbf{r}_{k+1}\|_2 = \|\mathbf{r}_k - A\mathbf{e}_0\|_2 \leq \|\mathbf{r}_k\|_2 \quad (16)$$

となるように、残差の更新式を構成することが重要になる. 以下に、その更新式を紹介する.

#### 4.1 IR-GMRES( $k$ )-MR 法

以下に示すように、MR 法 [3] の最小残差性を利用して初期近似解  $\mathbf{e}_0$  を与える方法を IR-GMRES( $k$ ) 法を IR-GMRES( $k$ )-MR 法と呼ぶ.

$$\mathbf{e}_0 = \alpha \mathbf{r}_k, \quad (17)$$

$$(\because \mathbf{r}_{k+1} = (I - \alpha A)\mathbf{r}_k)$$

$$\alpha = \arg \min_{\alpha \in R} \|\mathbf{r}_k - \alpha A\mathbf{r}_k\|_2. \quad (18)$$

#### 4.2 IR-GMRES( $k$ )-MR(2) 法

初期近似解  $\mathbf{e}_0$  を次のように与える方法を IR-GMRES( $k$ )-MR(2) 法と呼ぶ. この方法は、パラメータ  $\alpha$  は上記の IR-GMRES( $k$ )-MR 法と同じであるが、 $\alpha$  の 2 次式を使う MR(2) 法 [3] を利用した方法である.

$$\mathbf{e}_0 = 2\alpha \mathbf{r}_k - \alpha^2 A\mathbf{r}_k, \quad (19)$$

$$(\because \mathbf{r}_{k+1} = (I - \alpha A)^2 \mathbf{r}_k)$$

$$\alpha = \arg \min_{\alpha \in R} \|\mathbf{r}_k - \alpha A\mathbf{r}_k\|_2. \quad (20)$$

#### 4.3 IR-GMRES( $k$ )-GCR(1) 法

GCR(1) 法の 2 つのパラメータ  $\alpha, \beta$  のうち  $\alpha = 1$  と固定した初期近似解  $\mathbf{e}_0$  の与え方を IR-GMRES( $k$ )-GCR(1) 法と呼ぶ.

$$\mathbf{e}_0 = \mathbf{r}_k - \beta A\mathbf{r}_k, \quad (21)$$

$$(\because \mathbf{r}_{k+1} = \mathbf{r}_k - A(\mathbf{r}_k - \beta A\mathbf{r}_k))$$

$$\beta = \arg \min_{\beta \in R} \|\mathbf{r}_k - \beta A\mathbf{r}_k\|_2. \quad (22)$$

## 5 数値実験

### 5.1 計算機環境と計算条件

計算機環境を次に述べる．計算はすべて倍精度浮動小数点演算で行った．計算機は HITACHI SR11000 モデル J1(CPU:POWER5, クロック周波数:1.9GHz, メモリ:128Gbytes, OS:AIX 5.3) を使用した．プログラミング言語は最適化 Fortran90 を使い, コンパイラーの最適化オプションは-64 -Oss -nolimit -noscope -noparallel を使用した．時間計測には日立のサービスサブルーチンの時間計測関数 xclock を使用した．

計算条件を次に示す．右辺項ベクトル  $b$  は厳密解を  $\hat{x} = (1, \dots, 1)^T$  とし,  $b = A\hat{x}$  として作成した．収束判定条件は相対残差の 2 ノルム:  $\|r_{n+1}\|_2 / \|r_0\|_2 \leq 10^{-12}$  とした．初期近似解  $x_0$  はすべて  $0$  とした．行列は予め対角スケールングによって対角項をすべて 1.0 に正規化した．最大反復回数は 10000 回とした．リスタート周期  $k$  は 20, 50, 100, 200, 500, 1000 の 6 通り実験を行った．

