

波浪回折問題のための境界要素法への GMRES-IR の適用

Application of the Implicitly Restarting GMRES (GMRES-IR) to the Boundary Element Analysis for Wave Diffraction Problems

巻幡憲俊*・宇都宮智昭**・渡邊英一***

Noritoshi MAKIHATA, Tomoaki UTSUNOMIYA and Eiichi WATANABE

*理修 京都大学大学院 工学研究科社会基盤工学専攻 (〒 606-8501 京都市左京区吉田本町)

**正会員 工博 京都大学助教授 大学院工学研究科社会基盤工学専攻 (〒 606-8501 京都市左京区吉田本町)

***フェロー Ph.D., 工博 京都大学教授 大学院工学研究科社会基盤工学専攻 (〒 606-8501 京都市左京区吉田本町)

The generalized minimal residual method (GMRES) is a well-known iterative method for solving large non-Hermitian linear systems of equations. Since GMRES becomes increasingly expensive and requires more storage as the iteration proceeds, it generally uses restarting, which slows the convergence. However, if the new starting vector is chosen appropriately at the time of the restart, this can improve the convergence. By the implicitly restarting GMRES (GMRES-IR) method, approximate eigenvectors determined from the previous subspace are included in the new subspace and this deflates the smallest eigenvalues. We apply this GMRES-IR method for the analysis of the boundary value problem related to the diffraction wave field around a Very Large Floating Structure (VLFS) and compare it with the usual GMRES method.

Key Words : GMRES, GMRES-IR, iterative methods, non-Hermitian systems, VLFS, boundary element method, fast multipole method

1. はじめに

波動方程式や水波の回折・散乱に関する境界値問題を境界要素法により離散化すると、非 Hermite 行列を係数とする連立一次方程式 $Ax = b$ が現れる。問題の規模が大きくなると、直接法により連立一次方程式を解くのは困難となり反復法が用いられる。その代表例が generalized minimal residual method (GMRES)¹⁾ である。しかし、GMRES は収束に到るまでの反復回数が増えるに従って計算量および記憶容量をたくさん必要とするため、行列のサイズが大きい場合は用いることができない。このため、記憶容量を抑えたりスタート版 GMRES(M)¹⁾ が実際には用いられる場合が多いが、GMRES(M) の問題は M を行列のサイズより小さく選ぶと解に収束しない例が存在することである。また GMRES が実際に適用できる問題で GMRES と比較すると、 M を小さくしていくに従って収束回数が GMRES のそれよりも大変大きくなる。

そこで、記憶容量を GMRES(M) と同じくらいに抑えつつ、収束性の向上を目指したものとして implicitly restarted GMRES (GMRES-IR)²⁾ が開発された。GMRES(M) では、その残差の最小性を実現する Krylov 部分空間はリスタートをするときにすべて捨てられる。一方、GMRES-IR ではリスタートの際に、近似固有ベクトル列が張る部分空間に圧縮して新しく生成される探索空間に含ませられるので GMRES(M) に比べより多くの情報を残すことができ、従って収束性の改善が期待できる。

まず第 2 章では GMRES-IR を具体的なアルゴリズムを含めて詳しく紹介する。第 3 章では GMRES-IR を超大型浮体まわりの回折波浪場に関する境界値問題の

解析に実際に適用し、そのベンチマーク計算の結果から本手法の有効性について検討する。第 4 章では本論文の内容を簡単にまとめる。

2. GMRES-IR

連立一次方程式を反復法により解く方法の一つとして GMRES-IR²⁾ がある。GMRES-IR はリスタート時に、構成された Krylov 部分空間を絶対値の小さい固有値に対応する固有ベクトルを近似する harmonic Ritz ベクトル列が張る部分空間に圧縮し、新しく生成される探索空間に含ませる。harmonic Ritz value は絶対値の小さい固有値を表す傾向にあるため、GMRES-IR が構成していく探索空間は絶対値の小さい固有値列に対応する固有ベクトル列が張る A -不変部分空間³⁾ に近づいていく傾向にある。構成された Krylov 部分空間は絶対値の大きい固有値列に対応する A -不変部分空間を近似する傾向にある⁴⁾ ため、計算された harmonic Ritz value 列のうち絶対値の小さいものに対応する harmonic Ritz ベクトル列を保存することにより、生成される探索空間は停滞しにくくなる。また、探索空間が A -不変部分空間を含めば停止する。

harmonic Ritz ベクトル列は陰的に構成されるため、そのベクトル列を保存するための新たな記憶領域を用意する必要がない。一方、GMRES-IR が構成していく探索空間は、GMRES が構成していく探索空間の部分空間になるので、GMRES より速く収束することはない。なお、以下で扱う行列およびベクトルは全て複素数を成分とするものとする。

ここでは、GMRES-IR を構成している方法を 7 つの節に分けて説明する。第 1 節では Arnoldi 法を説明する。

第2節ではQR分解を説明する。第3節ではharmonic Ritz valueの定義を与える。第4節ではharmonic Ritz valueを計算する方法としてQR法を使う。第5節ではharmonic Ritzベクトル列が張る部分空間がIRAにより得られることを説明する。第6節において、implicitly restarted Arnoldi (IRA)⁵⁾により得られた部分空間を使ってリスタートできることを説明する。最後の第7節ではGMRES-IRの具体的なアルゴリズムを与える。

