

非対称行列用共役残差法に基づく積型反復解法

阿部 邦美[†] 曾我部 知広^{††}
藤野 清次^{†††} 張 紹良^{††}

我々は非対称行列用共役残差法の残差多項式の係数の計算方法を積型反復解法に取り入れることによって新たな積型反復解法を提案する。すなわち、残差、近似解を生成するための漸化式は従来の積型反復解法と同一のものをを用い、従来の双共役勾配法の残差多項式の係数の代わりに非対称行列用共役残差法の残差多項式の係数を用いてアルゴリズムを更新する。数値実験では、非対称行列用 CR 法に基づく積型反復解法が従来の積型反復解法よりも有効であることを示す。

A Product-type Krylov Subspace Method Based on Conjugate Residual Method for Nonsymmetric Coefficient Matrices

KUNIYOSHI ABE,[†] TOMOHIRO SOGABE,^{††} SEIJI FUJINO^{†††}
and SHAO-LIANG ZHANG^{††}

We propose a product-type Krylov subspace method based on the conjugate residual (CR) method for nonsymmetric coefficient matrices. The recurrence formulas for updating an approximation and a residual vector are the same as those of the original product-type Krylov subspace method, while the recurrence coefficients α_k and β_k are determined so as to compute the coefficients of the residual polynomial of CR for nonsymmetric coefficient matrices. Numerical experiments show that our proposed product-type Krylov subspace method is more effective than the original.

1. はじめに

$n \times n$ の行列 A を係数行列に持ち、 n 次ベクトル b を右辺項に持つ線形方程式

$$Ax = b$$

を近似的に解く Krylov 空間法は、導出のプロセスの違いによっていくつかに分類される。その 1 つは、Petrov-Galerkin アプローチ⁶⁾ と呼ばれる方法で、残差が Krylov 部分空間と直交する条件に基づいて導出するものである。その代表が、Bi-Conjugate Gradient method (双共役勾配法, BiCG 法)⁵⁾ である。また、その積型版として Conjugate Gradient Squared method (自乗共役勾配法, CGS 法)¹⁵⁾, Bi-Conjugate

Gradient STABILized method (BiCGSTAB 法)¹⁷⁾, Generalized Product-type method based on BiCG (GPBiCG 法)^{18),19)} などが開発されてきた。積型版の残差は、BiCG 法の残差と、その残差の収束性を高めるように構築された加速多項式¹⁾ との積で表される^{18),19)}。一方、残差最小化アプローチ⁶⁾ と呼ばれる、Krylov 部分空間上で残差ノルムを最小化することによって導出される方法がある。特に、残差最小化アプローチに基づく対称行列のための解法として Conjugate Residual method (共役残差法, CR 法)⁴⁾ が知られている。さらに、近年、CR 法を非対称行列用に拡張した Bi-Conjugate Residual method (双共役残差法, BiCR 法)¹²⁾ が提案されている。BiCR 法の残差や近似解を更新する漸化式は BiCG 法と同じであるが、残差多項式の係数の計算方法は異なる。

従来の経験から、BiCG 法の残差は振動しながら収束する一方、CR 法などの残差最小化アプローチに基づく解法の残差は振動することなく単調減少していくことが知られている。また、BiCR 法の残差は、BiCG 法と同程度の反復回数か、または少ない反復回数で収束するという報告がある¹²⁾。それゆえ、積型反復解法

[†] 岐阜聖徳学園大学経済情報学部

Faculty of Economics and Information, Gifu Shotoku University

^{††} 名古屋大学大学院工学研究科

Department of Computational Science and Engineering, Nagoya University

^{†††} 九州大学情報基盤センター

Computing and Communications Center, Kyushu University

の残差を構成する BiCG 法を BiCR 法に置き換えることが有効であると考えられる。すなわち、残差や近似解を更新する漸化式は従来の積型反復解法と同じ漸化式で更新し、BiCG 法の残差多項式の係数を BiCR 法の残差多項式の係数に置き換える。すると、加速多項式によって加速された BiCR 法、すなわち BiCR 法に基づく積型反復解法は BiCG 法に基づく積型反復解法よりも少ない反復回数で収束することが期待できる。そこで、BiCG 法に基づく積型反復解法よりも有効な解法の開発を目指して、BiCR 法に基づく積型反復解法を提案する。

一方、文献 14) でも BiCG 法から従来の積型反復解法を導くのと同じ手順で BiCR 法に基づく積型反復解法が導出されている。しかし、その導出手順は、我々の導出手順とは異なるため、本論文で提案するアルゴリズムは、文献 13), 14) で述べられているアルゴリズムと一見よく似ているが、初期シャドウ残差ベクトルの扱いや演算量の点で異なる。

そこで、本論文では、BiCR 法の残差多項式の係数の決定法を積型反復解法に取り入れることによって非対称行列用 CR 法に基づく積型反復解法を提案する。すなわち、残差、近似解を生成するための漸化式は従来の積型反復解法と同一のものを用い、従来の BiCG 法の残差多項式の係数の代わりに BiCR 法の残差多項式の係数を用いてアルゴリズムを更新する。ここで、BiCR 法の残差多項式の係数を従来の積型反復解法のアルゴリズムで現れる補助ベクトルによって書き換えれば、BiCR 法の残差多項式の係数を積型反復解法に取り入れることができる。さらに、数値実験では、非対称行列用 CR 法に基づく積型反復解法が従来の積型反復解法よりも有効であることを示す。

本論文 2 章では、積型反復解法の構造について記述する。3 章では、BiCR 法のアルゴリズムとその性質について述べる。4 章では、従来の積型反復解法に BiCR 法の残差多項式の係数の計算方法を取り入れることによって非対称行列用 CR 法に基づく積型反復解法を導出する。5 章では、数値実験を通して従来の積型反復解法と提案する積型反復解法との収束性を比較し、後者の有効性を検証する。そして、最後にまとめを行う。

2. 積型反復解法の構造

BiCG 法の残差ベクトル r_k^{BCG} は

$$r_k^{\text{BCG}} = R_k(A)r_0$$

と表せる。残差多項式 $R_k(A)$ は、BiCG 法の 2 つのパラメータ α_k, β_k から定められており、Lanczos 多

項式と呼ばれる次の三項漸化式を満足する¹⁶⁾。

$$\begin{aligned} R_0(\lambda) &= 1, & R_1(\lambda) &= 1 - \alpha_0\lambda, \\ R_{k+1}(\lambda) &= \left(1 + \alpha_k \frac{\beta_{k-1}}{\alpha_{k-1}} - \alpha_k\lambda\right) R_k(\lambda) \\ &\quad - \alpha_k \frac{\beta_{k-1}}{\alpha_{k-1}} R_{k-1}(\lambda), \quad k = 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (1)$$