### 5.2 テスト行列

表 1 に数値実験で使用した 21 個の非対称行列の特徴を示す [4]．

表 1: 非対称行列の特徴

行列	次元数	非零要素数	非零要素 / 行	解析分野	
bridge*	64,461	4,373,817	67.85	構造解析	
poisson3Da	13,514	352,762	26.10		
poisson3Db	85,623	2,374,949	27.74		
xenon1	48,600	1,181,120	24.30		
xenon2	157,464	3,866,688	24.56		
sme3Da*	12,504	874,887	69.97		
sme3Db*	29,067	2,081,063	71.60		
ecl32	51,993	380,415	7.32		熱交換器
epb1	14,734	95,053	6.45		
epb2	25,228	175,027	6.94		
epb3	84,617	463,625	5.48		
ex10hs*	2,548	57,308	22.49	流体力学	
ex11*	16,614	1,096,948	66.03		
raefsky3	21,200	1,488,768	70.22		
raefsky4*	19,779	1,328,611	67.17		
venkat50*	62,424	1,717,777	27.52		
add20	2,395	17,319	7.23		回路解析
add32	4,960	23,884	4.82		
memplus	17,758	126,150	7.10		
wang3	26,064	177,168	6.80		
wang4	26,068	177,196	6.80		

### 5.3 実験結果

表 2-6 に各行列における各解法の収束性を各々示す．ただし, すべての解法において最大反復回数までで未収束だった bridge, sme3Da,

sme3Db, ex10hs, ex11, raefsky4, venkat50 の 7 つの行列 (表 1 中で行列名に \* 印付き) および IR-GMRES( $k$ )-MR(2) 法よりも収束性が悪かった IR-GMRES( $k$ )-MR 法の結果は割愛した．図 1, 2 に行列 epb1, wang3 における  $k = 20$  の各解法の相対残差履歴を示す．また, 図 3 に行列 epb1 における  $k = 10, 20, \dots, 100$  の各解法の反復回数の変動を示す．ただし, 表中の時間の単位はすべて秒とした．“TRR” は真の相対残差: True Relative Residual の常用対数 ( $\log_{10}$ ) 値を意味する．すなわち, 近似解  $x_{n+1}$  に対する  $\|b - Ax_{n+1}\|_2 / \|b - Ax_0\|_2$  の値である．また, 表中の “max” は最大反復回数で収束しなかったことを意味する．表 2-6 において, 計算時間が太字の表記は各行列で最も少なかったことを意味する．

表 2: 各行列における各解法の収束性 (1)

行列	解法	$k$	反復回数	計算時間	TRR	メモリ [MB]
poisson3Da	GMRES	20	531	1.01	-12.01	6.77
		50	421	0.94	-12.01	9.88
		100	286	0.81	-12.04	15.10
		200	208	0.85	-12.03	25.64
		500	206	0.88	-12.04	58.18
		1000	206	0.87	-12.04	115.47
	IR-GMRES	20	584	1.20	-12.01	7.08
		50	420	0.97	-12.03	10.19
		100	<b>356</b>	1.00	-12.02	15.41
		200	390	1.60	-12.03	25.95
		500	206	0.88	-12.04	58.49
		1000	206	0.87	-12.04	115.78
	IR-GMRES-MR(2)	20	533	1.10	-12.01	7.08
		50	397	0.91	-12.03	10.19
		100	283	<b>0.80</b>	-12.03	15.41
		200	206	0.85	-12.01	25.95
		500	206	0.88	-12.04	58.49
		1000	206	0.87	-12.04	115.78
IR-GMRES-GCR(1)	20	495	1.02	-12.04	7.08	
	50	419	0.96	-12.01	10.19	
	100	285	0.81	-12.00	15.41	
	200	208	0.85	-12.04	25.95	
	500	206	0.88	-12.04	58.49	
	1000	206	0.87	-12.04	115.78	
poisson3Db	GMRES	20	1399	20.40	-12.03	44.49
		50	989	17.28	-12.00	64.11
		100	769	17.09	-12.01	96.83
		200	574	18.04	-12.03	162.39
		500	427	22.69	-12.03	359.97
		1000	427	23.03	-12.03	692.34
	IR-GMRES	20	1502	23.90	-12.00	46.45
		50	996	18.05	-12.01	66.07
		100	769	17.36	-12.01	98.79
		200	574	18.14	-12.03	164.35
		500	427	22.90	-12.03	361.93
		1000	427	23.26	-12.03	694.30
	IR-GMRES-MR(2)	20	1109	17.65	-12.02	46.45
		50	956	17.39	-12.01	66.07
		100	751	<b>16.83</b>	-12.02	98.79
		200	570	17.96	-12.02	164.35
		500	427	23.22	-12.03	361.93
		1000	427	22.90	-12.03	694.30
IR-GMRES-GCR(1)	20	1214	19.06	-12.00	46.45	
	50	984	17.82	-12.01	66.07	
	100	768	17.10	-12.01	98.79	
	200	573	18.06	-12.01	164.35	
	500	427	22.84	-12.03	361.93	
	1000	427	23.21	-12.03	694.30	

