

ランチョス多項式の漸化式計算における 数値的不安定性の回避法

櫻井 鉄也[†] 高林 記誉宣^{††} 名取 亮[†]

ランチョス多項式を漸化式によって求めるときに多項式の係数の誤差が増大する状況を近似的ブレイクダウンと呼ぶ。本論文では、この近似的ブレイクダウンの原因となる多項式列のブロック構造について考察する。このブロックを回避して漸化式計算を行うことで数値的な誤差の蓄積を防ぐ方法についても述べる。この結果を連立一次方程式の反復解法である CGS 法に適用することで残差が改善される例を数値実験によって報告する。

A Method to Avoid Numerical Instability of a Recurrence Relation for Lanczos Polynomials

TETSUYA SAKURAI,[†] KIYONORI TAKABAYASHI^{††}
and MAKOTO NATORI[†]

A numerical instability to calculate the Lanczos polynomials by a recurrence relation is called a near-breakdown. A block structure of sequence of the Lanczos polynomials causes the near-breakdown. In this paper, some properties of the block structure are considered. A look-ahead algorithm which avoids a block is also described. Numerical results illustrating the improvement of residuals of the CGS method for solving systems of linear equations are discussed.

1. はじめに

ランチョス多項式を漸化式によって低い次数から順に計算するとき、漸化式中の分母に零が現れ計算を進めることができなくなることがある。このような状況をブレイクダウンと呼ぶ。数値的にブレイクダウンに近い状態となったときには、漸化式計算は進むが不安定となり誤差の増大が起こる。このような状況を近似的ブレイクダウンと呼ぶ。

ブレイクダウンを起こす1つの原因として、対応する次数のランチョス多項式が一意に存在しない場合が考えられる。このような一意に存在しない多項式の並びをブロックと呼ぶ。ブロックに属する多項式を求めないようにすることでブレイクダウンを回避する方法は look-ahead アルゴリズムと呼ばれる^{3),10)}。近似的なブレイクダウンが起きたときにも同様にして数値的

な不安定性を改善することができる。このとき不安定性の改善に有効なブロックをいかに見つけるかが問題となる。

CGS 法¹²⁾や Bi-CGSTAB 法¹³⁾などのランチョス法に基づく連立一次方程式の反復解法では、その反復過程におけるランチョス多項式の直交性が問題となる。これらの反復法においても直交性が崩れるような反復のステップの計算を避けることで残差を改善する方法が提案されている^{1)~3),10)}。また、Hankel 行列を係数行列とする連立一次方程式の高速解法やランチョス法に基づく固有値問題の解法などでも数値的な不安定性の改善に look-ahead アルゴリズムが用いられている^{6),7)}。ランチョス多項式や Padé 近似式の分母、多項式剰余列などは共通の性質を持ち、一般には形式的直交多項式と呼ばれる^{5),8)}。これらの漸化式による計算においても、数値的不安定性を引き起こすようなステップを避けて誤差の増大を防ぐ方法がそれぞれに提案されている^{4),8),9)}。

本論文では、まず、形式的直交多項式のブロック構造とブレイクダウンについて述べる。3章では、ランチョス多項式と形式的直交多項式の関係について示したうえで、ランチョス多項式の近似的ブレイクダウン

[†] 筑波大学電子・情報工学系

Institute of Information Sciences and Electronics, University of Tsukuba

^{††} 筑波大学大学院工学研究科

Doctoral Program in Engineering, University of Tsukuba

を引き起こすブロックについて考察を行う。従来、ブロックの先頭において漸化式中の分母に零に近い値が現れることに注意が払われてきたが、本論文ではこれ以外にブロックが終わるときにも桁落ちが起こる可能性があることを示す。したがって、1つのブロックが誤差に対してより大きな影響を与える可能性がある。4章では、CGS法の反復においてランチョス多項式がブロックとなるようなステップを検出し、このステップに対応する値を求めないようにする方法について述べる。連立一次方程式の積型反復解法では、一般に各反復における残差はランチョス多項式を含む式によって表すことができるが、特にCGS法は残差がランチョス多項式のみで表されることから前章の考察を検証するためには適当な方法であると考えられる。5章では、数値例によって3章の考察の結果を確認する。またCGS法の反復において残差の改善が見られる例を報告する。

