テクニカルノート

MCGS法：非対称連立一次方程式のための新しい反復解法

金　成海[†]　張　紹良[††]　名取　亮[††]
櫻井鉄也[††]　周　偉東[††]

大規模な非対称連立一次方程式 $Ax=b$ を解く積型反復解法としてCGS法があり，その有効性が多くの数値実験で確認されている．本研究では，CGS法の改良版として新しい積型反復解法（MCGS法）を提案し，さらに，理論的にこの新しい解法はCGS法よりつねに収束が速いことを明らかにする．最後に数値実験でMCGS法の有効性を検証する．

Modified CGS Method for the Iterative Solution of Nonsymmetric Linear Systems

CHENG HAI JIN,[†] SHAO-LIANG ZHANG,[††] MAKOTO NATORI,[††]
TETSUYA SAKURAI[††] and WEI DONG ZHOU[††]

In recent years the Conjugate Gradient Squared (CGS) method has been recognized as an attractive variant of the Bi-Conjugate Gradient (Bi-CG) iterative method for the solution of nonsymmetric linear systems. In this paper, a variant of CGS is proposed which converges always faster than CGS method, named MCGS (Modified CGS) method.

1. はじめに

近年，大規模な非対称連立一次方程式 $Ax=b$ を解く積型反復解法の研究がさかんに行われている．その代表的な解法としてCGS法[7]がある．しかし，CGS法が高い収束性を持っていることが多くの数値実験で実証された一方で，それが不安定なこともよく知られている[9),10)]．このようなCGS法の不安定性を克服するため，Bi-CGSTAB法[9]，Bi-CGSTAB2法[2]，GPBi-CG法[10]など様々な積型反復解法が提案されたが，これらの解法とCGS法を理論的に比較することは困難である．本研究では，CGS法の改良版として新しい積型反復解法を提案し，さらに，理論的にこの新しい解法はCGS法よりつねに収束が速いことを明らかにする．最後に数値実験で新しい解法の有効性を検証する．

† 筑波大学大学院博士課程工学研究科
Doctral Program in Institute Science and Electronics, University of Tsukuba
†† 筑波大学電子・情報工学系
Institute Science and Electronics, University of Tsukuba

2. Modified CGS法のアルゴリズム

非対称行列 A を係数とする連立一次方程式

$$Ax=b \tag{1}$$

を解くBi-CG法[1]において，残差ベクトル r_n^{BCG} と補助ベクトル p_n は多項式 $R_n(\lambda)$ と $P_n(\lambda)$ によって次のように表せる．

$$r_n=R_n(A)r_0, \quad p_n=P_n(A)r_0 \tag{2}$$

特に，$R_n(\lambda)$ はランチョス多項式と呼ばれる．また，多項式 $R_n(\lambda)$ と $P_n(\lambda)$ は次の交代漸化式を満たす[3),10)]．

$$R_0(\lambda)=1, \quad P_0(\lambda)=1$$

$$R_{n+1}(\lambda)=R_n(\lambda)-\alpha_n\lambda P_n(\lambda) \tag{3}$$

$$P_{n+1}(\lambda)=R_{n+1}(\lambda)+\beta_n P_n(\lambda) \tag{4}$$

ここで，α_n，β_n は次のように求められる．

$$\alpha_n=\frac{((A^H)^n r_0^*, r_n)}{((A^H)^n r_0^*, Ap_n)} \tag{5}$$

$$\beta_n=-\alpha_n\frac{((A^H)^{n+1} r_0^*, r_{n+1})}{((A^H)^n r_0^*, r_n)} \tag{6}$$

Bi-CG法の変形として，自乗共役勾配法（Conjugate Gradient Squared method, CGS法）[7] がある．CGS法では，残差 r_n を構成するために，Bi-CG法に現れたランチョス多項式 $R_n(A)$ が次のように使われる．

$$r_n^{\mathrm{CGS}} = R_n(A) r_n^{BCG} = R_n(A) R_n(A) r_0 \qquad (7)$$

ここで，$R_n(A)R_n(A)$ という 2 つの多項式の積の型をとることで，Bi-CG 法を構成したときに必要となったクリロフ部分空間 $K_n(A^H, r_0^*)$ は作らなくてもよいことになった[10)].