表 3 : 各行列における各解法の収束性 (2)

行列	解法	k	反復回数	計算時間	TRR	メモリ [MB]
xenon1	GMRES	20	max	51.16	-9.06	23.35
		50	6466	41.45	-12.00	34.49
		100	3638	33.40	-12.00	53.09
		200	2389	35.39	-12.00	90.40
		500	1916	58.89	-12.00	203.24
		1000	1727	91.66	-12.00	394.38
	IR-GMRES	20	max	55.46	-10.21	24.46
		50	6092	40.17	-12.00	35.60
		100	3559	33.14	-12.00	54.20
		200	2380	35.73	-12.00	91.51
		500	1916	58.26	-12.00	204.36
		1000	1727	90.46	-12.00	395.49
	IR-GMRES-MR(2)	20	max	55.40	-10.86	24.46
		50	5866	38.96	-12.00	35.60
		100	3504	<b>32.76</b>	-12.00	54.20
		200	2364	35.06	-12.00	91.51
		500	1911	58.59	-12.00	204.36
		1000	1725	91.32	-12.00	395.49
	IR-GMRES-GCR(1)	20	max	55.41	-9.21	24.46
		50	6389	42.46	-12.00	35.60
		100	3617	33.63	-12.00	54.20
		200	2385	35.67	-12.00	91.51
		500	1915	58.19	-12.00	204.36
		1000	1727	91.75	-12.00	395.49
xenon2	GMRES	20	max	181.50	-7.75	76.09
		50	8503	197.53	-12.00	112.15
		100	4704	152.70	-12.00	172.27
		200	2894	<b>144.94</b>	-12.00	292.64
		500	2293	232.01	-12.00	654.66
		1000	2172	411.12	-12.00	1261.07
	IR-GMRES	20	max	194.85	-8.63	79.69
		50	7986	193.34	-12.00	115.75
		100	4603	151.64	-12.00	175.88
		200	2886	146.50	-12.00	296.25
		500	2293	234.29	-12.00	658.26
		1000	2172	409.47	-12.00	1264.68
	IR-GMRES-MR(2)	20	max	196.74	-9.92	79.69
		50	7537	180.63	-12.00	115.75
		100	4543	151.59	-12.00	175.88
		200	2852	145.96	-12.00	296.25
		500	2285	234.94	-12.00	658.26
		1000	2168	404.84	-12.00	1264.68
	IR-GMRES-GCR(1)	20	max	194.67	-7.87	79.69
		50	8398	201.41	-12.00	115.75
		100	4672	155.25	-12.00	175.88
		200	2889	148.98	-12.00	296.25
		500	2292	233.55	-12.00	658.26
		1000	2172	410.92	-12.00	1264.68
ecl32	GMRES	20	max	32.47	-8.42	14.87
		50	9305	43.58	-12.00	26.79
		100	6181	46.17	-12.00	46.68
		200	2075	28.08	-12.01	86.58
		500	530	<b>15.59</b>	-12.02	207.19
		1000	521	16.91	-12.02	411.27
	IR-GMRES	20	max	34.81	-5.48	16.06
		50	max	47.65	-11.99	27.98
		100	4662	34.95	-12.00	47.87
		200	2086	27.86	-12.00	87.77
		500	535	15.94	-12.04	208.38
		1000	521	16.75	-12.02	412.46
	IR-GMRES-MR(2)	20	max	34.75	-8.34	16.06
		50	max	47.66	-9.96	27.98
		100	6858	51.63	-12.00	47.87
		200	2839	38.27	-12.00	87.77
		500	528	15.95	-12.02	208.38
		1000	521	17.12	-12.02	412.46
	IR-GMRES-GCR(1)	20	max	34.64	-8.81	16.06
		50	max	47.64	-7.91	27.98
		100	4426	33.24	-12.00	47.87
		200	2060	27.45	-12.00	87.77
		500	530	15.90	-12.03	208.38
		1000	521	16.82	-12.02	412.46