2.1 Arnoldi 法

行列 A を固有値問題における中間形である Hessenberg 形⁶⁾に変換する方法として Arnoldi 法^{1),2),5),6)}がある。Arnoldi 法はまた連立一次方程式の解法である GMRES にも使われる。

Arnoldi 法

```
初期ベクトル  $v_1, (\|v_1\| = 1)$  をとる;
for  $k = 1, \dots, M$  do
  begin
     $h_{ik} = (Av_k, v_i), (i = 1, \dots, k);$ 
     $v_{k+1} = Av_k - \sum_{i=1}^k v_i h_{ik};$ 
     $h_{k+1,k} = \|v_{k+1}\|;$ 
     $v_{k+1} = v_{k+1}/h_{k+1,k}$ 
  end
```

H_M を Arnoldi 法により得られる $M \times M$ の Hessenberg 行列とする。 $\bar{H}_M$ を Arnoldi 法により得られる $(M+1) \times M$ の行列とする。 V_M を v_1 から v_M を並べた $N \times M$ の行列とする。また e_M は第 M 成分のみが 1 である単位ベクトルである。このとき次の関係が成立する。

$$\begin{aligned} AV_M &= V_M H_M + h_{M+1,M} v_{M+1} e_M^H \\ &= V_{M+1} \bar{H}_M. \end{aligned} \quad (1) \quad (2)$$

ここでは、ノルムが 1 である N 次元ベクトル v_1 から $(M+1) \times M$ 行列 $\bar{H}_M$ と $N \times (M+1)$ 行列 V_{M+1} を求めるために Arnoldi 法を使う。

2.2 QR 分解

最小 2 乗問題⁶⁾の解法に、また固有値計算法の一つである QR 法に QR 分解⁶⁾は使われる。 $M \times M$ 行列 H 、または $(M+1) \times M$ 行列 $\bar{H}$ を QR 分解する方法には、修正 Gram-Schmidt 法、Householder 変換による方法そして Givens 変換による方法があるが、ここでは Householder 変換⁶⁾による方法で求める。

2.3 harmonic Ritz value

harmonic Ritz value²⁾は大規模な行列 A の絶対値の小さい固有値を近似する値である。harmonic Ritz value $\tilde{\theta}_i$ と $\tilde{g}_i \neq 0$ は次式で定義され、 $\tilde{\theta}_i$ は A^{-1} の $Av_1, \dots, Av_M$ が張る部分空間に関する固有値の逆数になっている。

$$(AV_M)^H A^{-1} (AV_M) \tilde{g}_i = \frac{1}{\tilde{\theta}_i} (AV_M)^H (AV_M) \tilde{g}_i. \quad (3)$$

また、上の式は次の形に変形できる。

$$(H_M + |h_{M+1,M}|^2 H_M^{-H} e_M e_M^H) \tilde{g}_i = \tilde{\theta}_i \tilde{g}_i. \quad (4)$$

$G = H_M + |h_{M+1,M}|^2 H_M^{-H} e_M e_M^H$ は Hessenberg 行列であるので次節の QR 法によりその固有値が計算される。harmonic Ritz ベクトル $\tilde{g}_i$ は次で定義される。

$$\tilde{g}_i = V_M \tilde{g}_i. \quad (5)$$

Ritz value^{2),5)}は A の $v_1, \dots, v_M$ が張る部分空間に関する固有値、すなわち H_M の固有値で A の絶対値の大きい固有値を表す傾向にある⁴⁾ので、harmonic Ritz value は A の絶対値の小さい固有値を表す傾向にある。

2.4 QR 法

QR 法は小規模な問題に対して固有値を数値的に求める方法である。Hessenberg 行列 G の固有値の絶対値が全て異なっていれば、QR 法により G は上三角行列に収束し、その収束速度は G の固有値の比で決まっている。ここでは、QR 法の収束を加速したシフト付き QR 法⁶⁾により harmonic Ritz value を求める。

また IMSL⁷⁾で G の固有値を求めるときは、 G は Hessenberg 行列であるので EVLCH/DEVLCH を使えばよい。

2.5 IRA

implicitly restarted Arnoldi (IRA)⁵⁾は大規模な問題に対して行列 A の固有値の一部に限られた記憶容量の中で求める方法である。この方法はリスタートの時に、今まで構成された近似固有空間を初期探索空間とすることにより、近似固有値の誤差を減らすことを可能にする。IRA は Ritz value をシフトに用いることにより A の絶対値の大きい固有値を、harmonic Ritz value をシフトに用いることにより絶対値の小さい固有値を求めることができる。Ritz value は A の絶対値の大きい固有値を、harmonic Ritz value は A の絶対値の小さい固有値を近似する傾向がある⁴⁾。

IRA

探索空間の最大の次元 M 、リスタート時に保存するベクトルの数 K を選ぶ;

$P = M - K$;

Hessenberg 行列 H_M を渡す。

シフト $\mu_1, \dots, \mu_P$ を選ぶ;

$Q = I_M$;

for $k = 1, \dots, P$ do

begin

$H_M - \mu_k I_M = Q^{(k)} R^{(k)}$ と QR 分解する;

$H_M = \mu_k I_M + R^{(k)} Q^{(k)}$;