2. 形式的直交多項式のブロック構造

本章では、次章での議論に必要となる形式的直交多項式のブロック構造について簡単に述べる。

\mathcal{P} を複素係数の多項式空間とし、双一次形式 $\langle \cdot, \cdot \rangle$ を

$$\langle \cdot, \cdot \rangle : \mathcal{P} \times \mathcal{P} \rightarrow \mathbb{C}$$

とする。 k 次の多項式 $\varphi_k(\xi)$ が

$$\langle \xi^j, \varphi_k(\xi) \rangle = 0, \quad j = 0, 1, \dots, k-1 \quad (1)$$

を満たすとき、 $\varphi_k(\xi)$ を $\langle \cdot, \cdot \rangle$ に関する形式的直交多項式と呼ぶ。複素数の列 $\mu_j, j \geq 0$ に対して

$$\langle \xi^i, \xi^j \rangle = \mu_{i+j}, \quad i, j = 0, 1, \dots$$

であるとする。 $\varphi_k(\xi) := \sum_{l=0}^k \rho_l \xi^l$ とおくと、条件(1)の左辺は

$$\langle \xi^j, \varphi_k(\xi) \rangle = \sum_{l=0}^k \rho_l \langle \xi^j, \xi^l \rangle = \sum_{l=0}^k \rho_l \mu_{j+l} \quad (2)$$

と表される。

$k \times k$ の Hankel 行列 H_k を $H_k := (\mu_{i+j})_{i,j=0}^{k-1}$ とする。 H_k が正則のとき、主係数を定めると $\varphi_k(\xi)$ は一意に存在する。このとき $\varphi_k(\xi)$ は正規であるという。以後、 $\varphi_k(\xi)$ はモノックであるとする。文献5)では H_k と $\varphi_k(\xi)$ について種々の性質が述べられている。ここで次章以降に関係するいくつかの性質をあげておく。

定理 2.1 H_k が正則ならば次の2つの条件は同値である。

- (i) $\langle \xi^{k+j}, \varphi_k(\xi) \rangle = 0, j = 0, 1, \dots, m-2$, および $\langle \xi^{k+m-1}, \varphi_k(\xi) \rangle \neq 0$.

- (ii) $H_{k+j}, j = 1, 2, \dots, m-1$ は特異, H_{k+m} は正則.

定理 2.2 H_k が正則で、 $H_{k+j}, j = 1, 2, \dots, m-1$ は特異、 H_{k+m} が正則ならば $\varphi_{k+j}(\xi) = \psi_k^{(j)}(\xi)\varphi_k(\xi), j = 1, 2, \dots, m-1$ と表すことができる。ここで、 $\psi_k^{(j)}(\xi)$ は任意の j 次のモノックな多項式である。

上の定理から、 $\varphi_{k+1}(\xi), \dots, \varphi_{k+m-1}(\xi)$ が正規でないときには、これらの多項式はすべて1つの多項式 $\varphi_k(\xi)$ を因子に含んでいることが分かる。また、 $\varphi_k(\xi)$ は条件(1)において、本来満たす範囲 $0 \leq j \leq k-1$ を超えて条件を満たしている。このとき $\varphi_{k+j}(\xi), j = 1, 2, \dots, m-1$ は内部多項式と呼ばれ、互いに直交性を持たない。このような正規でない直交多項式の並びをブロックと呼ぶ。

ここで $\tilde{H}_k := (\mu_{i+j+1})_{i,j=0}^{k-1}$ とし、 $\tilde{\varphi}_k(\xi)$ は

$$\langle \xi^{j+1}, \tilde{\varphi}_k(\xi) \rangle = 0, \quad j = 0, 1, \dots, k-1 \quad (3)$$

を満たす k 次のモノックな多項式とする。以下の定理は $\tilde{\varphi}_k(\xi)$ または $\varphi_{k+1}(\xi)$ が正規でない場合にその直前で成り立つ関係を示している。

定理 2.3 \tilde{H}_{k-1}, H_k が正則で \tilde{H}_k が特異のとき、 $\varphi_k(\xi) = \xi \tilde{\varphi}_{k-1}(\xi)$ である。

定理 2.4 H_k と \tilde{H}_k が正則で H_{k+1} が特異のとき、 $\tilde{\varphi}_k(\xi) = \varphi_k(\xi)$ である。

これらの関係が成り立つかどうかによって次に求めようとしている多項式が正規かどうかを調べることができ、したがってブロックの始まりを検出することができる。

3. ランチョス多項式の近似的ブレイクダウン

本章では、まずランチョス多項式と形式的直交多項式の関係について示す。さらに、前章にあげた形式的直交多項式の性質を利用してランチョス多項式の近似的ブレイクダウンについて考察する。

