

## シフトを行なった連立1次方程式に対する GMRES( $m$ )法の有効性について

平野 友貴<sup>†</sup> 野寺 隆<sup>†</sup>

大型で疎な非対称行列を係数とする連立1次方程式の解法の1つに GMRES( $m$ )法がある。シフトを行なった連立1次方程式とは、元の連立1次方程式の対角成分が定数  $\alpha$  だけ異なるものであり、主に量子力学の格子ゲージ計算で利用されることが多い。シフトした連立1次方程式に対するクリロフ部分空間が元の連立1次方程式と同一のクリロフ部分空間になることを利用して、A. Frommer ら3)が提案した Shifted-GMRES( $m$ )法を用いることができる。この解法により、計算コストのかかる行列とベクトルの積や、計算時間を減らすことができる。本稿では、この解法と従来の GMRES( $m$ )法とを並列計算機 Origin 2000 の数値実験を用いて比較し、その解法の有効性を示す。

### Effectiveness of GMRES( $m$ ) Method for Shifted Linear Systems

YUKI HIRANO<sup>†</sup> and TAKASHI NODERA<sup>†</sup>

The GMRES( $m$ ) method is one of the most popular iterative methods for the solution of large linear systems  $Ax = b$  with nonsymmetric and sparse coefficient matrix. Shifted linear systems  $\hat{A}\hat{x} = \hat{b}$  ( $\hat{A} = A + \alpha I$ ) are generally used in lattice gauge computations in quantum chromodynamics. Since the Krylov subspace for the shifted linear system is equal to the original one, Shifted-GMRES( $m$ ) method proposed by A. Frommer etc.3) can be used. This method can reduce matrix-vector products and the computation time. In this paper, we compare this method with the original GMRES( $m$ ) method and show the effectiveness by using the numerical experiments on the parallel machine Origin 2000.

#### 1. はじめに

現在、大規模な線形計算の解法として GMRES( $m$ )法が注目されている。この GMRES( $m$ )法は、偏微分方程式の境界値問題を有限差分法や有限要素法を離散化して得られる、大型で疎な非対称行列を係数にした連立1次方程式

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

を解くための反復解法の1つである。ただし、この係数行列  $A$  は正則とする。

本稿で扱うシフトを行なった連立1次方程式とは、

$$\hat{A}\hat{x} = \hat{b}, \quad \hat{A} \in \mathbb{C}^{n \times n} \quad \hat{x}, \hat{b} \in \mathbb{C}^n \quad (2)$$

であり、ここでの係数行列  $\hat{A} = A + \alpha I$  ( $\alpha \in \mathbb{C}, I$ :  $n \times n$ の単位行列)も正則とし、右辺項  $\hat{b}$  は上の式(1)と同一のものとする。この連立1次方程式は、量子力学の格子ゲージ計算や制御理論、時間依存の差分方程式等で元の連立1次方程式と共にいくつか得られることがある<sup>1)</sup>。この解法として、従来の GMRES( $m$ )法

で式(1)、(2)を各線形システムごとに解くことは可能だが、当然多くの計算時間がかかってしまう。そこで、A. Frommer ら3)は、元のクリロフ部分空間とシフトを行なったものに対するクリロフ部分空間が一致することを利用した Shifted-GMRES( $m$ )法を提案した。この解法は、各反復で行なうアーノルディ過程での基底行列の生成を最小限にとどめ、計算コストのかかる行列とベクトルの積を減らし、計算時間の向上をはかることができる。

第2節では、従来の GMRES( $m$ )法について簡単に述べる。第3節では、Shifted-GMRES( $m$ )法について記述する。第4節では、従来の GMRES( $m$ )法と Shifted-GMRES( $m$ )法を比較した数値実験の結果を示す。最後に第5節において、結論を述べることにする。

#### 2. GMRES( $m$ )法

GMRES( $m$ )法は、1986年に Y. Saad ら5)によって提案され、式(1)の連立1次方程式を解く、クリロフ部分空間法の1つである。まず、初期近似解ベクトルを  $x_0$  とし、それに対する初期残差ベクトルを

<sup>†</sup> 慶應義塾大学理工学部

Faculty of Science and Technology, Keio University

$r_0 (= b - Ax_0)$  とすると,  $i$  回目の反復における残差ノルムは次式で決定できる.

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

ただし,  $z$  はクリロフ部分空間

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

上の正規直交系 (基底行列)  $V_i = \{v_1, v_2, \dots, v_i\}$  によって  $z = V_i y$  と表され,  $y$  はそのときの残差ノルムが最小になるように選ばれる. よって, 以下の最小 2 乗問題に帰着できる.