$Q = Q Q^{(k)}$

end

$v_{K+1} = v_{M+1} h_{M+1,M} e_M^H Q e_K + V_M Q e_{K+1} h_{K+1,K}$;

$V_K = V_M Q (e_1, \dots, e_K)$;

$h_{K+1,K} = \|v_{K+1}\|$;

$v_{K+1} = v_{K+1}/h_{K+1,K}$

このとき、更新された V_{K+1} と $\bar{H}_K$ の間には $AV_K = V_{K+1}\bar{H}_K$ の関係がある。また H_K が Hessenberg 形となるように v_{K+1} を定めているので、Arnoldi 法を $K+1$ 回目から始めることができる。

また、シフト $\mu_1, \dots, \mu_P$ を harmonic Ritz value 列 $\tilde{\theta}_1, \dots, \tilde{\theta}_P$ に選ぶと、更新された $v_1, \dots, v_K$ が張る部分空間は残りの harmonic Ritz value 列 $\tilde{\theta}_{P+1}, \dots, \tilde{\theta}_M$ に対応する harmonic Ritz ベクトル列が張る部分空間に等しくなる。

ここでは、 $M \times M$ の Hessenberg 行列 H_M として Ritz value を固有値とする行列 H_M を渡し、シフト $\mu_1, \dots, \mu_P$ として $\tilde{\theta}_1, \dots, \tilde{\theta}_M$ のなかで絶対値が大きい P 個をシフトに選ぶことにより、 V_{K+1} と $\bar{H}_K$ を IRA により更新する。このとき、絶対値の小さい harmonic Ritz value 列に対応する harmonic Ritz ベクトル列が張る部分空間は $v_1, \dots, v_K$ が張る部分空間に等しい。その詳細を付録に示す。

2.6 GMRES-IR

以上で準備が終わり、GMRES-IR²⁾ のアルゴリズムとその記憶容量に関する説明に入る。GMRES-IR は、リスタート版 GMRES(M) に harmonic Ritz value 列の情報を組み込んだものである。始めに GMRES を M 回実行し、その次に harmonic Ritz value 列を QR 法で計算する。計算した harmonic Ritz value 列の絶対値が大きい P 個をシフトに選び、IRA により絶対値の小さい harmonic Ritz value 列に対応する harmonic Ritz ベクトル列が張る K 次元の部分空間を求める。この部分空間を次に生成する探索空間に含ませてリスタートする。ここで R_M は $\bar{R}_M$ の第 $M+1$ 行を除いた行列、 $\bar{f}$ は $\bar{f}$ の第 $M+1$ 成分を除いたベクトルである。

GMRES-IR

1. 探索空間の最大の次元 M 、リスタート時に保存する harmonic Ritz ベクトルの数 K を選ぶ;
 $P = M - K$;
初期ベクトル x_0 を取る;
 $r_0 = b - Ax_0$;
 $v_1 = r_0 / \|r_0\|$;
 $\bar{f} = \|r_0\|e_1$;
2. Arnoldi 法により V_{M+1} と $\bar{H}_M$ を求める;
 $\bar{H}_M = \bar{Q}_M \bar{R}_M$ と QR 分解する; $\bar{f} = \bar{Q}_M^H \bar{f}$;
3. $x_M = x_0 + V_M R_M^{-1} \bar{f}$;
 $\bar{f} = \bar{Q}_M e_{M+1} e_{M+1}^H \bar{f}$; $r_M = V_{M+1} \bar{f}$;
 $r_M = b - Ax_M$;
 $G = H_M + |h_{M+1,M}|^2 H_M^{-H} e_M e_M^H$;
4. QR 法により G の固有値である harmonic Ritz value $\tilde{\theta}_1, \dots, \tilde{\theta}_M$ を求める;
 $\tilde{\theta}_1, \dots, \tilde{\theta}_M$ を並び替えて、 $|\tilde{\theta}_1| \geq \dots \geq |\tilde{\theta}_M|$ となるようにする;
5. シフトを $\tilde{\theta}_1, \dots, \tilde{\theta}_P$ として、IRA により V_{K+1} と $\bar{H}_K$ を更新する;
 $\bar{f} = V_{K+1}^H r_M$;
Arnoldi 法の $K+1$ 回目へ進む。

IRA から得られるユニタリ行列 Q は、その (i, j) 成分が $i > P + j$ のとき 0 であることに注意して、

$v_1, \dots, v_{K+1}$ を $F(\text{restart}, i) = i - 1 + \text{restart} \times P \pmod{(M+1)}$ という関数を用いて、 $u_{F(\text{restart}, i)} = v_i$ というように、リスタートごとに P づつ右にずらして更新する。 H_M が逆行列を持たないときは本方法はブレイクダウンすることになるが、その際は通常の GMRES(M) でリスタートすればよい。

r_M は更新された $v_1, \dots, v_{K+1}$ たちが張る部分空間に属しており、 $r_M = V_{K+1} \bar{f}$ と表わされるので、リスタートができる。