BiCG 法の残差列を $r_0^{\text{BCG}}, r_1^{\text{BCG}}, \dots, r_k^{\text{BCG}}, \dots$ と記すとき、 k 次の多項式 $S_k(\lambda)$ を用いて $S_k(A)r_k^{\text{BCG}}$ が新たな残差ベクトルとなるように、BiCG 法の収束性を加速したのが積型反復解法^{18), 19)}である。すなわち、一般に積型反復解法の残差は、 $S_k(A)r_k^{\text{BCG}}$ と定められる。ただし、多項式 $S_k(\lambda)$ は次のような三項漸化式を満たす。

$$\begin{aligned} S_0(\lambda) &= 1, & S_1(\lambda) &= 1 - \zeta_0\lambda, \\ S_{k+1}(\lambda) &= (1 + \eta_k - \zeta_k\lambda)S_k(\lambda) \\ &\quad - \eta_k S_{k-1}(\lambda), \quad k = 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (2)$$

すでに多くの積型反復解法が提案されているが、ここでは、そのうち代表的な CGS 法、BiCGSTAB 法、GPBiCG 法を対象にする。パラメータ ζ_k, η_k を

$$\zeta_k = \alpha_k, \quad \eta_k = \frac{\alpha_{k-1}}{\beta_{k-1}}\alpha_k$$

とすれば、加速多項式は $S_k(\lambda) = R_k(\lambda)$ となり、CGS 法の残差ベクトル r_k^{CGS} が

$$r_k^{\text{CGS}} = R_k(A)r_k^{\text{BCG}}$$

と表される。また、加速多項式を $S_k(\lambda) = Q_k(\lambda)$ とすれば BiCGSTAB 法の残差ベクトル r_k^{STA} となり、次のように書ける。

$$r_k^{\text{STA}} = Q_k(A)r_k^{\text{BCG}}.$$

ただし、加速多項式 $Q_k(\lambda)$ は、式 (2) において $\eta_k = 0$ とした式である。また、パラメータ ζ_k は、残差ベクトル $r_{k+1}^{\text{STA}} = (1 - \zeta_k A)Q_k(A)r_{k+1}^{\text{BCG}}$ の 2 ノルムを最小にするように決められる。さらに、加速多項式を $S_k(\lambda) = H_k(\lambda)$ と書くとき、GPBiCG 法の残差ベクトル r_k^{GPB} となり、

$$r_k^{\text{GPB}} = H_k(A)r_k^{\text{BCG}}$$

と表される。パラメータ ζ_k, η_k は、残差ベクトル $r_{k+1}^{\text{GPB}} = \{(1 + \eta_k - \zeta_k A)H_k(A) - \eta_k H_{k-1}(A)\}r_{k+1}^{\text{BCG}}$ の 2 ノルムを最小にするように決められる。

このように、CGS 法、BiCGSTAB 法、GPBiCG 法において、残差ベクトルを構成する BiCG 法 $r_k^{\text{BCG}} = R_k(A)r_0$ は、理論上はすべて等しい。ゆえに、積型反復解法における BiCG 法のパラメータ α_k, β_k だけを BiCR 法のパラメータ α_k, β_k に置き換えれば、BiCR 法に基づく積型反復解法が構築できる。そこで、後述の 4 章では、 r_k^{BCG} を BiCR 法の残差多項式に

置き換えることを試みる.

3. 非対称行列用共役残差法

本章では, BiCR 法のアルゴリズム, およびアルゴリズムで生成されるベクトル列の性質について述べる.

BiCR 法のアルゴリズムは, BiCG 法と同じ漸化式で残差ベクトル, 近似解を更新し, 次のように表される¹²⁾.

BiCR 法のアルゴリズム

Let x_0 be an initial guess, and put $r_0 = b - Ax_0$. Let r_0^* be an arbitrary vector, e.g., $r_0^* = r_0$. Set $\beta_{-1} = 0$.

For $k = 0, 1, \dots$ until $\|r_{k+1}\|_2 / \|r_0\|_2 < \epsilon_{TOL}$
do :

begin

$$p_k = r_k + \beta_{k-1}p_{k-1} \quad p_k^* = r_k^* + \beta_{k-1}p_{k-1}^*$$

$$Ap_k = Ar_k + \beta_{k-1}Ap_{k-1}$$

$$\alpha_k = \frac{(Ar_k, r_k^*)}{(Ap_k, A^T p_k^*)}$$

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k$$

$$r_{k+1} = r_k - \alpha_k Ap_k \quad r_{k+1}^* = r_k^* - \alpha_k A^T p_k^*$$

$$\beta_k = \frac{(Ar_{k+1}, r_k^*)}{(Ar_k, r_k^*)}$$

end

このとき, BiCR 法の残差ベクトル r_k は BiCG 法と同様で, 式 (1) を満たして次のように表すことができる.

$$r_k = R_k(A)r_0.$$

また, ベクトル p_k も多項式 $P_k(A)$ を用いて

$$p_k = P_k(A)r_0$$

と表される. ただし, 多項式 $R_k(A)$, および $P_k(A)$ は次のような関係を満たす.

$$R_{k+1}(A) = R_k(A) - \alpha_k Ap_k(A),$$

$$P_{k+1}(A) = R_{k+1}(A) + \beta_k P_k(A).$$

同様に, BiCR 法によって生成されるベクトル r_k^* , p_k^* は

$$r_k^* = R_k(A^T)r_0^*, \quad p_k^* = P_k(A^T)r_0^*$$

と表すことができる.

次に, 生成されるベクトル列が満たす性質を述べる. $A^T A$ の重みつき Lanczos Biorthogonalization 原理⁷⁾⁻⁹⁾ によって生成される基底をベクトル p_k , p_k^* とおいて BiCR 法を導出できる. したがって, ベクトル p_k , p_k^* は次のような性質を満たす¹²⁾.

$$(Ap_i, A^T p_j^*) = 0, \quad (i \neq j). \quad (3)$$

また, 数学的帰納法, および式 (3) を用いて次のような性質を示すことができる.

$$(r_k, A^T p_i^*) = 0, \quad (i < k). \quad (4)$$

さらに, 文献 12) で示されているように, 性質 (3), (4) を用いれば, 次のようなベクトル列 r_k , r_k^* の直交性を示すことができる.

$$(r_k, A^T r_i^*) = 0, \quad (i < k). \quad (5)$$

そして, 式 (3)-(5) によって BiCR 法の残差多項式の係数 α_k , β_k を求めることができる.

4. 非対称行列用共役残差法に基づく積型反復解法

本章では, 非対称行列用 CR 法に基づく積型反復解法のアルゴリズムで使用される係数 α_k , β_k の計算方法を決定し, それらのアルゴリズムを提案する.