表 4 : 各行列における各解法の収束性 (3)

行列	解法	k	反復回数	計算時間	TRR	メモリ [MB]
epb1	GMRES	20	2388	1.94	-12.00	4.07
		50	1513	1.83	-12.00	7.46
		100	1302	2.49	-12.00	13.14
		200	1135	3.64	-12.02	24.61
		500	901	6.74	-12.01	59.95
		1000	636	6.80	-12.02	121.89
	IR-GMRES	20	2458	2.12	-12.00	4.41
		50	1459	1.80	-12.00	7.80
		100	1286	2.46	-12.00	13.48
		200	1135	3.64	-12.01	24.95
		500	901	6.74	-12.01	60.28
		1000	636	6.70	-12.02	122.23
	IR-GMRES-MR(2)	20	1584	<b>1.36</b>	-12.00	4.41
		50	1450	1.79	-12.00	7.80
		100	1285	2.46	-12.02	13.48
		200	1134	3.62	-12.00	24.95
		500	899	6.69	-12.01	60.28
		1000	636	6.70	-12.02	122.23
	IR-GMRES-GCR(1)	20	2033	1.75	-12.00	4.41
		50	1422	1.74	-12.01	7.80
		100	1311	2.52	-12.00	13.48
		200	1130	3.62	-12.02	24.95
		500	901	6.72	-12.01	60.28
		1000	636	6.73	-12.02	122.23
epb2	GMRES	20	801	1.15	-12.02	7.11
		50	562	1.19	-12.01	12.90
		100	495	1.63	-12.00	22.58
		200	425	2.38	-12.01	42.06
		500	394	4.62	-12.03	101.41
		1000	394	4.57	-12.03	203.39
	IR-GMRES	20	759	1.16	-12.01	7.69
		50	571	1.22	-12.00	13.48
		100	496	1.63	-12.02	23.16
		200	425	2.36	-12.01	42.64
		500	394	4.61	-12.03	101.99
		1000	394	4.53	-12.03	203.97
	IR-GMRES-MR(2)	20	729	1.11	-12.00	7.69
		50	546	1.17	-12.01	13.48
		100	483	1.57	-12.01	23.16
		200	420	2.37	-12.01	42.64
		500	394	4.60	-12.03	101.99
		1000	394	4.54	-12.03	203.97
	IR-GMRES-GCR(1)	20	697	<b>1.06</b>	-12.01	7.69
		50	554	1.19	-12.02	13.48
		100	493	1.61	-12.02	23.16
		200	424	2.37	-12.02	42.64
		500	394	4.53	-12.03	101.99
		1000	394	4.60	-12.03	203.97
epb3	GMRES	20	max	44.24	-4.53	22.42
		50	max	68.88	-6.36	41.80
		100	max	119.06	-9.72	74.14
		200	max	218.63	-10.43	138.93
		500	6777	332.12	-12.00	334.21
		1000	5279	499.52	-12.00	662.74
	IR-GMRES	20	max	46.84	-4.54	24.35
		50	max	70.15	-5.86	43.74
		100	max	120.70	-8.83	76.08
		200	max	217.98	-11.99	140.87
		500	6928	346.49	-12.00	336.15
		1000	5279	502.89	-12.00	664.68
	IR-GMRES-MR(2)	20	max	46.64	-4.72	24.35
		50	max	69.74	-5.35	43.74
		100	max	120.44	-11.26	76.08
		200	9577	<b>207.57</b>	-12.00	140.87
		500	6820	336.69	-12.00	336.15
		1000	5271	502.04	-12.00	664.68
	IR-GMRES-GCR(1)	20	max	46.70	-4.66	24.35
		50	max	69.67	-5.76	43.74
		100	max	119.87	-10.41	76.08
		200	9789	212.88	-12.00	140.87
		500	7163	358.14	-12.00	336.15
		1000	5272	497.52	-12.00	664.68