更新された $v_1, \dots, v_{K+1}$ たちが張る部分空間はまた Krylov 部分空間であり²⁾、リスタートをしない GMRES が生成する探索空間の部分空間である。このため、GMRES-IR は GMRES より速く収束することはない。 K を 0 にとれば、GMRES-IR($M, 0$) は通常の GMRES(M) である。記憶容量は通常の GMRES(M) と比べて $M^2 + M$ だけ増加するが、 F という関数を用いたためベクトル列を保存するためのこれ以上の記憶領域を用意する必要はない。また探索空間の中で最小条件を満足しているので、残差が振動することなく、反復回数の増加に対して単調に減少する。

2.7 GMRES-IR のアルゴリズム

ここでは、GMRES-IR のアルゴリズムを前節より詳細に与える。GMRES-IR、GMRES(kk, mm)、 $F(\text{rest}, i)$ の 3 つのアルゴリズムを載せている。 Q と行列の形で書いているが、これらは Householder 変換 $H(w_k)$ の積であるから、 M 次元ベクトルである α と β に記憶されている。すなわち、 $H(w_k) = I_M - \frac{2}{\|w_k\|^2} w_k w_k^H$, $w_k = \alpha_k e_k + \beta_k e_{k+1}$ である。 $u_{F(\text{rest}, *), M}$ は $u_{F(\text{rest}, 1)}, \dots, u_{F(\text{rest}, M)}$ を並べた行列である。 $\alpha_k^*, \beta_k^*, \rho^*$ はそれぞれ α_k, β_k, ρ の共役複素数である。 tol は 1 よりも小さく、マシンイプシロンよりも大きい実数である。

また、GMRES(kk, mm) は $kk+1$ 回目から mm 回目までの GMRES であり、リスタートの時に $K+1$ 回目の GMRES 法から始めるため GMRES-IR から分離させた。 ρ は $H_M = QR$ と QR 分解したときの R の第 (M, M) 成分であり、 $H_M^{-H} e_M = \frac{1}{\rho} Q e_M$ となる。 $F(\text{rest}, i)$ はリスタート時に更新された $v_1, \dots, v_{K+1}$ の保存に用いられる。更新された $\bar{f}$ は第 1 成分から第 K 成分まで 0 であるので 0 を代入した。

GMRES-IR

1. M, K を選ぶ; $P = M - K$ とおく;
 $\text{iter} = 0$; $\text{rest} = 0$;
初期ベクトル x を取る; $r = b - Ax$;
 $u_{F(\text{rest}, 1)} = r / \|r\|$; $f_1 = \|r\|$;
2. GMRES($U, \bar{H}, \alpha, \beta, \bar{G}, \rho, \bar{f}, 0, K, \text{iter}, \text{rest}$) を呼ぶ;
GMRES($U, \bar{H}, \alpha, \beta, \bar{G}, \rho, \bar{f}, K, M, \text{iter}, \text{rest}$) を呼ぶ;
3. $\text{rest} = \text{rest} + 1$;
 $x = x + U_{F(\text{rest}-1, *)} G_M^{-1} \bar{f}$;
for $i = M, \dots, 1$ do
begin
 $w = \frac{2}{|\alpha_i|^2 + |\beta_i|^2} \beta_i^* f_{i+1}$;
 $f_i = -\alpha_i w$; $f_{i+1} = f_{i+1} - \beta_i w$
end

```

 $r = U_{F(rest-1,*)} \bar{f};$ 
 $r = b - Ax;$ 
for  $j = 1, \dots, M-1$  do
  begin
    for  $i = 1, \dots, j+1$  do
      begin
         $g_{ij} = h_{ij}$ 
      end
    end
     $g_{MM} = \frac{|h_{M+1,M}|^2}{\rho^*};$ 
    for  $i = M-1, \dots, 1$  do
      begin
         $w = \frac{2}{|\alpha_i|^2 + |\beta_i|^2} \beta_i^* g_{i+1,M};$ 
         $g_{iM} = -\alpha_i w; g_{i+1,M} = g_{i+1,M} - \beta_i w$ 
      end
    end
    for  $i = 1, \dots, M$  do
      begin
         $g_{iM} = h_{iM} + g_{iM}$ 
      end
    end
  end
4. QR 法により  $G$  の固有値  $\tilde{\theta}_1, \dots, \tilde{\theta}_M$  を求める;
 $\tilde{\theta}_1, \dots, \tilde{\theta}_M$  を並び替えて、 $|\tilde{\theta}_1| \geq \dots \geq |\tilde{\theta}_M|$ 
となるようにする;
5.  $G = I_M;$ 
for  $k = 1, \dots, P$  do
  begin
     $H_M - \tilde{\theta}_k I_M = Q^{(k)} H_M$  と QR 分解する;
     $H_M = \tilde{\theta}_k I_M + H_M Q^{(k)};$ 
     $G = G Q^{(k)}$ 
  end
  end
 $u_{F(rest,K+1)} = u_{F(rest-1,M+1)} h_{M+1,M} e_M^H G e_K$ 
 $+ U_{F(rest-1,*)} G e_{K+1} h_{K+1,K};$ 
for  $k = K, \dots, 1$  do
  begin
     $u_{F(rest,k)} = u_{F(rest-1,P+k)} e_{P+k}^H G e_k$ 
 $+ U_{F(rest-1,*)} (P+k-1) G e_k;$ 
  end
  end
 $h_{K+1,K} = \|u_{F(rest,K+1)}\|;$ 
 $u_{F(rest,K+1)} = u_{F(rest,K+1)} / h_{K+1,K};$ 
 $\bar{f} = U_{F(rest,*)}^{H,K+1} \bar{r};$ 
 $\bar{H}_K = \bar{Q}_K \bar{G}_K$  と QR 分解する;
 $\bar{f} = \bar{Q}_K^H \bar{f};$ 
for  $i = 1, \dots, K$  do
  begin
     $f_i = 0$ 
  end
  end
GMRES( $K, M$ ) へ進む。
GMRES( $U, \bar{H}, \alpha, \beta, \bar{G}, \rho, \bar{f}, kk, mm, iter, rest$ )
for  $k = kk+1, \dots, mm$  do
  begin
     $iter = iter + 1;$ 
     $u_{F(rest,k+1)} = A u_{F(rest,k)};$ 
    for  $i = 1, \dots, k$ 
      begin
         $h_{ik} = (A v_k, v_i);$ 
         $u_{F(rest,k+1)} = u_{F(rest,k+1)} - u_{F(rest,i)} h_{ik}$ 