BiCR 法によって生成された残差ベクトル r_k の収束性を加速多項式 $S_k(A)$ によって加速するのが非対称行列用 CR 法に基づく積型反復解法である. ゆえに, 非対称行列用 CR 法に基づく積型反復解法の残差 r_k^{pro} は次のように定義することができる.

$$r_k^{\text{pro}} := S_k(A)r_k = S_k(A)R_k(A)r_0. \quad (6)$$

また, 積型反復解法のアルゴリズムでは, ベクトル p_k と加速多項式 $S_k(A)$ との積は次のように定義されている^{18),19)}.

$$p_k^{\text{pro}} := S_k(A)p_k = S_k(A)P_k(A)r_0. \quad (7)$$

次に, 非対称行列用 CR 法に基づく積型反復解法における係数 α_k , β_k の計算方法を定める. まず, 次のような内積 ρ_k を考える.

$$\begin{aligned} \rho_k &:= (AS_k(A)R_k(A)r_0, r_0^*) \\ &= (AR_k(A)r_0, S_k(A^T)r_0^*) \\ &= (AR_k(A)r_0, (-1)^k \prod_{i=0}^{k-1} \zeta_i (A^T)^k r_0^* + q_1). \end{aligned}$$

ただし, $q_1 \in K_{k-1}(A^T, r_0^*)$ で, $K_{k-1}(A^T, r_0^*)$ は $k-1$ 次の Krylov 部分空間を表す. ここで, BiCR 法のアルゴリズムで生成されるベクトル列は式 (5) を満たす. すなわち, $AR_k(A)r_0$ が $(A^T)^i r_0^*$ ($i < k$) と直交する. さらに, $R_k(A^T) = (-1)^k \prod_{i=0}^{k-1} \alpha_i (A^T)^k r_0^* + q_2$ と表せる. ただし, $q_2 \in K_{k-1}(A^T, r_0^*)$. したがって,

$$\rho_k = (AR_k(A)r_0, \frac{(-1)^k \prod_{i=0}^{k-1} \zeta_i}{(-1)^k \prod_{i=0}^{k-1} \alpha_i} R_k(A^T)r_0^*)$$

$$= \frac{\prod_{i=0}^{k-1} \zeta_i}{\prod_{i=0}^{k-1} \alpha_i} (AR_k(A)r_0, R_k(A^T)r_0^*)$$

となるので, BiCR 法のパラメータ β_k は ρ_k を用いて次のように計算することができる.

$$\begin{aligned} \beta_k &= \frac{(Ar_{k+1}, r_{k+1}^*)}{(Ar_k, r_k^*)} \\ &= \frac{(AR_{k+1}(A)r_0, R_{k+1}(A^T)r_0^*)}{(AR_k(A)r_0, R_k(A^T)r_0^*)} \end{aligned}$$

$$= \frac{\alpha_k \rho_{k+1}}{\zeta_k \rho_k}.$$

ゆえに、非対称行列用 CR 法に基づく積型反復解法のパラメータ β_k は式 (6) で定義されたベクトル r_k^{pro} を用いて

$$\begin{aligned} \beta_k &= \frac{\alpha_k (AS_{k+1}(A)R_{k+1}(A)r_0, r_0^*)}{\zeta_k (AS_k(A)R_k(A)r_0, r_0^*)} \\ &= \frac{\alpha_k (Ar_{k+1}^{\text{pro}}, r_0^*)}{\zeta_k (Ar_k^{\text{pro}}, r_0^*)} \end{aligned} \quad (8)$$

と表される。そして、式 (8) を用いて積型反復解法のアルゴリズムを更新すると、反復 1 回あたりの行列・ベクトル積の計算量が増える。そこで、計算量を増やさないうえに、実際のアルゴリズムのパラメータ β_k は次のように計算する。

$$\beta_k = \frac{\alpha_k (r_{k+1}^{\text{pro}}, A^T r_0^*)}{\zeta_k (r_k^{\text{pro}}, A^T r_0^*)}. \quad (9)$$

ただし、CGS 法の場合、加速多項式の係数は $\zeta_k = \alpha_k$ であるから、パラメータ β_k は次のように計算される。

$$\beta_k = \frac{(r_{k+1}^{\text{pro}}, A^T r_0^*)}{(r_k^{\text{pro}}, A^T r_0^*)}. \quad (10)$$

また、BiCR 法のパラメータ α_k は

$$\alpha_k = \frac{(Ar_k, r_k^*)}{(Ap_k, A^T p_k^*)}$$

と計算されるので、文献 9) における積型反復解法のパラメータ α_k を導く方法に倣えば、非対称行列用 CR 法に基づく積型反復解法のパラメータ α_k は式 (6)、(7) で定義されたベクトル r_k^{pro} 、 p_k^{pro} を用いて次のように計算することができる。

$$\begin{aligned} \alpha_k &= \frac{(AR_k(A)r_0, R_k(A^T)r_0^*)}{(AP_k(A)r_0, A^T P_k(A^T)r_0^*)} \\ &= \frac{(AR_k(A)r_0, R_k(A^T)r_0^*)}{(AP_k(A)r_0, A^T R_k(A^T)r_0^*)} \\ &= \frac{(AR_k(A)r_0, S_k(A^T)r_0^*)}{(AP_k(A)r_0, A^T S_k(A^T)r_0^*)} \\ &= \frac{(AS_k(A)R_k(A)r_0, r_0^*)}{(AS_k(A)P_k(A)r_0, A^T r_0^*)} \\ &= \frac{(Ar_k^{\text{pro}}, r_0^*)}{(Ap_k^{\text{pro}}, A^T r_0^*)}. \end{aligned}$$

そして、反復 1 回あたりの行列・ベクトル積の計算量を増やさないうえに、実際にはアルゴリズムでパラメータ α_k は次のように計算する。

$$\alpha_k = \frac{(r_k^{\text{pro}}, A^T r_0^*)}{(Ap_k^{\text{pro}}, A^T r_0^*)}. \quad (11)$$

したがって、式 (9)–(11)、および CGS 法、BiCGSTAB 法、GPBiCG 法の近似解、残差ベクトルを更新する漸化式^{15), 17)–19)}を用いれば、非対称行列用

CR 法に基づく CGS 法、BiCGSTAB 法、GPBiCG 法のアルゴリズムとなる。文献 14) と同様、それらのアルゴリズムを Conjugate Residual Squared method (CRS 法)、BiCR STABILized method (BiCRSTAB 法)、Generalized Product-type method based on BiCR (GPBiCR 法) と名付け、それらのアルゴリズムは次のようにまとめられる。

CRS 法のアルゴリズム

Let x_0 be an initial guess, and put $r_0 = b - Ax_0$. Let r_0^* be an arbitrary vector, e.g., $r_0^* = r_0$. Set $\beta_{-1} = 0$.

For $k = 0, 1, \dots$ until $\|r_{k+1}\|_2 / \|r_0\|_2 < \epsilon_{\text{TOL}}$ do :

begin

$$u_k = r_k + \beta_{k-1} q_{k-1}$$

$$p_k = u_k + \beta_{k-1} (q_{k-1} + \beta_{k-1} p_{k-1})$$

$$\alpha_k = \frac{(r_k, A^T r_0^*)}{(Ap_k, A^T r_0^*)}$$

$$q_k = u_k - \alpha_k Ap_k$$

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k (u_k + q_k)$$

$$r_{k+1} = r_k - \alpha_k A(u_k + q_k)$$

$$\beta_k = \frac{(r_{k+1}, A^T r_0^*)}{(r_k, A^T r_0^*)}$$

end

BiCRSTAB 法のアルゴリズム

Let x_0 be an initial guess, and put $r_0 = b - Ax_0$. Let r_0^* be an arbitrary vector, e.g., $r_0^* = r_0$. Set $\beta_{-1} = 0$.