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

ただし,  $\beta = \|r_0\|_2$  であり,  $H_i^*$  はアーノルディ過程で得られる上ヘッセンベルグ行列である. 式 (3) は, 通常  $H_i^*$  をギブンス回転行列で 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近似解  $x_i$  は,  $x_i = x_0 + V_i y$  で求められることになる.

ここでの反復回数  $i$  がリスタート周期  $m$  以下のときは上記のような計算が行なわれるが, もし反復回数  $i$  がリスタート周期  $m$  を越えるときは, 記憶容量と計算量の軽減のため,  $m$  回の反復毎にその時点での近似解  $x_m$  を新しい初期近似解  $x_0$  としてリスタートさせる. リスタートさせた後の計算方法は上記と同様な計算を行なうことになる.

### 3. Shifted-GMRES( $m$ ) 法

この節では, 式 (1) の連立 1 次方程式に加え, 式 (2) の連立 1 次方程式も解くような Shifted-GMRES( $m$ ) 法について述べる.

#### 3.1 クリロフ部分空間の一致

GMRES( $m$ ) 法を始めとする, クリロフ部分空間法とは, 近似解  $x_m$  が

$$x_m \in x_0 + K_m(A, r_0)$$

となるような反復法である. 式 (2) のシフトを行なったものに関しても同様に,

$$\hat{x}_m \in \hat{x}_0 + K_m(\hat{A}, \hat{r}_0)$$

となるのは明らかである. ただし,  $\hat{r}_0 = b - \hat{A}\hat{x}_0$  とする.

ここで, 初期近似解を  $x_0 = \hat{x}_0 = 0$  とすれば,  $r_0 = b - Ax_0, \hat{r}_0 = b - A\hat{x}_0$  より,  $r_0 = \hat{r}_0 = b$  となる. すると, 2 つのクリロフ部分空間は,

$$K_m(A, b) = \text{span}\{b, Ab, A^2b, \dots, A^{m-1}b\}$$

$$K_m(\hat{A}, b) = \text{span}\{b, \hat{A}b, \hat{A}^2b, \dots, \hat{A}^{m-1}b\}$$

となり, 線形性から  $K_m(A, b) = K_m(\hat{A}, b)$  が成立し, クリロフ部分空間が一致する. よって, GMRES( $m$ ) 法の性質から, アーノルディ過程で得られる基底行列

が同じものになり, 元の線形システムで 1 度, 基底行列を生成すればよいことがわかる.

しかし, リスタートによって  $x_m \neq \hat{x}_m$  となり, リスタートした時点の初期残差が異なり,  $K_m(A, r_m) \neq K_m(\hat{A}, \hat{r}_m)$  になってしまう. この状況を修正するため, 「共線形条件 (colinear condition)」を加える必要がある. この条件とは,

$$\hat{r}_m = \beta_m r_m, \quad \beta_m \in \mathbb{C} \quad (4)$$

である. これは,

$$\hat{r}_0 = \beta_0 r_0, \quad \beta_0 \in \mathbb{C} \quad (5)$$

として初期残差の条件でもよい.

この条件は

$$\begin{cases} \cdot A: \text{正定値行列} \\ \cdot \text{Re}(A\alpha, \alpha) > 0, \quad \forall \alpha \neq 0 \\ \cdot \text{Re}(\alpha) > 0 \end{cases} \quad (6)$$

のとき, 成り立つことが分かっている<sup>3)</sup>. この条件を満たす行列を用いて後の数値実験を行なうことにする.

#### 3.2 アルゴリズムの導出

ここでは, Shifted-GMRES( $m$ ) 法のアルゴリズムを式 (4) の共線形条件から求めることにする.

$$\begin{aligned} \hat{r}_m &= \beta_m r_m \\ \Leftrightarrow b - \hat{A}(\hat{x}_0 + V_m \hat{y}_m) &= \beta_m V_{m+1} z_{m+1} \\ \Leftrightarrow \hat{r}_0 - \hat{A}V_m \hat{y}_m &= V_{m+1} z_{m+1} \beta_m \end{aligned}$$

ここで, シフトを行なった連立 1 次方程式に対する上ヘッセンベルグ行列  $\hat{H}_m^*$  を定義する.

$$\hat{H}_m^* = H_m^* + \alpha \begin{bmatrix} 1 & & & \\ & \ddots & & \\ & & 1 & \\ 0 & \dots & 0 & \end{bmatrix} \in \mathbb{C}^{(m+1) \times m}$$