積型反復解法では，一般に次のように残差ベクトル r_n が定義される．

$$r_n = Q_n(A) r_n^{BCG} = Q_n(A) R_n(A) r_0 \qquad (8)$$

適当な条件を満たす $Q_n(A)$ を選択することによって，様々な反復解法が導入される．たとえば，多項式 $Q_n(A)$ を $R_n(A)$ にすると，CGS 法が得られる．Bi-CGSTAB 法，GPBi-CG 法では，下記の漸化式を満たす多項式 $Q_n(\lambda)$ を用いる．

$$Q_{n+1}(\lambda) = (1 + \eta_n - \zeta_n \lambda) Q_n(\lambda) - \eta_n Q_{n-1}(\lambda)$$

ここで，パラメータ η_n と ζ_n は残差 r_n のノルムを最小にするように決められる．η_n=0 のときは Bi-CGSTAB 法である．

Bi-CGSTAB 法，GPBi-CG 法などは多くの数値例によって高速の収束性が示されている．しかし，$Q_n(A)$ の漸化式から分かるように，$Q_n(A)$ は $R_n(A)$ と独立な多項式であるため，理論的に CGS 法と比較することが困難である．

2.1 新しい $Q_n(A)$ の定義

$Q_n(A)$ の定義の仕方に応じて，いろいろな積型反復解法が考えられるが，CGS 法の安定性を改良するためには，CGS 法の良い面の性質がそのまま新しい多項式 $Q_n(A)$ に生かされることが望ましい．本研究では $Q_n(A)$ を次のように定義する．

$$Q_{n+1}(\lambda) = \gamma_n R_{n+1}(\lambda) + (1 - \gamma_n) Q_n(\lambda) \qquad (9)$$

ここで，γ_n はパラメータである．式 (9) から分かるように，$Q_n(A)$ の漸化式の中には $R_n(A)$ が含まれており，理論的に CGS 法と比較することが可能になる（定理 1 で示す）．また，式 (9) は Weiss の論文[8)]で残差ベクトル r_n に対するスムージングテクニックとして用いられたものであり，CGS 法の安定性が改良されることが期待できる．

2.2 漸化式による残差ベクトルの計算

$Q_n(A)$ の定義より，新しい残差ベクトル r_n は，

$$r_n = Q_n(A) R_n(A) r_0 \qquad (10)$$

のようになる．ベクトル r_n と $Ax = b$ の解 x_n を求めるために以下の補助ベクトルを導入する[4),6)]（以下 Q_n, R_n, P_n はそれぞれ $Q_n(A), R_n(A), P_n(A)$ を表す）．

$$\begin{aligned} g_n &= Q_n P_n r_0, & s_n &= Q_n R_{n+1} r_0 \\ r_n^{\mathrm{CGS}} &= R_n R_n r_0, & p_n^{\mathrm{CGS}} &= P_n P_n r_0 \\ e_n^{\mathrm{CGS}} &= P_n R_n r_0, & h_n^{\mathrm{CGS}} &= P_n R_{n+1} r_0 \end{aligned}$$

漸化式 (3)，(4) と (9) から，ベクトル r_n，g_n，s_n に関する下記の漸化式を作ることができる．

$$\begin{aligned} r_{n+1} &= Q_{n+1} R_{n+1} r_0 \\ &= \gamma_n R_{n+1} R_{n+1} r_0 + (1-\gamma_n) Q_n R_{n+1} r_0 \\ &= \gamma_n r_{n+1}^{\mathrm{CGS}} + (1-\gamma_n) s_n \qquad (11) \\ g_{n+1} &= Q_{n+1} P_{n+1} r_0 \\ &= Q_{n+1} R_{n+1} r_0 + \beta_n Q_{n+1} P_n r_0 \\ &= r_{n+1} + \beta_n (\gamma_n R_{n+1} + (1-\gamma_n) Q_n) P_n r_0 \\ &= r_{n+1} + \beta_n ((1-\gamma_n) g_n + \gamma_n h_{n+1}) \qquad (12) \\ s_n &= Q_n R_{n+1} r_0 \\ &= Q_n R_n r_0 - \alpha_n A Q n P_n r_0 \\ &= r_n - \alpha_n A g_n \qquad (13) \end{aligned}$$