表 5 : 各行列における各解法の収束性 (4)

行列	解法	k	反復回数	計算時間	TRR	メモリ [MB]
raefsky3	GMRES	20	max	45.37	-7.72	21.33
		50	max	50.09	-8.52	26.20
		100	max	59.97	-9.02	34.34
		200	max	85.39	-9.04	50.75
		500	max	159.76	-11.40	100.88
	1000	9556	<b>259.58</b>	-12.00	187.49	
	IR-GMRES	20	max	49.29	-7.45	21.81
		50	max	51.65	-8.29	26.68
		100	max	60.74	-8.89	34.83
		200	max	85.70	-8.99	51.23
		500	max	159.17	-11.34	101.37
	1000	9532	261.27	-12.00	187.98	
	IR-GMRES-MR(2)	20	max	49.26	-8.21	21.81
		50	max	51.74	-8.77	26.68
		100	max	60.73	-9.16	34.83
		200	max	85.65	-9.14	51.23
		500	max	160.02	-11.52	101.37
	1000	9531	261.94	-12.00	187.98	
	IR-GMRES-GCR(1)	20	max	49.41	-8.23	21.81
		50	max	51.85	-8.78	26.68
		100	max	60.72	-9.16	34.83
		200	max	85.51	-9.16	51.23
		500	max	159.92	-11.48	101.37
	1000	9547	262.12	-12.00	187.98	
add20	GMRES	20	333	0.06	-12.02	0.69
		50	238	0.06	-12.00	1.25
		100	211	0.07	-12.01	2.22
		200	188	0.11	-12.06	4.28
		500	188	0.11	-12.06	11.38
	1000	188	0.11	-12.06	26.25	
	IR-GMRES	20	331	0.06	-12.00	0.74
		50	238	0.06	-12.00	1.31
		100	211	0.07	-12.02	2.28
		200	188	0.11	-12.06	4.34
		500	188	0.10	-12.06	11.43
	1000	188	0.11	-12.06	26.30	
	IR-GMRES-MR(2)	20	288	<b>0.05</b>	-12.00	0.74
		50	236	0.06	-12.08	1.31
		100	209	0.07	-12.01	2.28
		200	188	0.11	-12.06	4.34
		500	188	0.11	-12.06	11.43
	1000	188	0.11	-12.06	26.30	
	IR-GMRES-GCR(1)	20	330	0.06	-12.01	0.74
		50	239	0.06	-12.04	1.31
		100	211	0.07	-12.01	2.28
		200	188	0.11	-12.06	4.34
		500	188	0.10	-12.06	11.43
	1000	188	0.11	-12.06	26.30	
add32	GMRES	20	107	0.04	-12.00	1.28
		50	96	0.04	-12.03	2.43
		100	93	0.06	-12.02	4.38
		200	93	0.06	-12.02	8.40
		500	93	0.06	-12.02	21.36
	1000	93	0.06	-12.02	46.02	
	IR-GMRES	20	105	0.04	-12.02	1.39
		50	96	0.04	-12.03	2.55
		100	93	0.06	-12.02	4.50
		200	93	0.06	-12.02	8.51
		500	93	0.06	-12.02	21.48
	1000	93	0.06	-12.02	46.14	
	IR-GMRES-MR(2)	20	97	<b>0.03</b>	-12.01	1.39
		50	95	0.04	-12.07	2.55
		100	93	0.06	-12.02	4.50
		200	93	0.06	-12.02	8.51
		500	93	0.06	-12.02	21.48
	1000	93	0.06	-12.02	46.14	
	IR-GMRES-GCR(1)	20	108	0.04	-12.01	1.39
		50	96	0.04	-12.07	2.55
		100	93	0.06	-12.02	4.50
		200	93	0.06	-12.02	8.51
		500	93	0.06	-12.02	21.48
	1000	93	0.06	-12.02	46.14	

表 6 : 各行列における各解法の収束性 (5)