これを用いて,  $\hat{A}V_m = V_{m+1} \hat{H}_m^*$  より

$$\begin{aligned} \Leftrightarrow \beta_0 r_0 - V_{m+1} \hat{H}_m^* \hat{y}_m &= V_{m+1} z_{m+1} \beta_m \\ \Leftrightarrow V_{m+1} (\hat{H}_m^* \hat{y}_m + z_{m+1} \beta_m) &= \beta_0 r_0 \\ \Leftrightarrow \hat{H}_m^* \hat{y}_m + z_{m+1} \beta_m &= \beta_0 \|r_0\|_2 e_1 \end{aligned}$$

となる. 最後の式を行列表現すると,

$$[\hat{H}_m^*, z_{m+1}] \begin{bmatrix} \hat{y}_m \\ \beta_m \end{bmatrix} = \beta_0 \|r_0\|_2 e_1 \quad (7)$$

であり, この式を QR 分解により, 解  $\hat{y}_m, \beta_m$  を求める. この解が求まると,

$$\hat{x}_m = \hat{x}_0 + V_m \hat{y}_m \quad (8)$$

から, シフトを行なった連立 1 次方程式の解  $\hat{x}$  が得られる.

以上の式を従来の GMRES( $m$ ) 法のアルゴリズムに組み込めば, 簡単に Shifted-GMRES( $m$ ) 法のアルゴリズムが得られる. 図 1 に Shifted-GMRES( $m$ ) 法のアルゴリズムを示す.

#### 3.3 収束性

条件 (6) を満たす行列をもつような, 式 (2) のシフトを行なった連立 1 次方程式の収束性について考える.

```

choose  $\mathbf{x}_0, \hat{\mathbf{x}}_0, \beta_0$ 
 $\mathbf{r}_0 := \mathbf{b} - A\mathbf{x}_0$ ;
 $\beta := \|\mathbf{r}_0\|_2$ ;  $\mathbf{v}_1 := \mathbf{r}_0/\beta$ ;
start
for  $n := 1$  to  $m$  do
begin
 $\hat{\mathbf{v}} := A\mathbf{v}_n$ ;
for  $i := 1$  to  $n$  do
begin
 $h_{i,n} := (\hat{\mathbf{v}}, \mathbf{v}_i)$ ;
 $\hat{\mathbf{v}} := \hat{\mathbf{v}} - h_{i,n}\mathbf{v}_i$ ;
end
 $h_{n+1,n} := \|\hat{\mathbf{v}}\|_2$ ;
 $\mathbf{v}_{n+1} := \hat{\mathbf{v}}/h_{n+1,n}$ ;
compute  $\mathbf{y}_n = \min_{\mathbf{y}} \|\beta\mathbf{e}_1 - H_n^*\mathbf{y}\|$ ;
end
 $\mathbf{x}_m := \mathbf{x}_0 + V_m\mathbf{y}_m$ ;
 $\mathbf{z}_{m+1} := \beta\mathbf{e}_1 - H_m^*\mathbf{y}_m$ ;
 $\hat{H}_m^* := H_m^* + \alpha \begin{bmatrix} I_m & \\ & 0 \end{bmatrix}$ ;
solve  $\begin{bmatrix} \hat{H}_m^* & \mathbf{z}_{m+1} \\ & \beta\mathbf{e}_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{y}}_m \\ \beta\mathbf{e}_1 \end{bmatrix} = \beta_0\beta\mathbf{e}_1$ ;
 $\hat{\mathbf{x}}_m := \hat{\mathbf{x}}_0 + V_m\hat{\mathbf{y}}_m$ ;
if  $\|\mathbf{b} - A\mathbf{x}_m\| \leq \varepsilon$  then
stop iteration
endif
 $\mathbf{x}_0 := \mathbf{x}_m$ ;  $\mathbf{r}_0 := \mathbf{b} - A\mathbf{x}_0$ ;
 $\beta := \|\mathbf{r}_0\|_2$ ;  $\mathbf{v}_1 := \mathbf{r}_0/\beta$ ;
 $\hat{\mathbf{x}}_0 := \hat{\mathbf{x}}_m$ ;  $\beta_0 := \beta_m$ ;
goto start

```

図 1 Shifted-GMRES( $m$ ) 法のアルゴリズム

なお、通常の式 (1) を解く GMRES( $m$ ) 法に関する収束性は他の文献<sup>2),5)</sup> で多数示されているので、ここでは扱わないことにする。