ただし，r_n^{CGS}，p_n^{CGS}，h_n^{CGS}，e_n^{CGS} の漸化式は CGS 法から次のように表せる．

$$h_{n+1}^{\mathrm{CGS}} = e_n^{\mathrm{CGS}} - \alpha_n A p_n^{\mathrm{CGS}} \qquad (14)$$

$$r_{n+1}^{\mathrm{CGS}} = r_n^{\mathrm{CGS}} - \alpha_n A (e_n^{\mathrm{CGS}} + h_{n+1}^{\mathrm{CGS}}) \qquad (15)$$

$$e_{n+1}^{\mathrm{CGS}} = r_{n+1}^{\mathrm{CGS}} + \beta_n h_{n+1}^{\mathrm{CGS}} \qquad (16)$$

$$p_{n+1}^{\mathrm{CGS}} = e_{n+1} + \beta_n (h_{n+1} + \beta_n p_n^{\mathrm{CGS}}) \qquad (17)$$

2.3 近似解 x_n に関する漸化式

連立一次方程式 $Ax = b$ の近似解 x_n を求めるために，x_n^{CGS}，y_n を次の式

$$r_n^{\mathrm{CGS}} = b - A x_n^{\mathrm{CGS}}, \qquad s_n = b - A y_n \qquad (18)$$

を満たすように定義すると，式 (11)～(13) より x_n^{CGS}，y_n，x_n は下記の漸化式から得られる．

$$y_n = x_n + \alpha_n g_n \qquad (19)$$

$$x_{n+1}^{\mathrm{CGS}} = x_n^{\mathrm{CGS}} + \alpha_n (e_n^{\mathrm{CGS}} + h_{n+1}^{\mathrm{CGS}}) \qquad (20)$$

$$x_n = \gamma_n x_{n+1}^{\mathrm{CGS}} + (1-\gamma_n) y_n \qquad (21)$$

2.4 パラメータ α_n, β_n の計算

多項式 $Q_n(A)$ の最高次の係数が $(-1)^n \gamma_n \prod_{i=0}^{n-1} \alpha_n$ であるので，次の式が成り立つことが分かる[10)].

$$(r_0^*, r_n) = ((-1)^n \prod_{i=0}^{n-1} \alpha_i)((A^H)^n r_0^*, R_n r_0)$$

$$(r_0^*, A g_n) = ((-1)^n \prod_{i=0}^{n-1} \alpha_i)((A^H)^n r_0^*, A P_n r_0)$$

したがって，式 (5)，(6) を用いると α_n，β_n は次のように計算できる．

$$\alpha_n = \frac{(r_0^*, r_n)}{(r_0^*, A g_n)}, \ \beta_n = \frac{\gamma_n}{\gamma_{n+1}} \frac{(r_0^*, r_{n+1})}{(r_0^*, r_n)} \qquad (22)$$

2.5 パラメータ γ_n の計算

式 (11) 中のパラメータ γ_n の決め方によって様々なアルゴリズムを導出することができるが，ここは，γ_n を残差 $r_{n+1} = Q_n(A) R_n(A) r_0$ のノルムを最小にするように決める．具体的にノルムを $\|r_{n+1}\|^2 = (r_{n+1}, r_{n+1})$ とすると，r_n の漸化式 (11) から γ_n は次のように計算できる．

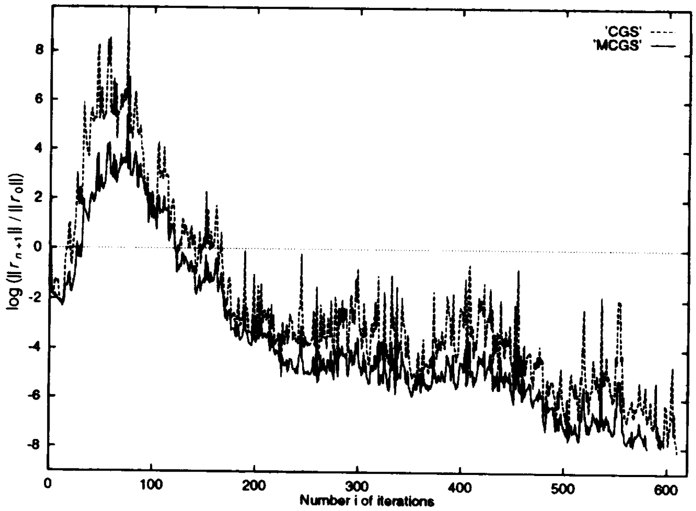


図1 MCGS 法と CGS 法の比較
Fig. 1 Convergence history for MCGS and CGS.

$$\gamma_n = -\frac{(s_n, r_{n+1}^{\mathrm{CGS}} - s_n)}{(r_{n+1}^{\mathrm{CGS}} - s_n, r_{n+1}^{\mathrm{CGS}} - s_n)} \tag{23}$$

新しいアルゴリズムを MCGS 法（Modified Conjugate Gradient Squared method）と呼ぶ.