```

```

      end
    end
     $h_{k+1,k} = \|u_{F(rest,k+1)}\|;$ 
     $u_{F(rest,k+1)} = u_{F(rest,k+1)} / h_{k+1,k};$ 
     $g_{1k} = h_{1k};$ 
    for  $i = 1, \dots, k-1$  do
      begin
         $w = \frac{2}{|\alpha_i|^2 + |\beta_i|^2} (\alpha_i^* g_{ik} + \beta_i^* h_{i+1,k});$ 
         $g_{ik} = g_{ik} - \alpha_i w; g_{i+1,k} = h_{i+1,k} - \beta_i w$ 
      end
    end
    if  $g_{kk} \neq 0$  then
       $\alpha_k = -\frac{g_{kk}}{|g_{kk}|} \frac{|h_{k+1,k}|^2}{|g_{kk}| + (|g_{kk}|^2 + |h_{k+1,k}|^2)^{\frac{1}{2}}};$ 
       $\beta_k = h_{k+1,k};$ 
      if  $(k = M)$   $\rho = g_{kk};$ 
       $g_{kk} = \frac{g_{kk}}{|g_{kk}|} (|g_{kk}|^2 + |h_{k+1,k}|^2)^{\frac{1}{2}}; g_{k+1,k} = 0$ 
    else
       $\alpha_k = -|h_{k+1,k}|; \beta_k = h_{k+1,k};$ 
      if  $(k = M)$  通常の GMRES( $M$ ) でリスタート;
       $g_{kk} = |h_{k+1,k}|; g_{k+1,k} = 0$ 
    end if
     $w = \frac{2}{|\alpha_k|^2 + |\beta_k|^2} \alpha_k^* f_k;$ 
     $f_k = f_k - \alpha_k w; f_{k+1} = -\beta_k w;$ 
    if  $|f_{k+1}| \leq tol \|b\|$  then
       $x = x + U_{F(rest,*)} G_k^{-1} f$ 
    return
  end if
end

```

$F(rest, i)$
 $F = i - 1 + rest \times P \pmod{(M+1)}$

3. ベンチマーク計算の結果

ここでは超大型浮体まわりの回折波浪場に関する境界値問題の解析^{8),9)}に GMRES-IR を適用した結果を載せる。

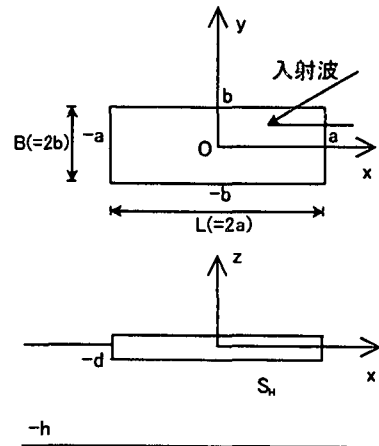


図-1 解析モデル

解析モデルは、図-1 に表される、喫水 d 、長さ L 、幅 B の箱形ポンツーン浮体とし、一定水深 h とする。自由水面上に xy 平面をとり、 z 軸は浮体中心を通るように定義する。本研究では、浮体構造物と海底起伏が同時に存在する場合にも適用可能な積分方程式を採用

し、要素として8節点2次要素を用いる。速度ポテンシャル ϕ に関する境界条件式を積分方程式に代入すると次式が得られる。

$$4\pi\phi(x) + \int_{S_H} \left\{ \phi(\xi) \frac{\partial G(x, \xi)}{\partial n} - \phi(x) \frac{\partial G_2(x, \xi)}{\partial n} \right\} ds = 4\pi\phi_I(x) \quad (6)$$

ここで、積分および法線微分は ξ に関して計算し、 S_H は浮体の没水面、 $G(x, \xi)$ は水波 Green 関数、 ϕ_I は入射波ポテンシャルである。上式は、 S_H の表面上に配置される N 個の節点における未知ポテンシャル $\phi_i (i = 1, \dots, N)$ を未知数とする連立一次方程式に帰着される(選点法)。

図-1において $L = 3000\text{m}$ 、 $B = 480\text{m}$ 、 $d = 1.5\text{m}$ 、 $h = 20\text{m}$ としたモデルについて入射波200m、入射角 x 軸から 60° 、節点数 $N = 12193$ としてベンチマーク解析を行う。