もし、シフトを行なった連立 1 次方程式に対する残差ノルム  $\|\hat{\mathbf{r}}\|_2$  が式 (1) の元の連立 1 次方程式に対する残差ノルム  $\|\mathbf{r}\|_2$  よりも常に小さければ、元の連立 1 次方程式よりもシフトを行なった連立 1 次方程式のほうが早く収束することになる。

ここで、 $p_{m,j}$  をリスタート  $j$  番目の  $A$  に関する多項式、つまり、

$$r_{(j+1)m} = p_{m,j}(A)r_{jm}, \quad j = 0, 1, \dots$$

となるような多項式とする。この多項式は、 $Re(\alpha) > 0$  に対して、

$$|p_{m,j}(-\alpha)| = \prod_{i=1}^m |1 + \alpha/\zeta_{j,i}| > 1$$

が成り立つ。ただし、 $\zeta_{j,i}$  は、 $p_m(\zeta_{j,i}) = 0$  となるような多項式の零点とし、条件として  $Re(\zeta_{j,i}) > 0$  とする。この式と、

$$\beta_{(j+1)m} = \beta_{jm}/p_{m,j}(-\alpha), \quad j = 0, 1, \dots$$

から、帰納的に以下の関係式が得られる。

$$|\beta_{(j+1)m}| \leq |\beta_{jm}| \leq \dots \leq |\beta_0|$$

よって、式 (4) の共線形条件より、2 つの連立 1 次方程式の残差ノルムは、

$$\begin{aligned} \|\hat{\mathbf{r}}_{jm}\|_2 &= \|\beta_{jm}\mathbf{r}_{jm}\|_2 \\ &\leq |\beta_{jm}| \|\mathbf{r}_{jm}\|_2 \\ &\leq |\beta_0| \|\mathbf{r}_{jm}\|_2 \end{aligned}$$

という関係になる。また、先に述べたように、通常は初期近似解を  $\mathbf{x}_0 = \hat{\mathbf{x}}_0 = 0$  とするので、初期残差についての式 (5) の共線形条件から  $\beta_0 = 1$  となり、結局、 $\|\hat{\mathbf{r}}\|_2 \leq \|\mathbf{r}\|_2$  となる。

従って、元の連立 1 次方程式の収束性が保証されれば、同じく、シフトを行なった連立 1 次方程式の収束性も保証され、なおかつ元の連立 1 次方程式よりも速く収束することがいえる。

### 3.4 行列の前処理

ここでは、この Shifted-GMRES( $m$ ) 法に対する行列の前処理について述べる。

シフトを扱う連立 1 次方程式は、通常式 (1) の連立 1 次方程式にかかわって、

$$(mI - D)\mathbf{x} = \mathbf{b}, \quad m \in \mathbb{R}, \quad D \in \mathbb{C}^{n \times n} \quad (9)$$

という形をしている<sup>4)</sup>。ただし、 $I$  は  $n \times n$  の単位行列とし、 $\mathbf{x}, \mathbf{b}$  は式 (1) のものと同じである。この連立 1 次方程式は条件 (6) を満たしている。例えば、偏微分方程式を離散化した場合、この係数行列  $(mI - D)$  を決定するにあたり、格子点を「チェッカーボード形式 (checker board manner)」で順序づけすれば、行列  $D$  は

$$D = \begin{bmatrix} 0 & D_{oe} \\ D_{oe} & 0 \end{bmatrix}$$

というように、ブロック形式で書き下せる。同様にして、 $\mathbf{x}, \mathbf{b}$  に対してもブロック形式に分割すると、

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} \mathbf{x}_e \\ \mathbf{x}_o \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} \mathbf{b}_e \\ \mathbf{b}_o \end{bmatrix}$$

となる。これらを式 (9) に代入して整理すると、

$$(m^2I - D_{oe}D_{eo})\mathbf{x}_o = m\mathbf{b}_o + D_{oe}\mathbf{b}_e \quad (10)$$

$$\mathbf{x}_e = \frac{1}{m}(\mathbf{b}_e + D_{eo}\mathbf{x}_o) \quad (11)$$

という 2 つの式が得られる。この上の式 (10) は左辺の係数行列の次元がおよそ半分になっているので、計算時間が短縮できることになる。そして、これらの解  $\mathbf{x}_o, \mathbf{x}_e$  を順に計算すれば、最終的な解  $\mathbf{x}$  が求まることになる。