行列 A とベクトル b , および任意のベクトル x_0 が与えられたとする。連立一次方程式 $Ax = b$ の近似解 x_k が

$$x_k - x_0 \in \text{span}(r_0, Ar_0, \dots, A^{k-1}r_0)$$

を満たすとする、 x_k は適当な係数 $\rho_l, 1 \leq l \leq k$ によって

$$x_k = x_0 - \sum_{l=1}^k \rho_l A^{l-1} r_0$$

のように表される。したがって残差 r_k は

$$\begin{aligned} r_k &= b - Ax_k = b - Ax_0 + \sum_{l=1}^k \rho_l A^l r_0 \\ &= \left(1 + \sum_{l=1}^k \rho_l A^l \right) r_0 \end{aligned}$$

となる. $\rho_0 \equiv 1$ とおき, $P_k(\xi) := \sum_{l=0}^k \rho_l \xi^l$ とおくと, 残差は多項式 $P_k(\xi)$ を用いて

$$r_k = P_k(A)r_0$$

と表される. さらに r_k が次式のような直交条件

$$r_k \perp \text{span}(y, A^H y, \dots, (A^H)^{k-1} y) \quad (4)$$

を満たすように x_k を選ぶものとする. ここでベクトル y は任意の零でないベクトルとし, 記号 A^H は行列 A の共役転置を表す. このような多項式 $P_k(\xi)$ はランチョス多項式と呼ばれる.

r_k の直交条件 (4) は内積によって

$$(y, A^j r_k) = 0, \quad j = 0, 1, \dots, k-1$$

と表せるが, 複素数の列を $\mu_j := (y, A^j r_0)$, $j = 0, 1, \dots$ とおくと,

$$\begin{aligned} (y, A^j r_k) &= (y, A^j P_k(A)r_0) \\ &= \sum_{l=0}^k \rho_l (y, A^{j+l} r_0) = \sum_{l=0}^k \rho_l \mu_{j+l} \end{aligned}$$

となる. 式 (2) より, 結局多項式 $P_k(\xi)$ の満たす条件は

$$\langle \xi^j, P_k(\xi) \rangle = 0, \quad j = 0, 1, \dots, k-1 \quad (5)$$

と表すことができる. したがって多項式 $P_k(\xi)$ は定数項を 1 に正規化した形式的直交多項式と見なせる. 以後, 直交条件は特に断らない限り ξ に関する多項式の条件として議論を進める.

多項式 $P_k(\xi)$ は次のような漸化式を満たす¹⁾.

$$P_{k+1}(\xi) = P_k(\xi) + \gamma_k \xi \tilde{P}_k(\xi), \quad (6)$$

$$\tilde{P}_{k+1}(\xi) = P_k(\xi)/\gamma_k + (\xi + \sigma_k) \tilde{P}_k(\xi). \quad (7)$$

ここで $\tilde{P}_k(\xi)$ は

$$\langle \xi^{j+1}, \tilde{P}_k(\xi) \rangle = 0, \quad j = 0, 1, \dots, k-1 \quad (8)$$

を満たす k 次のモニックな多項式で, $P_0 = \tilde{P}_0 = 1$ である. γ_k, σ_k は $P_{k+1}(\xi), \tilde{P}_{k+1}(\xi)$ がそれぞれ条件 (5), (8) を $j = k$ まで満たすように決められ,

$$\gamma_k = -\frac{\langle \xi^k, P_k \rangle}{\langle \xi^{k+1}, \tilde{P}_k \rangle}, \quad (9)$$

$$\sigma_k = \frac{\langle \xi^{k+1}, P_k \rangle}{\langle \xi^k, P_k \rangle} - \frac{\langle \xi^{k+2}, \tilde{P}_k \rangle}{\langle \xi^{k+1}, \tilde{P}_k \rangle} \quad (10)$$

となる. $\langle \xi^k, P_k(\xi) \rangle = 0$ あるいは $\langle \xi^{k+1}, \tilde{P}_k(\xi) \rangle = 0$ のとき γ_k または σ_k の計算で分母に零が現れブレイクダウンが起こる.