For $k = 0, 1, \dots$ until $\|r_{k+1}\|_2 / \|r_0\|_2 < \epsilon_{\text{TOL}}$ do :

begin

$$p_k = r_k + \beta_{k-1} (p_{k-1} - \zeta_{k-1} Ap_{k-1})$$

$$\alpha_k = \frac{(r_k, A^T r_0^*)}{(Ap_k, A^T r_0^*)}$$

$$s_k = r_k - \alpha_k Ap_k$$

$$\zeta_k = \frac{(As_k, s_k)}{(As_k, As_k)}$$

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k + \zeta_k s_k$$

$$r_{k+1} = s_k - \zeta_k As_k$$

$$\beta_k = \frac{\alpha_k (r_{k+1}, A^T r_0^*)}{\zeta_k (r_k, A^T r_0^*)}$$

end

GPBiCR 法のアルゴリズム

Let x_0 be an initial guess, and put $r_0 = b - Ax_0$. Let r_0^* be an arbitrary vector, e.g., $r_0^* = r_0$. Set $t_{-1} = w_{-1} = 0$, $\beta_{-1} = 0$.

For $k = 0, 1, \dots$ until $\|r_{k+1}\|_2 / \|r_0\|_2 < \epsilon_{\text{TOL}}$

表 1 それぞれの解法の反復 1 回あたりの計算量

Table 1 Computational costs of several iterative methods per iteration.

	M-v products	Inner	add or scaling
CGS	2	2	12
CRS	2	2	12
BiCGSTAB	2	4	12
BiCRSTAB	2	4	12
GPBiCG	2	7	27
GPBiCR	2	7	27

do :

begin

$$p_k = r_k + \beta_{k-1}(p_{k-1} - u_{k-1})$$

$$\alpha_k = \frac{(r_k, A^T r_0^*)}{(A p_k, A^T r_0^*)}$$

$$y_k = t_{k-1} - r_k - \alpha_k w_{k-1} + \alpha_k A p_k$$

$$t_k = r_k - \alpha_k A p_k$$

$$\zeta_k = \frac{(y_k, y_k)(A t_k, t_k) - (y_k, t_k)(A t_k, y_k)}{(A t_k, A t_k)(y_k, y_k) - (y_k, A t_k)(A t_k, y_k)}$$

$$\eta_k = \frac{(A t_k, A t_k)(y_k, t_k) - (y_k, A t_k)(A t_k, t_k)}{(A t_k, A t_k)(y_k, y_k) - (y_k, A t_k)(A t_k, y_k)}$$

$$(\text{if } k = 0, \text{ then } \zeta_0 = \frac{(A t_0, t_0)}{(A t_0, A t_0)}, \eta_0 = 0)$$

$$u_k = \zeta_k A p_k + \eta_k (t_{k-1} - r_k + \beta_{k-1} u_{k-1})$$

$$z_k = \zeta_k r_k + \eta_k z_{k-1} - \alpha_k u_k$$

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k + z_k$$

$$r_{k+1} = t_k - \eta_k y_k - \zeta_k A t_k$$

$$\beta_k = \frac{\alpha_k (r_{k+1}, A^T r_0^*)}{\zeta_k (r_k, A^T r_0^*)}$$

$$w_k = A t_k + \beta_k A p_k$$

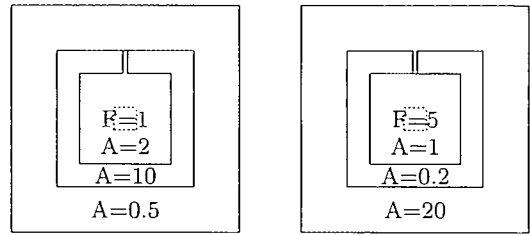
end

アルゴリズムの反復 1 回あたりの演算量は表 1 のようにまとめられる。表 1 から、CGS 法と CRS 法、BiCGSTAB 法と BiCRSTAB 法、および GPBiCG 法と GPBiCR 法は、それぞれ同じ演算量であることが分かる。ここで、M-v は行列ベクトル積、Inner は内積、add or scaling はベクトルどうしの和、またはベクトルのスカラー倍の回数を意味する。

5. 数値実験

本章では、非対称行列を係数に持つ線形方程式を用いた数値実験を通して CRS 法、BiCRSTAB 法、GPBiCR 法の収束性を検証する。

5.1, 5.2 節の数値実験は、PC-AT 互換機 (Pentium Xeon 3.06 GHz) において富士通 Fortran コンパイラ version 4 (コンパイルオプションなし)、また 5.3 節の数値実験は、IBM eServer p5 (POWER5 1.9 GHz) において IBM XL Fortran コンパイラ ver-



ケース 1 (case 1)

ケース 2 (case 2)

図 1 式 (12) の係数

Fig. 1 The coefficients for Eq. (12).

sion 9.1 (コンパイルオプションは-O3 -qarch=pwr5 -qtune=pwr5 -qhot) の倍精度浮動小数点演算によって実行された。また、収束判定条件は $\epsilon_{TOL} = 10^{-12}$ を採用した。

5.1 数値例 1

正方形領域 $\Omega = (0, 1) \times (0, 1)$ において次の偏微分方程式の離散近似解を求める¹⁷⁾。

$$-(A(x, y)u_x)_x - (A(x, y)u_y)_y + 2 \exp(2(x^2 + y^2))u_x = F(x, y). \quad (12)$$

境界条件は、Dirichlet 条件

$$u|_{x=0} = 1, u|_{x=1} = 1, u|_{y=0} = 1, u|_{y=1} = 0$$

を課す¹⁷⁾。ただし、式 (12) の関数 $A(x, y)$, $F(x, y)$ の値を図 1 に示すような 2 種類の分布 (ケース 1, 2) に変化させた。また、関数 $F(x, y)$ は点線で囲まれた領域の外では 0 とする。

式 (12) の境界値問題に対して全体領域を x, y 両方向に 101 (= $M+1$) 等分して、 x, y ともに等間隔で離散近似して得られた大きさ $M^2 \times M^2$ の正方行列を係数に持つ線形方程式を従来の CGS 法、BiCGSTAB 法、GPBiCG 法、および CRS 法、BiCRSTAB 法、GPBiCR 法によって解く。ただし、初期解ベクトルは乱数、初期シャドウ残差ベクトルは $r_0^* = r_0$ を採用した。