2.6 MCGS 法のアルゴリズム

式 (11)-(23) から，MCGS 法のアルゴリズムは次のように書くことができる.

(a) 初期値 x_0; $r_0 = b - Ax_0$, $g_0 = e_0 = r_0^{\mathrm{CGS}} = r_0$.

(b) $n = 0, 1, 2, \ldots,$ について

$$\begin{aligned}
\alpha_n &= \frac{(r_0, r_n)}{(r_0, Ag_n)}\\
h_{n+1}^{\mathrm{CGS}} &= e_n^{\mathrm{CGS}} - \alpha_n A p_n^{\mathrm{CGS}}\\
r_{n+1}^{\mathrm{CGS}} &= r_n^{\mathrm{CGS}} - \alpha_n A(e_n^{\mathrm{CGS}} + h_{n+1}^{\mathrm{CGS}})\\
s_n &= r_n - \alpha_n A g_n\\
\gamma_n &= -\frac{(s_n, r_{n+1}^{\mathrm{CGS}} - s_n)}{(r_{n+1}^{\mathrm{CGS}} - s_n, r_{n+1}^{\mathrm{CGS}} - s_n)}\\
r_{n+1} &= \gamma_n r_{n+1}^{\mathrm{CGS}} + (1 - \gamma_n) s_n\\
y_n &= x_n + \alpha_n g_n\\
x_{n+1}^{\mathrm{CGS}} &= x_n^{\mathrm{CGS}} + \alpha_n (e_n^{\mathrm{CGS}} + h_{n+1}^{\mathrm{CGS}})\\
x_{n+1} &= \gamma_n x_{n+1}^{\mathrm{CGS}} + (1 - \gamma_n) y_n\\
\beta_n &= \frac{\gamma_n}{\gamma_{n+1}} \frac{(r_0, r_{n+1})}{(r_0, r_n)}\\
g_{n+1} &= r_{n+1} + \beta_n((1 - \gamma_n) g_n + \gamma_n h_{n+1}^{\mathrm{CGS}})\\
e_{n+1}^{\mathrm{CGS}} &= r_{n+1}^{\mathrm{CGS}} + \beta_n h_{n+1}^{\mathrm{CGS}}\\
p_{n+1}^{\mathrm{CGS}} &= e_{n+1} + \beta_n (h_{n+1} + \beta_n p_n^{\mathrm{CGS}})
\end{aligned}$$

3. MCGS 法と CGS 法の収束性

MCGS 法について，次の定理が成り立つ.

定理1 MCGS 法の収束速度はつねに CGS 法より速い. すなわち，MCGS 法の残差ベクトル（式 (10) の r_n）を r_n^{MCGS} とし，CGS 法の残差ベクトルを r_n^{CGS} とするとき，次の不等式が成り立つ.

$$\|r_n^{\mathrm{MCGS}}\| \le \|r_n^{\mathrm{CGS}}\| \tag{24}$$

証明：$f(\gamma)$ を次のように定義する.

$$f(\gamma) = \|\gamma r_{n+1}^{\mathrm{CGS}} + (1 - \gamma) s_n\| \tag{25}$$

r_n^{MCGS} と γ_n の定義より，$\gamma = \gamma_n$ のとき，$f(\gamma)$ が最小となることから，

$$\|r_{n+1}^{\mathrm{MCGS}}\| = \min_{\gamma} \|f(\gamma)\| \le \|f(1)\| = \|r_{n+1}^{\mathrm{CGS}}\| \quad \Box$$

ただし，1 回の反復に要する演算の中で CGS 法は行列ベクトル積 2 回，MCGS 法は行列ベクトル積 3 回が必要である.