さらに任意の自然数 m について $P_{k+m}(\xi),$

$\tilde{P}_{k+m}(\xi)$ は $P_k(\xi), \tilde{P}_k(\xi)$ を用いて次のように表すことができる.

$$P_{k+m} = v_k^{(m)} P_k + \xi w_k^{(m)} \tilde{P}_k, \quad (11)$$

$$\tilde{P}_{k+m} = s_k^{(m)} P_k + t_k^{(m)} \tilde{P}_k. \quad (12)$$

ここで, $v_k^{(m)}, w_k^{(m)}, s_k^{(m)}, t_k^{(m)}$ はそれぞれ $m-1, m-1, m-1, m$ 次の多項式で, $v_k^{(m)}(0) = 1$ で $t_k^{(m)}$ はモニックである. これらの多項式の係数は $P_{k+m}(\xi), \tilde{P}_{k+m}(\xi)$ がそれぞれ条件 (5); (8) を $j = k+m-1$ まで満たすように決める. この関係式により $P_k(\xi), \tilde{P}_k(\xi)$ から途中のステップを飛ばしてステップ $k+m$ の多項式 $P_{k+m}(\xi), \tilde{P}_{k+m}(\xi)$ を直接求めることができる.

P_k および \tilde{P}_k について以下の関係が成り立つ. ここで多項式のノルム $\|\cdot\|$ は係数の絶対値和を用いる. 任意の多項式 f, g に対して $\|f \cdot g\| \leq \|f\| \cdot \|g\|$ が成り立つことに注意する.

定理 3.1 $P_k(\xi), \tilde{P}_{k-1}(\xi)$ は正規であるとする. このとき

$$\frac{\|\tilde{P}_k - \frac{1}{\gamma_{k-1}} P_k\|}{\|\frac{1}{\gamma_{k-1}} P_k\|} = \frac{|\langle \xi^k, P_k \rangle|}{|\langle \xi^k, \tilde{P}_{k-1} \rangle|} \frac{\|\tilde{P}_{k-1}\|}{\|P_k\|}, \quad (13)$$

$$\frac{\|P_{k+1} - \gamma_k \xi \tilde{P}_k\|}{\|\gamma_k \tilde{P}_k\|} = \frac{|\langle \xi^{k+1}, \tilde{P}_k \rangle|}{|\langle \xi^k, P_k \rangle|} \frac{\|P_k\|}{\|\tilde{P}_k\|}. \quad (14)$$

証明 漸化式 (6), (7) から

$$\tilde{P}_k = \frac{1}{\gamma_{k-1}} P_k + \sigma_{k-1} \tilde{P}_{k-1} \quad (15)$$

となる. $\langle \cdot, \cdot \rangle$ は線形であることを利用すると上式より

$$\langle \xi^k, \tilde{P}_k \rangle = \frac{1}{\gamma_{k-1}} \langle \xi^k, P_k \rangle + \sigma_{k-1} \langle \xi^k, \tilde{P}_{k-1} \rangle$$

を得る. $\langle \xi^k, \tilde{P}_k \rangle = 0$ であるので

$$\gamma_{k-1} \sigma_{k-1} = -\langle \xi^k, P_k \rangle / \langle \xi^k, \tilde{P}_{k-1} \rangle \quad (16)$$

となる. また, 式 (15) から

$$\frac{\|\tilde{P}_k - \frac{1}{\gamma_{k-1}} P_k\|}{\|\frac{1}{\gamma_{k-1}} P_k\|} = \frac{|\gamma_{k-1} \sigma_{k-1}| \|\tilde{P}_{k-1}\|}{\|P_k\|} \quad (17)$$

となる. 式 (16), (17) より式 (13) を得る.

式 (14) は式 (6) から同様にして得る. \square

P_k が直交条件を余分に満たし $\langle \xi^k, P_k \rangle = 0$ となったときには $\tilde{P}_k = P_k/\gamma_{k-1}$ となりブレイクダウンが起こる. これは前章の定理 2.4 に対応している. したがって式 (13) の値が小さくなったときには次のステップでブレイクダウンに近い状況が起こることが予想さ

れる。式 (14) は定理 2.3 に対応しており、同様に値が小さくなったときには近似的ブレイクダウンが起こることが予想される。

次に、近似的なブレイクダウンを起こすブロックの中での状況を考える。式 (11) より

$$P_{k+m} - \xi w_k^{(m)} \tilde{P}_k = v_k^{(m)} P_k$$

であることから、適当な $\varepsilon > 0$ について

$$\frac{\|P_{k+m} - \xi w_k^{(m)} \tilde{P}_k\|}{\|P_{k+m}\|} = \frac{\|v_k^{(m)} P_k\|}{\|P_{k+m}\|} \leq \varepsilon \quad (18)$$