収束するまでに各解法が要した反復回数 (Iterations), 計算時間 (Time (second)), および収束した時点の真の相対残差ノルム $\log_{10}(\|b - Ax_k\|_2 / \|b - Ax_0\|_2)$ (True res.) を表 2 に示す。さらに、関数 $A(x, y)$ の値が図 1 のケース 2 の場合の CGS 法と CRS 法、BiCGSTAB 法と BiCRSTAB 法、および GPBiCG 法と GPBiCR 法とを比較した収束履歴を図 2, 図 3 に示す。ただし、グラフの縦軸は相対残差ノルム $\log_{10}(\|r_k\|_2 / \|r_0\|_2)$, 横軸は反復回数である。

[結果]

表 2, および図 2, 図 3 から次のようなことを述べ

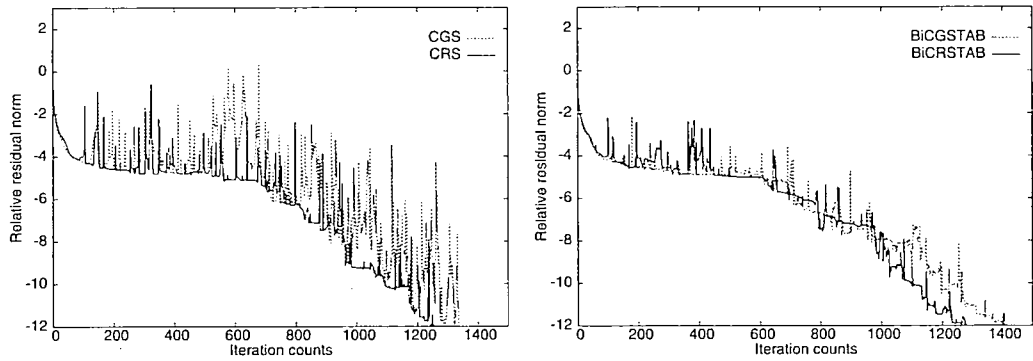


図2 図1 ケース2の分布を利用した場合のCGS法とCRS法(左図), およびBiCGSTAB法とBiCRSTAB法(右図)の収束履歴

Fig. 2 Convergence history of CGS, CRS (on the left) and BiCGSTAB, BiCRSTAB (on the right) when using the coefficients of the case 2 of Fig. 1.

表2 各解法の反復回数, 計算時間, 真の相対残差ノルム(上から図1の左図, 右図の係数を用いた結果)

Table 2 Number of iterations, computation time and explicitly computed relative residual norm when using the coefficients of the case 1 (on upper table) and the case 2 (on lower table) of Fig. 1.

case 1 of Fig. 1	Iterations	Time	True res.
CGS	1257	1.24	-10.5
CRS	1206	1.28	-12.0
BiCGSTAB	1227	1.11	-12.0
BiCRSTAB	1129	1.03	-12.0
GPBiCG	1102	1.73	-12.2
GPBiCR	1085	1.72	-12.0

case 2 of Fig. 1	Iterations	Time	True res.
CGS	1337	1.34	-12.0
CRS	1265	1.33	-12.0
BiCGSTAB	1408	1.32	-12.1
BiCRSTAB	1280	1.22	-12.0
GPBiCG	1284	1.98	-12.3
GPBiCR	1202	1.92	-12.1

ることができる。CGS法とCRS法の反復回数, 計算時間を比較するとき, CRS法の反復回数はCGS法の最大94%に減少し, 計算時間はほぼ同じであった。また, BiCGSTAB法とBiCRSTAB法の反復回数, 計算時間を比較するとき, およそ92%に減少した。さらに, GPBiCG法とGPBiCR法の反復回数, 計算時間を比較するとき, GPBiCR法の反復回数はGPBiCG法の最大93%に減少し, 計算時間はほぼ同じであった。各解法で求められた近似解は, およそ要求された精度であった。以上, 提案した3つの解法は反復回数の点で効果があった。

一般に, Generalized Minimal RESidual method (一般化最小残差法, GMRES法)¹¹⁾の結果を掲載すると反復解法のユーザの参考になるので, GMRES法を20, 50, 100回でリスタートするGMRES(20)法,

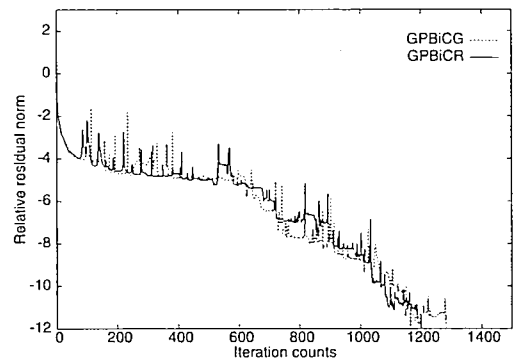


図3 図1 ケース2の分布を利用した場合のGPBiCG法とGPBiCR法の収束履歴

Fig. 3 Convergence history of GPBiCG and GPBiCR when using the coefficients of the case 2 of Fig. 1.

GMRES(50)法, GMRES(100)法の適用について検討した。その結果, 3,000回の反復で収束しなかった。

5.2 数値例2

正方形領域 $\Omega = (0, 1) \times (0, 1)$ で全周 Dirichlet 境界条件 ($u|_{\partial\Omega} = 0$) を課した次の偏微分方程式の離散近似解を求める¹⁰⁾。

$$-u_{xx} - u_{yy} + \gamma(xu_x + yu_y) + \beta u = f(x, y). \quad (13)$$

右辺項は, 解 $\hat{u} = (1, \dots, 1)$ を与えて右辺ベクトルを $b = A\hat{u}$ と計算する。式(13)の境界値問題に対して全体領域を x, y 両方向に 101 ($= M+1$) 等分して, x, y 方向ともに等間隔で離散近似して得られた大きさ $M^2 \times M^2$ の正方行列を係数に持つ線形方程式を従来のCGS法, BiCGSTAB法, GPBiCG法, およびCRS法, BiCRSTAB法, GPBiCR法によって解く。ただし, 初期解ベクトルは乱数, 初期シャドウ残差ベクトルは $r_0^* = r_0$ を採用した。

式(13)のパラメータ (γ, β) を $(50, -30), (50, -50)$,

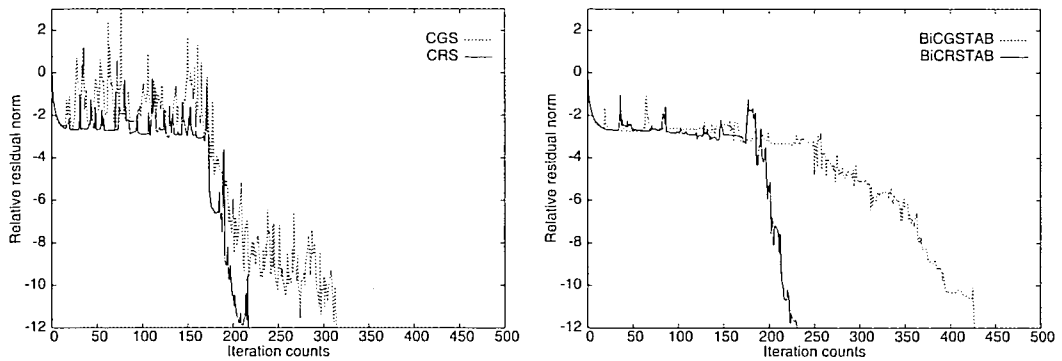


図4 $(\gamma, \beta) = (50, -50)$ の場合の CGS 法と CRS 法 (左図), および BiCGSTAB 法と BiCRSTAB 法 (右図) の収束履歴

Fig. 4 Convergence history of CGS, CRS (on the left) and BiCGSTAB, BiCRSTAB (on the right) for $(\gamma, \beta) = (50, -50)$.