しかし、式 (10) の右辺項  $m\mathbf{b}_o + D_{oe}\mathbf{b}_e$  は、 $m$  に依存しているため、 $\mathbf{b}_o = 0$  でない限りシフトを行なう際にうまく  $\mathbf{x}_o$  を計算することができない。ここで、式 (10) をさらに 2 つに分ける。

$$(m^2I - D_{oe}D_{eo})\mathbf{x}_{o,1} = \mathbf{b}_o \quad (12)$$

$$(m^2I - D_{oe}D_{eo})\mathbf{x}_{o,2} = D_{oe}\mathbf{b}_e \quad (13)$$

こうすると、式 (10) に比べ 2 つの解  $\mathbf{x}_{o,1}, \mathbf{x}_{o,2}$  を求めることになり、2 倍のコストがかかってしまうが、 $\mathbf{b}_o \neq 0$  のときでも計算が可能になる。この場合は、

$$\mathbf{x}_o = m\mathbf{x}_{o,1} + \mathbf{x}_{o,2}$$

とすれば、シフトを行なった連立 1 次方程式に対して

表 1 Origin2000 の仕様

OS	IRAX6.5
セルプロセッサ	MIPS R10000 195MHz
セルローカルメモリ	512MB

も解  $x_0$  が求まる.

このように前処理を施せば, 右辺項  $b$  がシフトを行なったときでも, 元の連立 1 次方程式のものと変わらずに, 計算ができるようになる.

#### 4. 数値実験

本稿で述べた Shifted-GMRES( $m$ ) 法を共有メモリ型並列計算機 Origin2000 に実装し従来の GMRES( $m$ ) 法と比較した数値実験を行なった. なお, 並列計算機 Origin2000 の仕様を表 1 に示しておく.

実装での並列化した部分は, ベクトルとベクトルの和, ベクトルのスカラー倍, ベクトルの内積, 行列とベクトルの積, の 4 つとした. 使用するプロセッサの数を 4 つとし, ベクトルの次元を  $n$  とすると, 各プロセッサが担当する要素の数を  $n/4$  と均等に割り当てるようにした.

しかし上記の並列化とは別に, 従来の GMRES( $m$ ) 法において各連立 1 次方程式に対して同数のプロセッサを用い, 1 度に各連立 1 次方程式を解く方法が考えられるが, その並列化には多くのプロセッサが必要となって実用的でなくなってしまう. それに加え, ここでは Shifted-GMRES( $m$ ) 法と同一の並列化で数値実験を行なうようにしたため, 今回は以上の 4 箇所の並列化にとどめた.

また, 数値実験は以下の環境で行なった.

- 収束判定条件:  $\|r_m\|_2/\|b\|_2 \leq 1.0 \times 10^{-8}$
- 最大反復回数: 10000
- 初期近似解:  $x_0 = \hat{x}_0 = (0, 0, \dots, 0)^T$
- プログラム言語: C 言語
- 計算精度: 倍精度

##### 4.1 数値例 1

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

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

ただし, メッシュ幅を  $h = 1/129$  として, この方程式を 5 点中心差分近似を用いて離散化する. これにより得られた行列の次元は 16384 である. 真の解を  $u(x, y) = 1 + xy$  と設定して右辺を決定し,  $Dh = 2^{-5}, 2^{-4}, \dots, 2^{-1}$  と変化させる.

ここで得られた連立 1 次方程式は, 式 (9) の形  $((mI - D)x = b)$  となっている. ここで例として, この連立 1 次方程式にシフトを行なった, 4 種類の連立 1 次方程式を考える. なお, シフトを行なった行列  $(\hat{A} = A + \alpha I)$  に対する  $\alpha$  の値は, それぞれ

$\alpha_1 = 0.01, \alpha_2 = 0.02, \alpha_3 = 0.03, \alpha_4 = 0.04$  とした. つまり, これら 4 つのシフトを行なったものと元の連立 1 次方程式の 5 つを順次計算することにする.

ただし, 従来の GMRES( $m$ ) 法は通常は 1 つの連立 1 次方程式を解くため, ここでは 5 つのシステムを連続的に解くような GMRES( $m$ ) 法を用いる. その際, 次の連立 1 次方程式を解くときの初期近似解として,  $x = \hat{x} = 0$  とするのではなく, その 1 つ前の連立 1 次方程式の最終近似解を利用する. 各連立 1 次方程式の解く順番は,  $\alpha_4, \alpha_3, \alpha_2, \alpha_1$  の順にシフトを行なった連立 1 次方程式を解いていき, 最後に元の連立 1 次方程式を解くことにする.