であると仮定する。 ε が小さいとき、これは P_{k+m} が \tilde{P}_k を近似的に因子に含む状況を表しており、 $m=1$ のときには式 (14) に対応している。同様に \tilde{P}_{k+m} についても \tilde{P}_k を近似的に因子に含んだときには

$$\frac{\|\tilde{P}_{k+m} - t_k^{(m)} \tilde{P}_k\|}{\|\tilde{P}_{k+m}\|} = \frac{\|s_k^{(m)} P_k\|}{\|P_{k+m}\|} \leq \varepsilon \quad (19)$$

と表される。このような状況において次の性質がある。

定理 3.2 ある $\varepsilon > 0$ に対して

$$\|v_k^{(m)} P_k\| \leq \varepsilon \|P_{k+m}\|, \quad (20)$$

$$\|s_k^{(m)} P_k\| \leq \varepsilon \|\tilde{P}_{k+m}\| \quad (21)$$

が成り立つとする。このとき

$$\|v_k^{(m+1)} P_k\| \leq \varepsilon (\|P_{k+m}\| + |\gamma_{k+m}| \|\tilde{P}_{k+m}\|) \quad (22)$$

$$\|s_k^{(m+1)} P_k\| \leq \varepsilon (\|P_{k+m}\| / |\gamma_{k+m}| + (1 + |\sigma_{k+m}|) \|\tilde{P}_{k+m}\|). \quad (23)$$

証明 P_{k+m} , \tilde{P}_{k+m} に関する式 (11), (12) と漸化式 (6), (7) から $v_k^{(m)}$ に関する漸化式

$$v_k^{(m+1)} = v_k^{(m)} + \gamma_{k+m} \xi s_k^{(m)}$$

を得る。両辺に P_k をかけてノルムをとると

$$\|v_k^{(m+1)} P_k\| \leq \|v_k^{(m)} P_k\| + |\gamma_{k+m}| \|\xi\| \|s_k^{(m)} P_k\|$$

となる。よって仮定の式 (20), (21) より式 (22) を得る。

式 (23) も同様に証明する。□

式 (18), (22) から

$$\begin{aligned} \frac{\|P_{k+m+1} - \xi w_k^{(m+1)} \tilde{P}_k\|}{\|P_{k+m+1}\|} &= \frac{\|v_k^{(m+1)} P_k\|}{\|P_{k+m+1}\|} \\ &\leq \varepsilon \frac{\|P_{k+m}\| + |\gamma_{k+m}| \|\tilde{P}_{k+m}\|}{\|P_{k+m+1}\|} \end{aligned}$$

となる。したがって、もし上式の右辺において ε が十分に小さいとき

$$\frac{\|P_{k+m}\| + |\gamma_{k+m}| \|\tilde{P}_{k+m}\|}{\|P_{k+m+1}\|} \quad (24)$$

が大きな値とならなければ、左辺の値は小さいことになり、 P_{k+m+1} もまた \tilde{P}_k を近似的に因子として含むことになる。逆に上式の値が大きいたときには P_{k+m+1} は \tilde{P}_k を因子に含まず、ブロックの外にあると考えられる。式 (24) は P_{k+m+1} を P_{k+m} , \tilde{P}_{k+m} から求めるときに中間的に現れる値の大きさと結果の比を表しており、この値が大きいたときには途中で項どうしのキャンセルが起きている可能性がある。式 (23) についても同様の考察が成り立つ。

この結果により、ブロック中の多項式からブロックの外の多項式を求めるときに精度が低下する可能性があることが分かる。

式 (13), (14) の右辺を用いて

$$\eta_k := \min \left(\frac{|\langle \xi^k, P_k \rangle| \|\tilde{P}_{k-1}\|}{|\langle \xi^k, \tilde{P}_{k-1} \rangle| \|P_k\|}, \frac{|\langle \xi^{k+1}, \tilde{P}_k \rangle| \|P_k\|}{|\langle \xi^k, P_k \rangle| \|\tilde{P}_k\|} \right), \quad k \geq 1 \quad (25)$$

とおく。特に $k=0$ のときには $\tilde{P}_{-1} = 0$ と見なし

$$\eta_k := \min \left(\frac{|\langle \xi^k, P_k \rangle|}{\|P_k\|}, \frac{|\langle \xi^{k+1}, \tilde{P}_k \rangle| \|P_k\|}{|\langle \xi^k, P_k \rangle| \|\tilde{P}_k\|} \right)$$