行列	解法	k	反復回数	計算時間	TRR	メモリ [MB]
memplus	GMRES	20	1059	1.19	-12.02	5.04
		50	480	0.76	-12.01	9.12
		100	390	0.93	-12.04	15.95
		200	345	1.29	-12.02	29.73
		500	319	2.04	-12.01	71.99
	1000	319	2.06	-12.01	145.47	
	IR-GMRES	20	950	1.14	-12.00	5.44
		50	480	0.77	-12.00	9.53
		100	390	0.94	-12.04	16.36
		200	345	1.28	-12.02	30.14
		500	319	2.05	-12.01	72.40
	1000	319	2.05	-12.01	145.87	
	IR-GMRES-MR(2)	20	796	0.95	-12.01	5.44
		50	463	<b>0.74</b>	-12.01	9.53
		100	386	0.93	-12.05	16.36
		200	344	1.28	-12.01	30.14
		500	319	2.05	-12.01	72.40
	1000	319	2.05	-12.01	145.87	
	IR-GMRES-GCR(1)	20	1076	1.29	-12.01	5.44
		50	483	0.77	-12.04	9.53
		100	390	0.94	-12.03	16.36
		200	345	1.28	-12.01	30.14
		500	319	2.04	-12.01	72.40
	1000	319	2.06	-12.01	145.87	
wang3	GMRES	20	933	1.38	-12.02	7.30
		50	581	1.29	-12.01	13.28
		100	426	1.42	-12.01	23.29
		200	317	1.68	-12.01	43.40
		500	260	2.07	-12.02	104.67
	1000	260	2.07	-12.02	209.83	
	IR-GMRES	20	1025	1.61	-12.00	7.90
		50	639	1.43	-12.01	13.88
		100	455	1.53	-12.02	23.88
		200	452	2.54	-12.01	44.00
		500	260	2.07	-12.02	105.27
	1000	260	2.05	-12.02	210.43	
	IR-GMRES-MR(2)	20	742	<b>1.16</b>	-12.01	7.90
		50	552	1.25	-12.04	13.88
		100	427	1.42	-12.02	23.88
		200	315	1.67	-12.01	44.00
		500	260	2.07	-12.02	105.27
	1000	260	2.08	-12.02	210.43	
	IR-GMRES-GCR(1)	20	756	1.18	-12.01	7.90
		50	579	1.29	-12.00	13.88
		100	425	1.44	-12.02	23.88
		200	317	1.66	-12.01	44.00
		500	260	2.05	-12.02	105.27
	1000	260	2.05	-12.02	210.43	
wang4	GMRES	20	max	14.82	-1.91	7.30
		50	729	1.59	-12.04	13.29
		100	397	1.35	-12.04	23.29
		200	289	1.50	-12.03	43.41
		500	242	1.78	-12.04	104.69
	1000	242	1.81	-12.04	209.86	
	IR-GMRES	20	max	15.76	-1.90	7.90
		50	754	1.68	-12.00	13.88
		100	397	1.36	-12.04	23.89
		200	290	1.51	-12.02	44.01
		500	242	1.81	-12.04	105.28
	1000	242	1.81	-12.04	210.46	
	IR-GMRES-MR(2)	20	max	15.75	-1.91	7.90
		50	682	1.51	-12.01	13.88
		100	394	<b>1.34</b>	-12.01	23.89
		200	287	1.49	-12.03	44.01
		500	242	1.80	-12.04	105.28
	1000	242	1.79	-12.04	210.46	
	IR-GMRES-GCR(1)	20	1002	1.58	-12.03	7.90
		50	679	1.50	-12.01	13.88
		100	394	<b>1.34</b>	-12.02	23.89
		200	288	1.50	-12.01	44.01
		500	242	1.78	-12.04	105.28
	1000	242	1.80	-12.04	210.46	



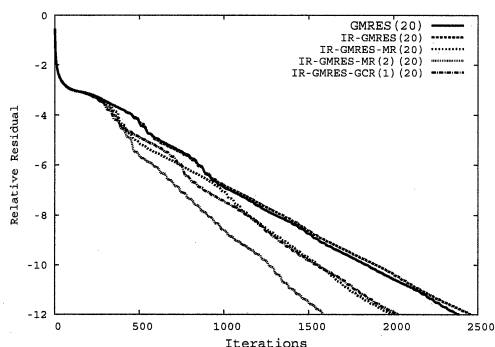


図1：リスタート周期  $k=20$  のときの5種類のGMRES(k)法の相対残差履歴(行列 epb1 のとき).