$(100, -30)$, $(100, -50)$ と変化させ, 収束するまでに各解法が要した反復回数 (Iterations), 計算時間 (Time (second)), および収束した時点の真の相対残差ノルム $\log_{10}(\|b - Ax_k\|_2 / \|b - Ax_0\|_2)$ (True res.) を表 3 に示す. また, $(\gamma, \beta) = (50, -50)$, $(100, -50)$ の 2 つの場合の収束履歴を図 4, 図 5, 図 6 に示す. ただし, グラフの縦軸は相対残差ノルム $\log_{10}(\|r_k\|_2 / \|r_0\|_2)$, 横軸は反復回数である.

[結果]

表 3, および図 4~図 6 から次のようなことを述べることができる. CGS 法と CRS 法の反復回数, 計算時間を比較するとき, CRS 法の反復回数は CGS 法の最大 69%, 計算時間は最大 75% に減少した. BiCGSTAB 法と BiCRSTAB 法の反復回数, 計算時間を比較するとき, BiCRSTAB 法の反復回数は BiCGSTAB 法の最大 54%, 計算時間は最大 54% に減少した. さらに, GPBiCG 法と GPBiCR 法の反復回数, 計算時間を比較するとき, GPBiCR 法の反復回数は GPBiCG 法の最大 66%, 計算時間は最大 67% に減少した. 各解法で求められた近似解は, およそ要求された精度であった. 以上, 提案した 3 つの解法は従来の解法と比べて反復回数, 計算時間の両方で効果があった.

5.1 節と同様, 本数値例においても, GMRES(20) 法, GMRES(50) 法, GMRES(100) 法を適用した. その結果, GMRES(20) 法, GMRES(50) 法は 3,000 回の反復で収束しなかった. また, GMRES(100) 法の所要反復回数, および計算時間は, パラメータ (γ, β) を $(50, -30)$, $(50, -50)$, $(100, -30)$, $(100, -50)$ とした場合, 順に 1,097 回, 3.01 sec., 1,290 回, 3.50 sec., 953 回, 2.56 sec., 1,248 回, 3.50 sec. であった. ただし, GMRES(100) 法のメモリ使用量は非対称行列用 CR 法に基づく積型反復解法の 10 倍以上となる.

表 3 各解法の反復回数, 計算時間, 真の相対残差ノルム (上から順に $(50, -30)$, $(50, -50)$, $(100, -30)$, $(100, -50)$)
Table 3 Number of iterations, computation time and explicitly computed relative residual norm (displayed in order of $(50, -30)$, $(50, -50)$, $(100, -30)$ and $(100, -50)$).

$(50, -30)$	Iterations	Time	True res.
CGS	203	0.207	-12.0
CRS	201	0.218	-12.4
BiCGSTAB	245	0.226	-12.5
BiCRSTAB	230	0.214	-12.2
GPBiCG	306	0.464	-12.2
GPBiCR	237	0.359	-12.0

$(50, -50)$	Iterations	Time	True res.
CGS	314	0.320	-10.3
CRS	217	0.242	-12.4
BiCGSTAB	427	0.395	-12.3
BiCRSTAB	231	0.214	-12.0
GPBiCG	312	0.492	-12.0
GPBiCR	231	0.371	-12.0

$(100, -30)$	Iterations	Time	True res.
CGS	242	0.257	-11.7
CRS	238	0.257	-12.0
BiCGSTAB	437	0.398	-12.3
BiCRSTAB	295	0.277	-13.2
GPBiCG	343	0.535	-12.2
GPBiCR	281	0.453	-12.6

$(100, -50)$	Iterations	Time	True res.
CGS	259	0.265	-11.6
CRS	227	0.253	-12.0
BiCGSTAB	386	0.355	-12.0
BiCRSTAB	302	0.300	-12.0
GPBiCG	444	0.695	-12.9
GPBiCR	297	0.468	-12.4

5.3 数値例 3

文献 14) では, Harwell-Boeing collection, NEP collection, SPARSKIT collection, Tim Davis's col-

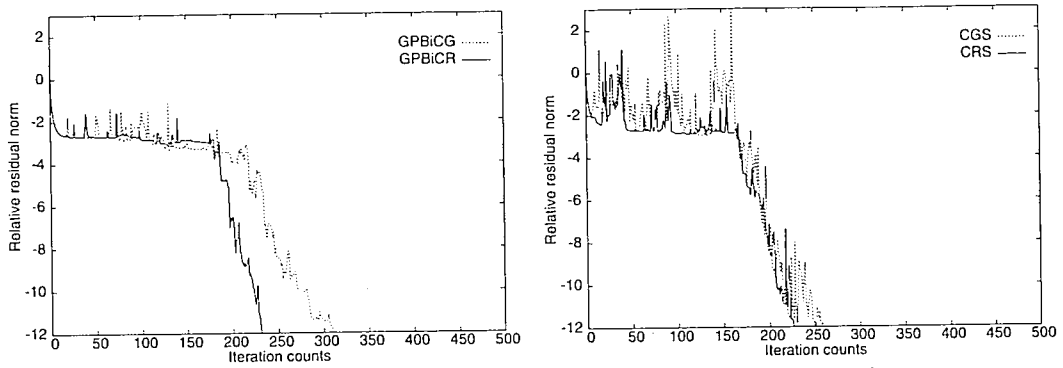


図5 $(\gamma, \beta) = (50, -50)$ の場合の GPBiCG 法と GPBiCR 法 (左図), および $(\gamma, \beta) = (100, -50)$ の場合の CGS 法と CRS 法 (右図) の収束履歴

Fig. 5 Convergence history of GPBiCG, GPBiCR for $(\gamma, \beta) = (50, -50)$ (on the left) and CGS, CRS for $(\gamma, \beta) = (100, -50)$ (on the right).