とする。また、式 (24) の考察から、漸化式 (6), (7) の計算において中間結果の増大を求め、これをブロックが終わることを調べる指標とする。そのために

$$\tau_k := \min \left(\frac{\|P_k\|}{\|P_{k-1}\| + |\gamma_{k-1}| \|\tilde{P}_{k-1}\|}, \frac{\|\tilde{P}_k\|}{\frac{1}{|\gamma_{k-1}|} \|P_{k-1}\| + (1 + |\sigma_{k-1}|) \|\tilde{P}_{k-1}\|} \right)$$

とおき、 η_k が小さくなったときには、その次のステップからはブロックであると見なし、その後 τ_{k+m} が小さくなったときにはその直前の $k+m-1$ ステップにおいてブロックが終わり、 $k+m$ ステップはブロックの外であると見なす。ここで、 $P_0 = \tilde{P}_0 = 1$ は必ずブロックには属さないことに注意する。

4. CGS 法への適用

ブレイクダウンを起こすようなブロックの内部の多項式は互いに直交性を持たない。したがって近似的なブレイクダウンを起こしたときには、ブロックに属する多項式どうしの直交性が崩れていると考えられる。CGS 法や Bi-CGSTAB 法などのランチョス法に基づく反復解法ではランチョス多項式の直交性が問題となるため、反復においてブロックに対応したステップの計算を避けることは直交性の崩れた多項式を利用し

ないことになり、不安定性の改善が期待される。特に CGS 法の残差はランチョス多項式 $P_k(\xi)$ を用いて

$$r_k = P_k^2(A)r_0$$

と表されるため、 $P_k(\xi)$ の影響がより直接的に現れ、前章の考察結果の検証には有効な方法であると考えられる。

$$\hat{P}_k(\xi) := \gamma_{k-1} \tilde{P}_k(\xi)$$

とし、

$$p_k := \hat{P}_k^2(A)r_0, \quad u_k := P_k(A)\hat{P}_k(A)r_0$$

とおくと、

$$\langle \xi^k, P_k \rangle = \frac{1}{\text{lc}(P_k)} \langle P_k, P_k \rangle = \frac{1}{\gamma_{k-1}} \langle y, r_k \rangle,$$

$$\langle \xi^{k+1}, \tilde{P}_k \rangle = \frac{1}{\gamma_{k-1}^2} \langle \xi \hat{P}_k, \hat{P}_k \rangle = \frac{1}{\gamma_{k-1}^2} \langle y, Ap_k \rangle$$

の関係がある。ここで $\text{lc}(P_k)$ は $P_k(\xi)$ の主係数を表し、 $\text{lc}(P_k) = \gamma_{k-1}$ である。

これらの関係、および式 (9) から

$$\gamma_k = \gamma_{k-1} \langle y, r_k \rangle / \langle y, Ap_k \rangle$$

を得る。また、式 (16) より

$$\begin{aligned} \sigma_k &= -\frac{1}{\gamma_k} \frac{\langle \xi^{k+1}, P_{k+1} \rangle}{\langle \xi^{k+1}, \tilde{P}_k \rangle} = -\frac{\langle \xi^{k+1}, P_{k+1} \rangle}{\langle \xi^k, P_k \rangle} \\ &= -\frac{\gamma_{k-1} \langle y, r_{k+1} \rangle}{\gamma_k \langle y, r_k \rangle} \end{aligned}$$

となる。この関係を用いると以下のアルゴリズムで示すように P_{k+1} , \tilde{P}_{k+1} の漸化式で必要となる γ_k , σ_k の計算は、CGS 法で用いられている値を利用してスカラー計算のみで行える。

アルゴリズムにおいてブロックでないときには p_{k+1} , u_{k+1} , r_{k+1} , x_{k+1} などは CGS 法の反復によって計算する。 $k+1, \dots, k+m-1$ がブロックと判定され、ステップ k からステップ $k+m$ を求めるときの計算は文献 1) の方法を用いる。この計算法ではステップ k からステップ $k+m$ の値を求めるためには CGS 法の反復で m ステップ求めるときの約 2 倍の計算量となる。

アルゴリズム中ではベクトルとスカラーを明示するために、ベクトルはアルファベットの小文字、スカラーはギリシャ文字を変数名に用いている。

アルゴリズム

Input : $A, b, x_0, y, \text{tol}, \varepsilon$.