表-1 GMRES-IR の収束回数

K	$M = 10$	$M = 20$	$M = 30$	$M = 40$
0(%)	680	335	236	190
10(%)	564	305	202	174
20(%)	520	264	192	172
30(%)	533	239	196	174
40(%)	410	242	195	177
50(%)	533	238	202	179

表-2 GMRESとORTHOMINとGMRES-IRの収束回数

M	GMRES	ORTHOMIN	GMRES-IR
10	680	400	410
20	335	268	238
30	236	251	192
40	190	219	172
50	173	236	—
60	159	214	—
70	141	173	—
80	142	156	—
90	142	136	—
100	137	129	—
110	127	116	—
120	115	115	—

表-3 GMRESとORTHOMINとGMRES-IRの収束までの計算時間(秒)

M	GMRES	ORTHOMIN	GMRES-IR
10	27616.8	15289.4	17607.2
20	13020.4	10351.4	9637.8
30	9031.4	9671.1	7334.7
40	7220.8	8429.4	6590.0

表-1は、この問題から現れるモデル(節点数 $N = 12193$)に対するGMRES-IRの収束回数を表にしたもの

表-4 GMRES-IR(20, K)の収束回数

K	0	2	4	6	8
収束回数	335	305	264	239	242
K	10	12	14	16	18
収束回数	238	252	266	271	513

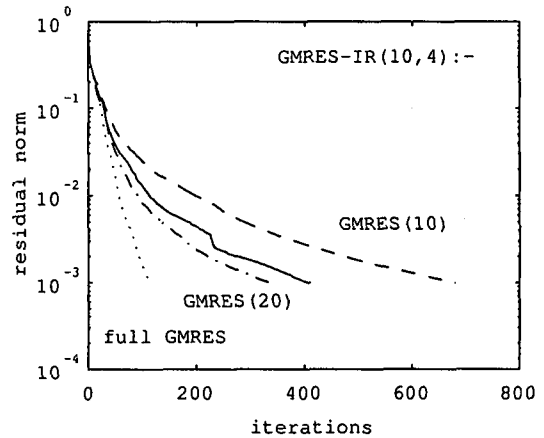


図-2 GMRES-IR(10,4)の収束特性(実線)

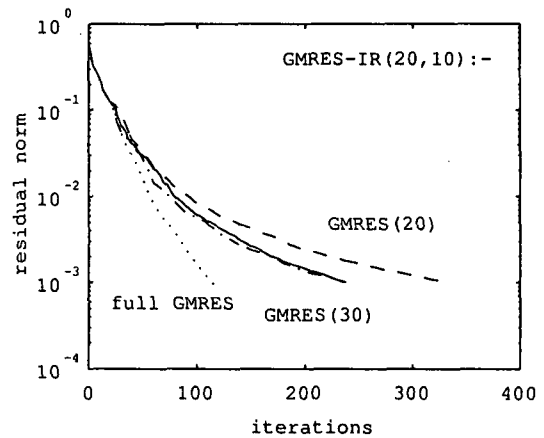


図-3 GMRES-IR(20,10)の収束特性(実線)

のである。ここで、 M は構成される Krylov 部分空間の最大の次元であり、 K は保存する近似固有ベクトルの数であり、例えば K が10(%)であるというのは M のうち10(%)を保存することを意味する。 K が連立一次方程式の解への収束にどれくらい影響するのか、正確なことが分からなかったため、 K として50(%)までデータを取ることにした。 K が0のときは通常のGMRES(M)である。また、収束回数は $\|r\| \leq 10^{-3}\|b\|$ が満たされる最小の数とした。表-2、表-3はGMRES(M)とORTHOMIN(M)^{6),10)}とGMRES-IR($M, *$)を表-1と同じモデルに対して比較した結果である。GMRES-IR($M, *$)の $*$ は表-1のなかで一番速く収束したものの(太字で表示)を選んでいる。表-4は $M = 20$ と一定にして、 K を大きくしていったときの表である。

また、GMRES-IRの収束特性を図-2,3,4,5に表す。水平方向の目盛は反復回数を表し、垂直方向の目盛は対数スケールでの相対残差ノルムを表す。実線で描かれているのがGMRES-IRである。反復はすべて初期値 $x_0 = 0$ から始め、DELL Precision 340 (Intel Pentium

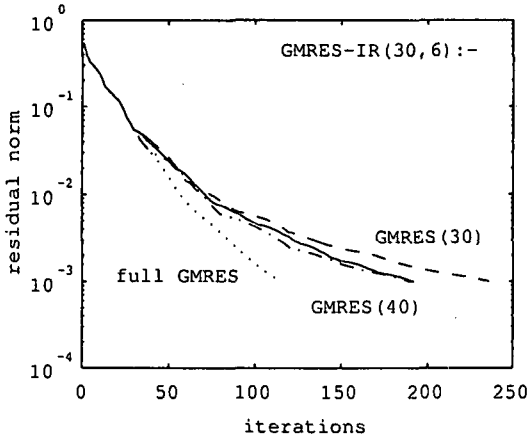


図-4 GMRES-IR(30,6) の収束特性 (実線)