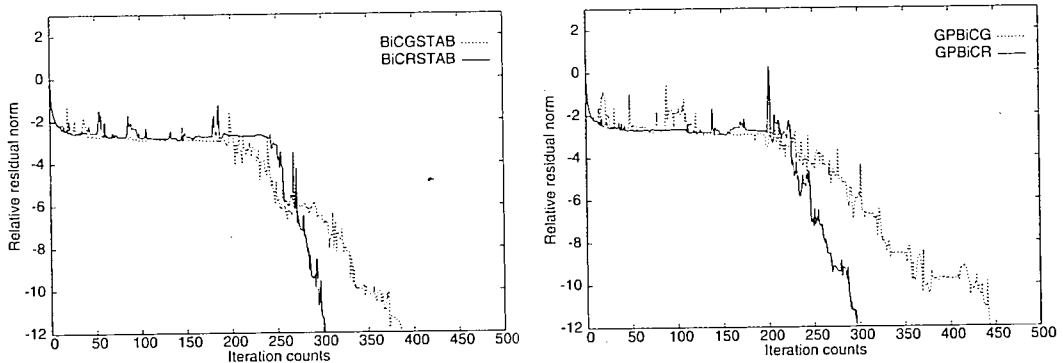


図6 $(\gamma, \beta) = (100, -50)$ の場合の BiCGSTAB 法と BiCRSTAB 法 (左図), および GPBiCG 法と GPBiCR 法 (右図) の収束履歴

Fig. 6 Convergence history of BiCGSTAB, BiCRSTAB (on the left) and GPBiCG, GPBiCR (on the right) for $(\gamma, \beta) = (100, -50)$.

表4 係数行列の特徴

Table 4 Characteristic of coefficient matrices.

Matrix	N	NNZ	Ave. NNZ
ADD20	2395	17319	7.23
ADD32	4960	23884	4.82
CAVITY05	1182	32747	27.71
CDDE1	961	4681	4.87
DW2048	2048	10114	4.94
MEMPLUS	17758	126150	7.10

lection^{2),3)}に掲載されているうちの14種類の問題が取り上げられている。我々は、上記のデータベースに登録されている右辺項の書式で小数部の桁数が15桁以上(たとえばD22.16)であるADD20, ADD32(電気回路設計), CAVITY05(有限要素モデリング), CDDE1(流体力学), DW2048(電気工学), MEMPLUS(内部記憶装置回路)を取り上げる。それらの問題の係数行列は表4に述べられた特徴を持つ。ただし、表4におけるNは係数行列の次元, NNZは非零要素数, Ave. NNZは1行あたりの平均非零要素数を示す。表4に

述べられた行列を係数に持つ線形方程式を従来のCGS法, BiCGSTAB法, GPBiCG法, およびCRS法, BiCRSTAB法, GPBiCR法によって解く。初期近似解ベクトルは $x_0 = 0$, 初期シャドウ残差ベクトル r_0^* は乱数を採用した。

収束するまでに各解法が要した反復回数 (Iterations), 計算時間 (Time (second)), および収束した時点の真の相対残差ノルム $\log_{10}(\|b - Ax_k\|_2 / \|b - Ax_0\|_2)$ (True res.) を表5に示す。ただし、表5で時間が0.00になっているのは、その処理時間が非常に短く、あらかじめシステム側で用意された時間計測関数 `gettimeofday` ルーチンの計測可能な最小時間に達しなかったためである。

[結果]

表5から次のようなことを述べるができる。CGS法とCRS法の反復回数, 計算時間を比較するとき, CRS法の反復回数はCGS法の最大76%, 計算時間は最大67%に減少した。BiCGSTAB法と

表 5 各解法の反復回数, 計算時間, 真の相対残差ノルム (上から順に ADD20, ADD32, CAVITY05, CDDE1, DW2048, MEMPLUS)

Table 5 Number of iterations, computation time and explicitly computed relative residual norm (displayed in order of ADD20, ADD32, CAVITY05, CDDE1, DW2048, MEMPLUS).

ADD20	Iterations	Time	True res.
CGS	<u>374</u>	<u>0.06</u>	<u>-8.8</u>
CRS	<u>319</u>	<u>0.05</u>	<u>-10.0</u>
BiCGSTAB	649	0.11	-12.1
BiCRSTAB	698	0.12	-11.9
GPBiCG	<u>507</u>	<u>0.10</u>	-11.0
GPBiCR	<u>440</u>	<u>0.09</u>	-11.9
ADD32	Iterations	Time	True res.
CGS	<u>75</u>	<u>0.03</u>	-12.0
CRS	<u>69</u>	<u>0.02</u>	-12.9
BiCGSTAB	67	0.02	-12.0
BiCRSTAB	73	0.02	-12.1
GPBiCG	64	0.02	-12.1
GPBiCR	67	0.03	-12.3
CAVITY05	Iterations	Time	True res.
CGS	<u>723</u>	<u>0.13</u>	<u>-8.9</u>
CRS	<u>552</u>	<u>0.10</u>	<u>-10.9</u>
BiCGSTAB	<u>979</u>	0.17	-12.0
BiCRSTAB	<u>973</u>	0.18	-12.0
GPBiCG	958	0.19	-11.8
GPBiCR	1092	0.21	-10.6
CDDE1	Iterations	Time	True res.
CGS	<u>150</u>	0.00	<u>-9.6</u>
CRS	<u>127</u>	0.01	<u>-11.5</u>
BiCGSTAB	116	0.00	-12.2
BiCRSTAB	120	0.00	-13.3
GPBiCG	121	0.00	-12.1
GPBiCR	129	0.01	-12.1
DW2048	Iterations	Time	True res.
CGS	<u>1448</u>	0.18	-11.6
CRS	<u>1390</u>	0.18	-12.1
BiCGSTAB	<u>2708</u>	<u>0.35</u>	-12.1
BiCRSTAB	<u>2190</u>	<u>0.29</u>	-12.0
GPBiCG	1859	0.37	-12.0
GPBiCR	1936	0.40	-12.0
MEMPLUS	Iterations	Time	True res.
CGS	918	1.21	<u>-4.8</u>
CRS	999	1.32	<u>-11.8</u>
BiCGSTAB	<u>2217</u>	<u>2.94</u>	-12.1
BiCRSTAB	<u>1644</u>	<u>2.19</u>	-12.0
GPBiCG	<u>1390</u>	<u>2.22</u>	-11.7
GPBiCR	<u>1355</u>	<u>2.20</u>	-11.9

BiCRSTAB 法の反復回数, 計算時間を比較するとき, BiCRSTAB 法の反復回数は BiCGSTAB 法の最大 74%, 計算時間は最大 74%に減少した。さらに, GPBiCG 法と GPBiCR 法の反復回数, 計算時間を比較するとき, GPBiCR 法の反復回数は GPBiCG 法

の最大 88%, 計算時間は最大 90%に減少した。一方で, CRS 法が CGS 法の反復回数, または計算時間の点で優っていたのは ADD20, ADD32, CAVITY05, CDDE1, DW2048 の 5 つの問題に対してであり, BiCRSTAB 法が BiCGSTAB 法の反復回数, または計算時間の点で優っていたのは CAVITY05, DW2048, MEMPLUS の 3 つの問題に対してであった。また GPBiCR 法が GPBiCG 法の反復回数, または計算時間の点で優っていたのは ADD20, MEMPLUS の 2 つの問題についてであった。さらに, CRS 法で求められた近似解の精度は, CGS 法より良いか, 同程度であった。BiCRSTAB 法, GPBiCR 法で求められた近似解の精度は, BiCGSTAB 法, GPBiCG 法と同程度であった。以上, 提案した 3 つの解法のうち CRS 法は, 従来の CGS 法と比べて反復回数, 計算時間, 近似解の精度の点で顕著な効果があったといえる。また, BiCRSTAB 法, GPBiCR 法は, 取り上げたいいくつかの問題の反復回数, 計算時間に関して, 従来より効果があったといえる。