一方, Shifted-GMRES( $m$ ) 法は, 元の連立 1 次方程式から解き始め, シフトを行なった連立 1 次方程式は従来の GMRES( $m$ ) 法と同じ順番で解いていくことにする. 共線形条件の  $\beta_0$  については, 初期近似解が  $x = \hat{x} = 0$  なので,  $\beta_0 = 1$  とする. ただし, 両方の算法のリスタート周期は  $m = 10, 20, \dots, 50$  と変化させて数値実験を行なった.

この結果を表 2 に示す. ここでの結果は, 各解法に対する行列とベクトルの積の回数 ( $\approx$  反復回数) と, 計算時間を表した.

この表からまず分かるのは, どの  $Dh$  の値でも常に Shifted-GMRES( $m$ ) 法が従来の GMRES( $m$ ) 法よりも速く収束していることである. しかも, Shifted-GMRES( $m$ ) 法と従来の GMRES( $m$ ) 法のリスタート周期  $m$  が同じなら, 必ず Shifted-GMRES( $m$ ) 法のほうが速く収束し, その計算時間は従来の GMRES( $m$ ) 法に比べ, 40% から最大で 70% 近く短縮している. 計算コストのかかる行列とベクトルの積に至っても, Shifted-GMRES( $m$ ) 法のほうが少なく, この結果が計算時間に多大な影響を与えていることがわかる.

偏微分方程式から得られた係数行列において非対称性の強い  $Dh = 2^{-1}$  のときに行列とベクトルの積の回数が最も少なく, その分, 計算時間も最も短くなっている. 逆に, 非対称性の弱い  $Dh = 2^{-5}$  のときに行列とベクトルの積の回数が最も多くなり, 計算時間も遅くなっている. これは, GMRES( $m$ ) 法が非対称行列に対して有効な手段であり, その性質が同じく Shifted-GMRES( $m$ ) 法にも当てはまる.

また, 図 2 と図 3 に計算時間が最も削減できた  $Dh = 2^{-2}$  における Shifted-GMRES(10) 法と従来の GMRES(10) 法を比較したグラフを示すことにする. 図 2 には, 行列とベクトルの積の回数と相対残差ノルム  $\|r_m\|_2/\|b\|_2$  による収束の様子を示し, 図 3 には, 計算時間と相対残差ノルムによる収束の様子を示す.

従来の GMRES( $m$ ) 法では, 各 5 つの線形システムについて順次解いていくため, そのグラフは 5 つの収束点が現れることになる. 2 つめ以降の連立 1 次方程式の初期残差は, ほぼ  $10^{-2}$  である. それに対し,

表 2 数値例 1 の結果 (mat : 行列とベクトルの積の回数, sec : 計算時間 (s))

Dh	$2^{-5}$		$2^{-4}$		$2^{-3}$		$2^{-2}$		$2^{-1}$	
	mat	sec	mat	sec	mat	sec	mat	sec	mat	sec
GMRES(10)	4829	226.20	3466	156.94	2287	103.49	1694	76.98	1377	62.23
GMRES(20)	1967	137.78	1709	119.75	1394	97.53	1339	93.37	1344	94.62
GMRES(30)	1628	152.59	1418	133.54	1221	115.88	1336	125.38	1517	143.70
GMRES(40)	1425	171.82	1287	162.82	1254	149.30	1324	161.32	1477	176.99
GMRES(50)	1301	186.86	1203	176.43	1198	175.17	1358	202.29	1607	232.91
Shifted-GMRES(10)	3616	164.07	2187	100.80	824	40.09	494	25.18	448	23.66
Shifted-GMRES(20)	1180	85.09	879	64.16	493	36.88	463	35.64	524	41.87
Shifted-GMRES(30)	972	94.86	638	61.74	531	52.02	498	49.82	610	61.66
Shifted-GMRES(40)	940	120.32	648	80.93	586	74.38	534	69.79	780	99.61
Shifted-GMRES(50)	812	124.59	654	102.00	634	98.10	583	88.35	677	108.06