$p_0 = u_0 = r_0 = b - Ax_0$; $q_0 = 0$;

$\rho_0 = 0$; $\gamma_{-1} = 1$; $P_0 = \tilde{P}_0 = 1$;

$k = 0$;

BLOCK = FALSE;

```

while  $\|b - Ax_k\| > \text{tol}$ 
  if BLOCK = FALSE then
    if  $|\eta_k| \leq \varepsilon$  then
      BLOCK = TRUE;
       $m = 1$ ;
    else
       $v = Ap_k$ ;  $\alpha = \rho_k / \langle y, v \rangle$ ;
       $q_{k+1} = u_k - \alpha v$ ;  $\hat{u} = u_k + q_{k+1}$ ;
       $x_{k+1} = x_k + \alpha \hat{u}$ ;  $r_{k+1} = r_k - \alpha A \hat{u}$ ;
       $\rho_{k+1} = \langle y, r_{k+1} \rangle$ ;  $\beta = \rho_{k+1} / \rho_k$ ;
       $u_{k+1} = r_{k+1} + \beta q_{k+1}$ ;
       $p_{k+1} = u_{k+1} + \beta(q_k + \beta p_k)$ ;
       $\gamma_k = \gamma_{k-1} \alpha$ ;  $\sigma_k = -\beta / \alpha$ ;
       $P_{k+1}(\xi) = P_k(\xi) + \gamma_k \xi \tilde{P}_k(\xi)$ ;
       $\tilde{P}_{k+1}(\xi) = \frac{1}{\gamma_k} P_k(\xi) + (\xi + \sigma_k) \tilde{P}_k(\xi)$ ;
       $k = k + 1$ ;
    end if
  else
    compute  $q_{k+m}, x_{k+m}, r_{k+m}, \rho_{k+m},$ 
       $u_{k+m}, p_{k+m}$ ;
    compute  $P_{k+m}, \tilde{P}_{k+m}$ ;
    if  $|\tau_{k+m}| \leq \varepsilon$  then
      BLOCK = FALSE;
       $k = k + m$ ;
    else
       $m = m + 1$ ;
    end if
  end if
end while

```

ここで ε はブロックの判定のための基準となる値であり、 tol は収束判定のための値である。ブロックが現れないときの計算は CGS 法とほぼ同じであり、 γ_k , σ_k , P_{k+1} , \tilde{P}_{k+1} の計算のみが加わっている。

P_k , \tilde{P}_k の漸化式やこれらのノルムの計算の手間は多項式の次数 k に比例し、これは反復回数と一致する。CGS 法の 1 回反復の主要な手間は行列 A とベクトルの積である。 A が疎行列でこの手間が A の大きさ n に比例するとき、 n に対して反復回数 k が十分に小さければ η_k , τ_k の計算量は主要な計算量と比較して小さいものと見なせる。

文献 2), 10) では Bi-CGSTAB 法においてステップ k からステップ $k+m$ を求める方法が示されており、これを利用すると本アルゴリズムを Bi-CGSTAB 法に適用することも可能となる。

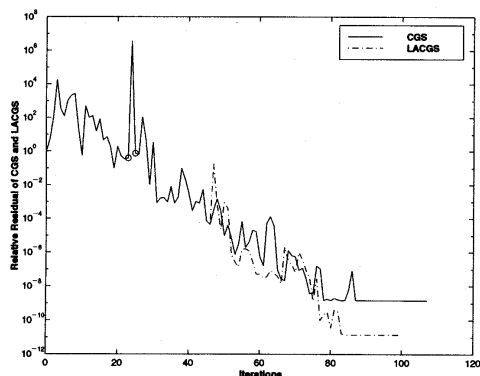


図6 相対残差の比較 (数値例 4)
Fig. 6 Comparison of relative residuals in Example 4.