4. 数値実験

数値例として，解析領域 [0,1]×[0,1] において，次の偏微分方程式のディリクレ問題を考える[9].

$$-u_{xx} - u_{yy} + ((au)_x + au_x)/2 = 1 \tag{26}$$

ただし，$a = 35\exp(3.5(x^2 + y^2))$，境界上で $u = 1$ とする. 解析領域の x, y 方向をそれぞれ 201 等分し，中心差分で上の偏微分方程式を離散化した. 係数行列は 40000 次の非対称 5 重対角行列となる. 前処理は不完全 LU 分解を用いて行った[5),6)]. 前処理を行わない場合は両者とも発散する. 計算は，Sun Ultra1 で倍精度演算で行った. 収束条件は $\|r_n\| / \|r_0\| \le 10^{-8}$ とした. 収束特性のグラフにおいて水平方向は反復回数を表し，垂直方向は対数スケールの相対残差ノルムを表す. 図1 から分かるように MCGS 法は CGS 法よりつねに収束が速いことと，2.1 節で予想したように安定性が改善され滑らかであることが確かめられ，理論と一致している.

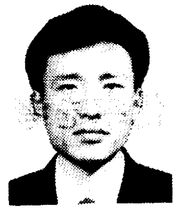
5. おわりに

本研究では，連立一次方程式の積型反復解法として，新しい反復解法 MCGS 法を提案した．理論結果としては MCGS 法がつねに CGS 法より収束するまでの反復回数が少ないことを示し，数値計算でその理論結果を確かめた．今後の課題としては，いろいろな積型反復解法に対して一般的な $Q_n(\lambda)$ の選択法を与え，収束性の優れた方法を提案すること，および，並列計算によって MCGS 法の計算時間を減らすことである．

参考文献

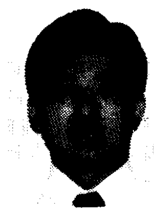
1) Fletcher, R.: Conjugate Gradient Methods for Indefinite Systems, *Lecture Notes in Mathematics 506*, Springer-Verlag, New York, pp.73–89 (1976).
2) Gutknecht, M.H.: Variants of Bi-CGSTAB for Matrices with Complex Spectrum, *SIAM J. Sci. Comput.*, Vol.14, pp.1020–1033 (1993).
3) Lanczos, C.: Solution of Systems of Linear Equation by Minimized Iterations, *J. Res. Nat. Bur. Standards*, Vol.49, pp.33–53 (1952).
4) 村田健郎，名取 亮，唐木幸比古：大型数値シミュレーション，岩波書店 (1990).
5) 森 正武：数値計算プログラミング，岩波書店 (1989).
6) 名取 亮：数値解析とその応用，コロナ社 (1990).
7) Sonneveld, P.: CGS, A Fast Lanczos-Type Solver for Nonsymmetric Linear System, *SIAM J. Sci. Statist. Comput.*, Vol.10, pp.36–52 (1989).
8) Weiss, R.: Properties of Generalized Conjugate Gradient Methods, *Numerical Linear Algebra with Applications*, Vol.1 (1), pp.45–63 (1994).
9) Van der Vorst, H.A.: Bi-CGSTAB: A Fast and Smoothly Converging Variant of Bi-CG for the Solution of Nonsymmetric Linear System, *SIAM J. Sci. Statist. Comput.*, Vol.13, No.2, pp.631–644, (1992)
10) 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.5, No.4, pp.343–360 (1995).

(平成 8 年 5 月 20 日受付)
(平成 8 年 9 月 12 日採録)



金 成海

1962 年生．1983 年 7 月中国吉林大学数学系卒業．1994 年 3 月筑波大学大学院理工学研究科修士課程修了．1994 年 4 月同大学院工学研究科博士課程後期編入，現在に至る．



張 紹良

1962 年生．1983 年 7 月中国吉林大学数学系卒業．1990 年 3 月筑波大学大学院工学研究科博士課程修了，工学博士．(株) 計算流体研究所研究員，名古屋大学工学部助手を経て，1995 年 11 月筑波大学電子・情報工学系講師，現在に至る．大規模行列計算における反復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．

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，情報処理学会，日本物理学会各会員．

櫻井 鉄也（正会員）

1961 年生．1986 年名古屋大学工学研究科博士課程前期課程修了．同大学工学部助手を経て，筑波大学電子・情報工学系助教授，現在に至る．工学博士．非線形方程式の数値解析，有理関数近似法の応用，数学ソフトウエアの研究に従事．情報処理学会会員．

周 偉東

1963 年生．1984 年中国復旦大学数学系力学専攻卒業．1994 年筑波大学工学研究科博士課程修了，工学博士．同年，同大学電子・情報工学系助手．1995 年講師，現在に至る．専攻分野，数値解析，計算流体力学．