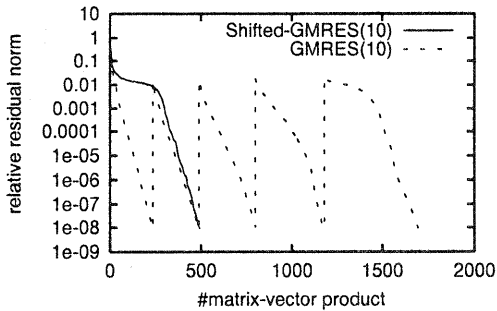


図 2 数値例 1 ( $Dh = 2^{-2}$ ) における行列ベクトル積と残差の推移

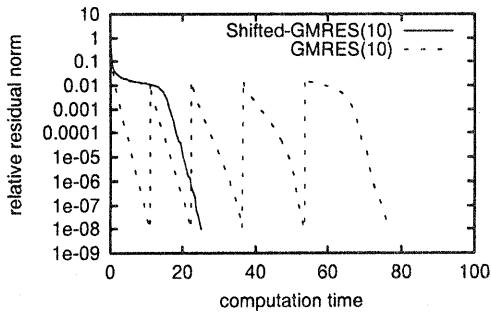


図 3 数値例 1 ( $Dh = 2^{-2}$ ) における計算時間と残差の推移

Shifted-GMRES( $m$ ) 法では元の連立 1 次方程式のみの収束点が見られるが、これは元の連立 1 次方程式が解いた時点で他の 4 つの連立 1 次方程式を全て解いていることを表している。いずれにしても、これらのグラフから行列とベクトルの積の回数と計算時間どちらにおいても Shifted-GMRES( $m$ ) 法の高い効果がわかる。

#### 4.2 数値例 2

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

$$\begin{aligned}
 -u_{xx} - u_{yy} + D\{(y-1/2)u_x(x, y) \\
 + (x-1/3)(x-2/3)u_y(x, y)\} &= G(x, y) \\
 u(x, y)|_{\partial\Omega} &= 1 + xy
 \end{aligned}$$

ただし、メッシュ幅を  $h = 1/129$  として、この方程式を 5 点中心差分近似を用いて離散化する。これにより得られた行列の次元は 16384 である。真の解を  $u(x, y) = 1 + xy$  と設定して右辺を決定し、 $Dh = 2^{-5}, 2^{-4}, \dots, 2^{-1}$  と変化させる。

ここでシフトを行なう際の  $\alpha$  の値は、数値例 1 と同様にしてそれぞれ  $\alpha_1 = 0.01, \alpha_2 = 0.02, \alpha_3 = 0.03, \alpha_4 = 0.04$  とした。また、 $\beta_0 = 1$  とし、リスタート周期に関する  $m = 10, 20, \dots, 50$  と変化させて数値実験を行なった。

この結果を表 3 に示す。ここでの結果も、各算法に対する行列とベクトルの積の回数と、計算時間を表した。

この例に関しても、どの  $Dh$  の値でも常に Shifted-GMRES( $m$ ) 法が従来の GMRES( $m$ ) 法よりも速く収束している。計算時間の比較では数値例 1 よりも若干効果が低いが、それでも 30% から 40% ほど短縮している。行列とベクトルの積の回数においても Shifted-GMRES( $m$ ) 法のほうが少なく、各算法ともリスタート周期  $m$  が大きいほど、その回数は少なくなっている。

$Dh$  の値が小さいと、 $Dh$  の値が大きいときに比べやはり多くの計算時間がかかるが、その差は数値例 1 よりも小さくなっている。これは、数値例 2 で得られる行列の非対称性が  $Dh$  の値に左右されにくいからである。

また、図 4 と図 5 に計算時間の削減が比較的大きい、 $Dh = 2^{-4}$  における Shifted-GMRES(50) 法と従来の GMRES(50) 法を比較したグラフを示すことにする。図 4 には、行列とベクトルの積の回数と相対残差ノルムによる収束の様子を示し、図 5 には、計算時間と相対残差ノルムによる収束の様子を示す。

従来の GMRES(50) 法のグラフを見れば分かる通り、元の連立 1 次方程式に比べると、シフトを行なった連立 1 次方程式にかかった計算時間が 4 つともはるかに少ない。この結果、シフトを行なった連立 1 次方程式に対して有効な Shifted-GMRES( $m$ ) 法の効果が薄くなり、計算時間の削減に影響を与えている。つまり、従来の GMRES( $m$ ) 法においてシフトを行なった連立 1 次方程式にかかる計算時間が長いほど、

表 3 数値例 2 の結果 (mat : 行列とベクトルの積の回数, sec : 計算時間 (s))