6. おわりに

ランチョス多項式の漸化式計算で近似的ブレイクダウンを引き起こすブロックについて考察を行い、ブロックが現れたときだけでなくブロックが終わるときにも誤差の増大が起こる可能性を示した。また、このようなブロックの先頭、および後尾を探す基準となる式を示した。CGS法において、この基準から推測されるブロックを避けることで残差が改善される例を示した。

本論文で示した解析手法はランチョス多項式の漸化式の不安定性を形式的直交多項式の直交性の問題としてとらえている。このようにして置きなおされた問題では行列 A の対称性の有無やどのような反復法を用いるかなどは直接には現れてこない。また、ブロックの現れ方を調べることで、解くべき連立一次方程式の右辺ベクトルや前処理などがもたらす影響を比較検討する方法としても利用できるものと考えられる。

本論文では理論的な考察結果を検証しやすいようにブロック構造が比較的是っきりと現れる数値例を選んだ。実用的な大規模問題では本論文で示した以外の原因も複合して起こっている可能性があり、ブロックを回避する方法の実用問題での有効性は今後の検討課題である。Bi-CGSTAB法などCGS法以外の積型反復解法では、残差はランチョス多項式だけでなくもう1つの多項式との積として表される。このような一般の積型反復解法ではこの多項式の影響についても考慮する必要がある。

参考文献

1) Brezinski, C. and Redivo-Zaglia, M.: Treatment of near-breakdown in the CGS algorithm,

- Numer. Algorithms*, Vol.7, pp.33-73 (1994).
 2) Brezinski, C. and Redivo-Zaglia, M.: Look-ahead in Bi-CGSTAB and other product methods for linear systems, *BIT*, Vol.35, pp.169-201 (1995).
 3) Brezinski, C. and Sadok, H.: Avoiding breakdown in the CGS algorithm, *Numer. Algorithms*, Vol.1, pp.199-206 (1991).
 4) Cabay, S. and Meleshko, R.: A weakly stable algorithm for Padé approximants and the inversion of Hankel matrices, *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, Vol.14, pp.735-765 (1993).
 5) Draux, A.: Formal orthogonal polynomials revisited. Applications, *Numer. Algorithms*, Vol.11, pp.143-158 (1996).
 6) Freund, R.W., Gutknecht, M.H. and Nachtigal, N.M.: An implementation of the look-ahead Lanczos algorithm for non-Hermitian matrices, *SIAM J. Sci. Comput.*, Vol.14, pp.137-158 (1993).
 7) Freund, R.W. and Zha, H.: A look-ahead algorithm for the solution of general Hankel systems, *Numer. Math.*, Vol.64, pp.295-321 (1993).
 8) Gragg, W.B. and Gutknecht, M.H.: Stable look-ahead versions of the Euclidean and Chebyshev algorithms, *International Series of Numerical Mathematics*, Vol.119, pp.231-260 (1994).
 9) Gutknecht, M.H. and Hochbruck, M.: Optimized look-ahead recurrences for adjacent rows in the Padé table, *BIT*, Vol.36, pp.264-286 (1990).
 10) Gutknecht, M.H. and Ressel, K.J.: Look-ahead procedures for Lanczos-type product methods based on three-term recurrences, IPS Research Report TR-96-19, ETH (1996).
 11) <http://math.nist.gov/MatrixMarket/>
 12) Sonneveld, P.: CGS: A fast Lanczos-type solver for nonsymmetric linear systems, *SIAM J. Sci. Statist. Comput.*, Vol.10, pp.36-52 (1989).
 13) van der Vorst, H.A. and Vuik, C.: Bi-CGSTAB: A fast and smoothly converging variant of Bi-CG for the solution of nonsymmetric linear systems, *SIAM J. Sci. Statist. Comput.*, Vol.13, pp.631-644 (1992).

(平成 10 年 12 月 21 日受付)

(平成 11 年 10 月 7 日採録)

**櫻井 鉄也 (正会員)**

1961年生。1986年名古屋大学大学院工学研究科博士課程前期課程情報工学専攻修了。同年同大学助手。筑波大学講師を経て現在、筑波大学電子・情報工学系助教授。工学博士。非線形方程式の解法と有理関数近似法の応用、および数値ソフトウェアの利用支援の研究に従事。1996年日本応用数理学会論文賞受賞。日本応用数理学会会員。

**高林 記 誉 宣**

1974年生。1997年筑波大学情報学類卒業。同年同大学院工学研究科電子・情報工学専攻入学。現在に至る。連立一次方程式の反復解法の研究に興味を持つ。

**名取 亮 (正会員)**

1941年生。1969年東京大学大学院工学系研究科博士課程修了。工学博士。同年同大学大型計算機センター助手。1974年電気通信大学電気通信学部助教授。1980年筑波大学電子・情報工学系助教授。1987年同教授。現在に至る。専攻分野、数値解析、応用数学。日本数学会、日本物理学会、日本応用数理学会各会員。