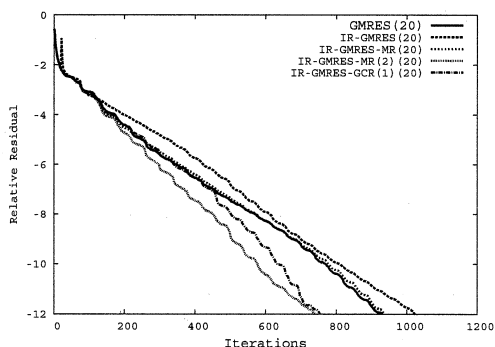


図2：リスタート周期  $k=20$  のときの5種類のGMRES(k)法の相対残差履歴(行列 wang3).

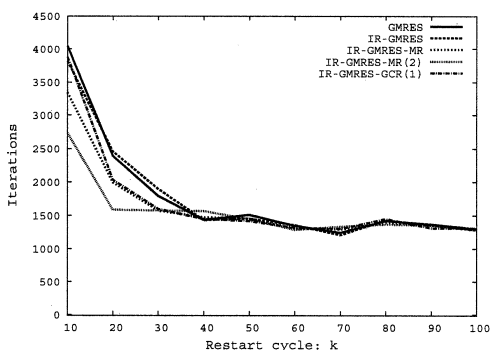


図3：リスタート周期  $k$  を  $k=10, 20, \dots, 100$  と大きくしたときの5種類のGMRES(k)法の反復回数の変動の様子(行列 epb1 のとき).

## 5.4 観察

表 2-6, 図 1-3 より以下の知見が得られた.

- 各解法ごとにリスタート周期  $k$  の値を変化させたとき, 各行列での最短計算時間となる  $k$  の値はほぼ一致する.
- リスタート周期  $k$  の値が小さいとき, IR-GMRES( $k$ )-MR(2)法の収束性がよかった. これは, 図 1, 2 の観察から, リスタート時に残差ノルム  $\|r_k - Ae_0\|_2$  を他の解法より小さいためと考えられる.
- ただ, リスタート周期  $k$  の値が十分に大きいとき各解法の収束性に差はない.
- IR-GMRES( $k$ )法では, 初期値  $e_0$  のための計算が余分に必要で, GMRES( $k$ )法と比べて反復回数の減少がそのまま計算時間の短縮にならない場合がある.
- 行列 poisson3Da (表 2 中の下線つきの  $k=100$  のとき), 同 wang3 (図 2 参照) のとき, IR-GMRES( $k$ )法では, 残差履歴に鋭い突起形状 (spike) が観察された.

## 6 まとめと今後の課題

本研究によって, IR-GMRES( $k$ )法の収束性は  $k$  の値が小さい場合, GMRES( $k$ )法より優位な収束性を示した. また,  $k$  の値が大きい場合, GMRES( $k$ )法と同程度の収束性を示すことがわかった. さらに, IR-GMRES( $k$ )法における初期近似解  $e_0$  の与え方は, 提案した IR-GMRES( $k$ )-MR(2)法の与え方が調べた中では最も妥当であるとの結論が得られた. 今後の課題は, 残差ノルム  $\|r_k - Ae_0\|_2$  に基づく初期近似解  $e_0$  のより適切な与え方を考えることである.

## 参考文献

- [1] 今倉暁, 曾我部知広, 張紹良: GMRES( $m$ )法のリスタートについて, 数値解析シンポジウム 講演予稿集, 秋田, pp.21-24, 2008.
- [2] 今倉暁, 曾我部知広, 張紹良: GMRES( $m$ )法と反復改良法の数理的つながり, 日本応用数理学会 2008 年度年会 講演予稿集, pp.407-408, 2008.
- [3] インドラ マレラ: 線形系に対するクリロフ部分空間反復解法とその高速化, 名古屋大学大学院修士課程 情報工学専攻修士論文, 1998.
- [4] Univ. of Florida Sparse Matrix Collection: <http://www.cise.ufl.edu/research/sparse/matrices/index.html>