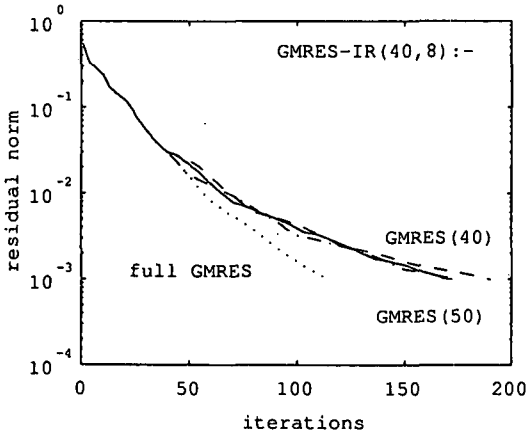


図-5 GMRES-IR(40,8) の収束特性 (実線)

IV 1.80GHz) で倍精度で計算した。

このモデルのよると K として M の 30(%) から 50(%) に選べばよいことがわかる。そして、GMRES-IR(20,10) は GMRES(30) と、GMRES-IR(30,6) は GMRES(40) と、GMRES-IR(40,10) は GMRES(50) と同じくらいの反復回数で収束していることが分かる。GMRES-IR(10,4) は GMRES(20) には及ばないが、かなり接近している。すなわち、いずれの場合も GMRES-IR(M, K) では従来の GMRES(M) と比較して、より少ない記憶容量で同程度の反復回数で収束していることが分かる。また表-4 より M を固定して K を大きくしていくと収束が悪くなっていくことも分かる。

なお、この問題に対しては M を 40 より大きくすると $r_M = V_{K+1}\bar{f}$ による値と $r_M = b - Ax_M$ による値がずれてしまい、そのまま実行しても解に収束しなかった。このためリスタート時に $r_M = V_{K+1}\bar{f}$ と $r_M = b - Ax_M$ の両方の値が一致しているかを確かめた方がよい。

この 2 つの値が一致しない原因は、非 Hermite 行列 G の固有値である harmonic Ritz value 列が精度よく計算されていないためではないかと考えている。今後、LAPACK¹¹⁾ により G に関する誤差限界を計算してみる。

4. おわりに

ここでは、本論文の内容を箇条書きで簡単にまとめる。

1. 原論文²⁾では必ずしも陽な形で与えられていない GMRES-IR のアルゴリズムを陽な形で与え、詳しく説明した。
2. 超大型浮体まわりの回折波浪場に関する境界値問題に GMRES-IR を適用して、そのベンチマーク計算結果を載せた。
3. この問題に対しては、保存するベクトルの数 K は探索空間の張る最大の次元 M の 30(%) から 50(%) に選べばよいことが分かった。
4. この問題に対しては、リスタート版 GMRES(M) と同じ記憶容量において、収束に到るまでの反復回数を少なくできた。
5. この問題に対しては、 M が 30 以下の時は近似固有値の情報が強く反映された。すなわち、このような条件下で、本手法が従来の GMRES(M) に対してより有効に用いられる。
6. この問題に対しては、 M を 40 より大きくすると $r_M = V_{K+1}\bar{f}$ による値と $r_M = b - Ax_M$ による値がずれてしまい、そのまま実行しても解に収束しなかった。

5. 付録

ここでは、 $\bar{\theta}_1, \dots, \bar{\theta}_M$ が全て異なっていて、 H_M の subdiagonal 上の成分 $h_{i,i-1}$ ($1 \leq i \leq M-1$) が全て 0 でないという仮定において、

$$\text{Span}\{\bar{g}_{P+1}, \dots, \bar{g}_M\} = \text{Span}\{Qe_1, \dots, Qe_K\} \quad (7)$$

の証明を Morgan のそれ²⁾とは少し異なる方法で与える。

その証明を 6 段に分けて説明する。

第 1 段:

$$\text{Span}\{\bar{g}_{P+1}, \dots, \bar{g}_M\} = \text{Ker} \left(\prod_{k=P+1}^M (G - \bar{\theta}_k I) \right) \quad (8)$$

これは、 $\prod_{k=P+1}^M (G - \bar{\theta}_k I) \bar{g}_i = \prod_{k=P+1}^M (\bar{\theta}_i - \bar{\theta}_k) \bar{g}_i$ ($1 \leq i \leq P$) であるから、 $\text{Im}(\prod_{k=P+1}^M (G - \bar{\theta}_k I)) \supseteq \text{Span}\{\bar{g}_1, \dots, \bar{g}_P\}$ 。また $\prod_{k=P+1}^M (G - \bar{\theta}_k I) \bar{g}_i = 0$ ($P+1 \leq i \leq M$) であるから、 $\text{Ker}(\prod_{k=P+1}^M (G - \bar{\theta}_k I)) \supseteq \text{Span}\{\bar{g}_{P+1}, \dots, \bar{g}_M\}$ 。また準同形定理より、 $\dim_{\mathbb{C}} \text{Ker}(\prod_{k=P+1}^M (G - \bar{\theta}_k I)) + \dim_{\mathbb{C}} \text{Im}(\prod_{k=P+1}^M (G - \bar{\theta}_k I)) = M$ であるので、包含関係 $\supseteq$ は等号 $=$ であることが分かる。ここで、 $\text{Ker}(\prod_{k=P+1}^M (G - \bar{\theta}_k I))$ 、 $\text{Im}(\prod_{k=P+1}^M (G - \bar{\theta}_k I))$ はそれぞれ線形写像 $\prod_{k=P+1}^M (G - \bar{\theta}_k I)$ の核と像である。