Dh	$2^{-5}$		$2^{-4}$		$2^{-3}$		$2^{-2}$		$2^{-1}$	
	mat	sec	mat	sec	mat	sec	mat	sec	mat	sec
Method										
GMRES(10)	6065	309.29	5791	294.87	4797	244.21	3417	174.07	3437	175.30
GMRES(20)	3193	243.20	3116	237.17	2801	212.92	2377	180.90	2132	162.13
GMRES(30)	2317	234.47	2279	231.59	1967	198.48	1747	175.77	1966	197.90
GMRES(40)	1907	242.71	1867	249.91	1790	226.80	1700	214.93	1935	246.93
GMRES(50)	1615	251.14	1626	260.81	1626	245.81	1523	228.18	1856	281.77
Shifted-GMRES(10)	4910	249.71	4583	238.16	3108	159.82	2143	111.27	2329	120.43
Shifted-GMRES(20)	2418	186.15	2279	182.20	1505	116.74	1843	142.47	1608	124.85
Shifted-GMRES(30)	1661	167.33	1617	163.26	1433	144.52	1394	141.98	1084	111.55
Shifted-GMRES(40)	1263	165.95	1248	165.61	1070	141.23	919	119.52	1103	144.40
Shifted-GMRES(50)	974	156.88	965	150.87	900	139.79	879	136.76	1015	158.95

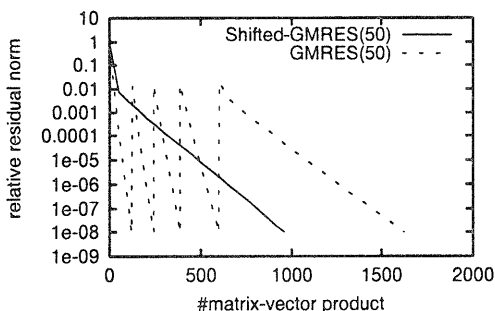


図 4 数値例 2 ( $Dh = 2^{-4}$ ) における行列ベクトル積と残差の推移

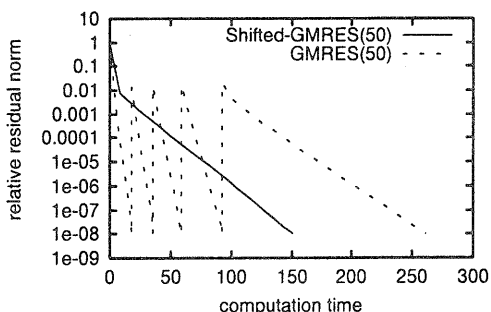


図 5 数値例 2 ( $Dh = 2^{-4}$ ) における計算時間と残差の推移

Shifted-GMRES( $m$ ) 法の効果があらわれている。

## 5. おわりに

上記の数値実験では、従来の GMRES( $m$ ) 法と比較することによって、Shifted-GMRES( $m$ ) 法の有効性を示した。どの数値実験に関してもシフトを行なったものに対する Shifted-GMRES( $m$ ) 法の効果の高さがうかがえる。特に、前述のように従来の GMRES( $m$ ) 法がシフトを行なった連立 1 次方程式を解く計算時間が長ければ長い程、その効果は高いものとなる。

この裏付けとして、Shifted-GMRES( $m$ ) 法はアーノルディ過程による基底行列の生成のための計算コス

トのかかる行列とベクトルの積をなくし、シフトを行なった連立 1 次方程式を解くのにそれほど計算時間がかからないためである。また、以上の実験結果から、まるで元の連立 1 次方程式のみを解いているような計算時間しか必要としないことからわかる。

また、実験結果とともに注目すべきことは、この Shifted-GMRES( $m$ ) 法のアルゴリズムは、従来の GMRES( $m$ ) 法のアルゴリズムに少し書き加えるといった比較的プログラムしやすいものである。この利点は非常に価値のあるものであり、幅広い応用が可能である。しかし、この Shifted-GMRES( $m$ ) 法のアルゴリズムには前処理やリスタート周期、並列化等の改善がまだまだ可能であると思われる。今後の研究としてこれらを考えていきたい。

## 参考文献

- 1) R. Freund : Solution of shifted linear systems by quasi-minimal residual iterations, in *Numerical Linear Algebra*, L. Reichel, A. Ruttan, and R. S. Varga, eds., de Gruyter, Berlin, pp. 101-121 (1993).
- 2) Y. Saad : Iterative methods for sparse linear systems, *PWS Publishing, Boston, MA*, (1996).
- 3) A. Frommer and U. Glässner : Restarted GMRES for shifted linear systems, *SIAM J. Sci. Comput.*, Vol. 19, No. 1, pp. 15-26 (1998).
- 4) K. Wilson : Quarks and strings on a lattice, in *New Phenomena in Subnuclear Physics*, A. Zichichi, ed., Plenum, New York, pp. 69-142 (1975).
- 5) Y. Saad and M. H. Schultz : GMRES: A generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems. *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, Vol. 7, pp. 856-869 (1986).
- 6) W. Joubert : Lanczos methods for the solution of nonsymmetric systems of linear equations, *SIAM J. Matrix. Anal. Appl.*, Vol. 13, pp. 928-943 (1992).