6. まとめ

BiCR 法の残差多項式の係数の計算方法を積型反復解法に取り入れることによって非対称行列用 CR 法に基づく積型反復解法を提案した。すなわち, 残差, 近似解ベクトルを更新するための漸化式は従来の積型反復解法と同一のものをを用い, 残差多項式の係数 α_k , β_k の計算方法を改良した。その結果, 数値実験では, 非対称行列用 CR 法に基づく積型反復解法は従来の CGS 法, BiCGSTAB 法, GPBiCG 法と比べて有効であった。

さらに, 本論文で導出したアルゴリズムは, 文献 13), 14) で発表されたアルゴリズムとはその導出手順と最終的なアルゴリズムが異なるため, その収束性も自ずと異なると思われる。そこで, 文献 14) で取り上げられた多数の疎行列の中から, 6 種類の行列を選び出して数値実験を行った結果, CRS 法だけでなく BiCRSTAB 法, GPBiCR 法も有効な場合があることが分かった。ただし, 文献 14) において GPBiCR 法は GPBiCG 法よりも良い収束性が得られなかったことを考慮すると, 今後, 他の問題に対する数値実験を積み重ね, 同様の結論が得られることを調べる必要がある。

謝辞 数値実験の補足に協力いただいた九州大学工学部電気情報工学科 4 年尾上勇介氏に感謝する。

参 考 文 献

- 1) 阿部邦美, 張 紹良, 三井斌友, 杉浦 洋: 線型連立系に対する積型反復解法の加速多項式の評価, 日本応用数理学会論文誌, Vol.6, No.4, pp.405-425 (1996).
- 2) Boisvert, R., Pozo, R., Remington, K., Miller, B. and Lipman, R.: Matrix Market. <http://math.nist.gov/MatrixMarket/>
- 3) Davis, T.: Sparse Matrix Collection. <http://www.cise.ufl.edu/research/sparse/matrices/>
- 4) Eisenstat, S.C., Elman, H.C. and Schultz, M.H.: Variational Iterative Methods for Nonsymmetric Systems of Linear Equations, *SIAM J. Numer. Anal.*, Vol.20, No.2, pp.345-357 (1983).
- 5) Fletcher, R.: Conjugate Gradient Methods for Indefinite Systems, *Lecture Notes in Mathematics*, Vol.506, pp.73-89 (1976).
- 6) Golub, H.G. and van der Vorst, H.A.: Closer to the Solution: Iterative Linear Solvers, *The State of the Art in Numerical Analysis*, Duff, I.S. and Watson, G.A. (Eds), pp.63-92, Clarendon Press, Oxford (1997).
- 7) Gutknecht, M.H.: Lanczos-type Solvers for Nonsymmetric Linear Systems of Equations, *Acta Numerica*, Vol.6, pp.217-397 (1997).
- 8) Lanczos, C.: Solution of Systems of Linear Equations by Minimized Iterations, *J. Res. Nat. Bur. Standards*, Vol.49, pp.33-53 (1952).
- 9) Saad, Y.: *Iterative Methods for Sparse Linear Systems 2nd edition*, SIAM, Philadelphia (2003).
- 10) Saad, Y.: A Flexible Inner-outer Preconditioned GMRES Algorithm, *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, Vol.14, No.2, pp.461-469 (1993).
- 11) Saad, Y. and Schultz, M.H.: GMRES: A Generalized Minimal Residual Algorithm for Solving Nonsymmetric Linear Systems, *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, Vol.7, No.3, pp.856-869 (1986).
- 12) 曾我部知広, 杉原正顕, 張 紹良: 共役残差法の非対称行列への拡張, 日本応用数理学会論文誌, Vol.15, No.3, pp.445-460 (2005).
- 13) 曾我部知広, 張 紹良: Bi-CR 法の積型解法に基づく自乗共役残差 (CRS) 法, 数値解析シンポジウム講演予稿集, pp.49-52 (2006).
- 14) 曾我部知広, 張 紹良: Bi-CR 法の積型解法について, 京都大学数理解析研究所講究録, 1362, pp.22-30 (2004).
- 15) Sonneveld, P.: CGS, A Fast Lanczos-type Solver for Nonsymmetric Linear Systems, *SIAM J. Sci. Comput.*, Vol.10, No.1 pp.36-52 (1989).
- 16) Stiefel, E.L.: Kernel Polynomial in Linear Algebra and their Numerical Applications, *Further contributions to the determination of eigenvalues*, *NBS Applied Math. Ser.*, Vol.49, pp.1-22 (1958).
- 17) 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.*, Vol.13, No.2, pp.631-644 (1992).
- 18) Zhang, S.-L.: GPBi-CG: Generalized Product-type Methods Based on Bi-CG for Solving Nonsymmetric Linear Systems, *SIAM J. Sci. Comp.*, Vol.18, No.2, pp.537-551 (1997).
- 19) 張 紹良, 藤野清次: ランチョス・プロセスに基づく積型反復解法, 日本応用数理学会論文誌, Vol.4, No.4, pp.343-360 (1995).

(平成 18 年 10 月 5 日受付)

(平成 19 年 2 月 6 日採録)



阿部 邦美 (正会員)

1998 年名古屋大学大学院人間情報学研究所満了。博士 (学術)。国立阿南工業高等専門学校講師, 理化学研究所情報環境室協力研究員を経て, 現在, 岐阜聖徳学園大学経済情報学部助教授。線形計算に興味を持つ。日本応用数理学会, SIAM 各会員。



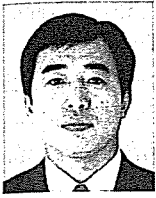
曾我部知広 (正会員)

1978 年生。2001 年東京大学工学部物理工学科卒業。2006 年博士 (工学, 東京大学)。2005 年名古屋大学大学院工学研究科助手。現在に至る。連立一次方程式の数値解法に興味を持つ。日本応用数理学会会員。



藤野 清次 (正会員)

1974 年京都大学理学部卒業。1993 年博士 (工学) 東京大学。2001 年九州大学情報基盤センター研究部教授。現在に至る。その間共役勾配法系統の反復法とその前処理の研究を行う。日本応用数理学会, 計算工学会, 日本シミュレーション学会各会員。



張 紹良 (正会員)

1990年3月筑波大学工学研究科博士課程修了。工学博士。現在名古屋大学大学院工学研究科計算理工学専攻教授。大規模行列計算における高速解法の開発および並列計算のアルゴリズムの研究に従事。日本応用数理学会, SIAM各会員。