第 2 段:

$$\prod_{k=1}^M (G - \bar{\theta}_k I) = 0 \quad (9)$$

これは、Cayley-Hamilton の定理である。

第3段:

$$\text{Ker}\left(\prod_{k=P+1}^M (G - \tilde{\theta}_k I)\right) = \text{Span}\left\{\prod_{k=1}^P (G - \tilde{\theta}_k I)e_1, \dots, \prod_{k=1}^P (G - \tilde{\theta}_k I)e_K\right\} \quad (10)$$

包含関係 $\supseteq$ は (9) から分かる。また、 $G = H_M + |h_{M+1,M}|^2 H_M^{-H} e_M e_M^H$ であったから、 $g_{i,i-1} = h_{i,i-1}$, $(1 \leq i \leq M-1)$ 。したがって、 G の subdiagonal 上の成分は全て 0 でないので、 $\prod_{k=1}^P (G - \tilde{\theta}_k I)e_1, \dots, \prod_{k=1}^P (G - \tilde{\theta}_k I)e_K$ は一次独立である。このことから包含関係 $\supseteq$ は等号 $=$ であることが分かる。

第4段:

$$\prod_{k=1}^P (G - \tilde{\theta}_k I)e_i = \prod_{k=1}^P (H_M - \tilde{\theta}_k I)e_i, \quad (1 \leq i \leq K) \quad (11)$$

これは、 G に $H_M + |h_{M+1,M}|^2 H_M^{-H} e_M e_M^H$ を代入し、また H_M が Hessenberg 行列であることから、 $|h_{M+1,M}|^2 H_M^{-H} e_M e_M^H$ の項が影響しないことが分かる。

第5段:

$Q^{(k)}, R^{(k)}, (1 \leq k \leq P)$ を、シフトとして $\tilde{\theta}_1, \dots, \tilde{\theta}_P$ を選んだときに、IRA により得られた行列とする。 $Q = Q^{(1)} \dots Q^{(P)}, R = R^{(P)} \dots R^{(1)}$ とおく。

$$\prod_{k=1}^P (H_M - \tilde{\theta}_k I) = QR \quad (12)$$

これは、 P に関する帰納法により示される。 $Q_1 = Q^{(1)} \dots Q^{(P-1)}, R_1 = R^{(P-1)} \dots R^{(1)}$ とおく。定義から $Q_1^H H_M Q_1 - \tilde{\theta}_P I = Q^{(P)} R^{(P)}$ であったから、 $(H_M - \tilde{\theta}_P I)Q_1 R_1 = Q_1 Q^{(P)} R^{(P)} R_1$ 。また、帰納法の仮定から、 $\prod_{k=1}^{P-1} (H_M - \tilde{\theta}_k I) = Q_1 R_1$ であった。

第6段:

$$\text{Span}\left\{\prod_{k=1}^P (H_M - \tilde{\theta}_k I)e_1, \dots, \prod_{k=1}^P (H_M - \tilde{\theta}_k I)e_K\right\} = \text{Span}\{Qe_1, \dots, Qe_K\} \quad (13)$$

これは、(12) の両辺に $e_i, (1 \leq i \leq K)$ を掛けることにより、また R が上三角行列であったことから分かる。

参考文献

- 1) Y.Saad and M.H.Schultz, GMRES: a generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems, *SIAM J. Sci. Statist. Comput.*, 7, pp.856-869, 1986.
- 2) R.B.Morgan, Implicitly restarted GMRES and Arnoldi methods for nonsymmetric systems of equations, *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 21, pp.1112-1135, 2000.
- 3) 松阪和夫, 線形代数入門, 岩波書店, 1980.
- 4) B.N.Parlett, The Symmetric Eigenvalue Problem, Prentice-Hall, Englewood, Cliffs, NJ, 1980.
- 5) D.C.Sorensen, Implicit application of polynomial filters in a k-step Arnoldi method, *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 13, pp.357-385, 1992.
- 6) 森 正武, 杉原正顕, 室田一雄, 線形計算「岩波講座, 応用数学」, 岩波書店, 1994.
- 7) IMSL Math/Library, Visual Numerics, 1997.
- 8) T.Utsunomiya, E.Watanabe and N.Nishimura, Fast multipole algorithm for wave diffraction/radiation problems and its application to VLFS in variable water depth and topography, *Proc. 20th Int. Conf. on Offshore Mech. & Arctic Eng.*, OMAE01-5202, 2001.
- 9) 宇都宮智昭, 渡邊英一, 超大型浮体の波浪応答解析のための高速化グリーン関数法の開発, 第 16 回海洋工学シンポジウム, 313-320, 2001.
- 10) 藤野清次, 張紹良, 反復法の数理, 朝倉書店, 1996.
- 11) E.Anderson, Z.Bai, C.Bischof, J.Demmel, J.Dongarra, J.D.Croz, A.Greenbaum, S.Hammarling, A.McKenney, S.Ostouchov, and D.Sorensen, LAPACK Users' Guide, 2nd ed., *SIAM, Philadelphia*, 1995.(小国力 訳: 行列計算パッケージ LAPACK 利用の手引, 丸善, 1995)

(2003 年 4 月 18 日受付)