

導出過程に着目した前処理付き CGS 法の適切なアルゴリズム

伊藤 祥司^{†1} 杉原 正 顯^{†2}

BiCG 法から CGS 法を導出する手順に基づく、前処理付き CGS 法の適切なアルゴリズムを提案する。本提案アルゴリズムの正当性についての議論と数値実験を用いた検証により、本提案は従来の前処理付き CGS 法よりも優位であることが確認された。本研究成果は、前処理付き CGS 法に限らず、双ランチョス系統の前処理付きアルゴリズム全般に当てはまると期待される。

Proper Algorithm for Preconditioned CGS Method regarding Its Deriving Process

SHOJI ITOH^{†1} and MASAOKI SUGIHARA^{†2}

Proper algorithms for preconditioned CGS (PCGS) are proposed. These algorithms are based on the deriving process of the CGS method from BiCG method. Proposed algorithms are shown their superiority to the conventional PCGS by proving their rationalities and numerical results. This work is expected to be applied not only to the PCGS, but to preconditioned algorithms of bi-Lanczos system.

1. はじめに

非対称な係数行列 (サイズ $n \times n$) を持つ線形方程式

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b} \quad (1)$$

^{†1} 東京大学情報基盤センター

Information Technology Center, The University of Tokyo

^{†2} 東京大学大学院情報理工学系研究科

Graduate School of Information Science and Technology, The University of Tokyo

に対する解法の一つである CGS 法 (Conjugate Gradient Squared method, 自乗共役勾配法)¹⁸⁾ の前処理付きアルゴリズムについて議論する。CGS 法はクリロフ部分空間法の一系統である、双ランチョス (一般化ランチョス) 系統の解法であり、双ランチョス系アルゴリズムは、(1) の双対系 (シャドウ) として

$$A^T \mathbf{x}^\# = \mathbf{b}^\# \quad (2)$$

を構成する考えに基づく解法である。同じくクリロフ部分空間法であるアーノルディ系統の解法と比較して所要メモリ量が少ないことが特徴であり、BiCG 法^{3),14)} から CGS 法、CGS 法から BiCGSTAB 法²¹⁾ をはじめとする様々な解法へと発展してきている。これらのクリロフ部分空間法は、大規模な数値シミュレーションで頻りに用いられる重要な解法群である。

双ランチョス系統に限らず、多くの反復解法では、それらの収束性を向上させるよう前処理付きアルゴリズムを用いる。クリロフ部分空間法の前処理が収束性に及ぼす影響が非常に大きいことは、体系的な評価によっても示されている¹¹⁾。しかし、前処理付きアルゴリズムの設計自体が悪いと、どの前処理演算を併用しても求解には至らないこともある⁷⁾。このような背景からも、前処理付きアルゴリズムを適切に構築することは極めて重要である。したがって、CGS 法の前処理付きアルゴリズムにおける問題点の改善や求解品質の向上は、CGS 法だけの影響に留まらず、双ランチョス系統のアルゴリズム全般に対して同様の影響をもたらす、非常に重要な位置付けの研究である。

本稿では、従来から記述されてきた CGS 法の前処理付きアルゴリズムの問題点を指摘し、アルゴリズムの導出過程に従った数理構造上からも合理的に改善した適切な前処理付き CGS(PCGS: Preconditioned CGS) 法のアルゴリズムを提案する。本稿において、“前処理付きアルゴリズム”、および、“前処理系”とは、前処理演算子 (前処理行列) K を伴い記述された求解アルゴリズム、および、 K に基づく演算子により変換された線形系を指すこととし、“コレスキー分解”や“不完全 LU”などの、いわゆる、“前処理演算”とは異なる。一例として、前処理系においては、元の線形方程式 (1) に対し、

$$A \approx K = K_L K_R \quad (3)$$

の前処理行列を用いて、

$$\tilde{A}\tilde{\mathbf{x}} = \tilde{\mathbf{b}}, \tilde{A} \Rightarrow K_L^{-1} A K_R^{-1}, \tilde{\mathbf{x}} \Rightarrow K_R \mathbf{x}, \tilde{\mathbf{b}} \Rightarrow K_L^{-1} \mathbf{b} \quad (4)$$

と変形することに相当するが、実際には (4) の変形自体は行なわず、(1) に対する求解アルゴリズムに対して、(4) の求解と同等となる変換を施した前処理付きアルゴリズムを用いて求解する。

2. CGS 法と前処理付き BiCG 法の導出過程

本節では、前処理無しの CGS 法の導出の背景と BiCG 法の前処理付きアルゴリズムの導出について述べる。

CGS 法は線形方程式求解のクリロフ部分空間法の双ランチョス系の解法である。双ランチョス系の解法は、対称正定値系に対する CG 法 (Conjugate Gradient method, 共役勾配法) の原理を非対称系に拡張するために双対系を導入し提案された BiCG 法 (Bi-Conjugate Gradient method, 双共役勾配法) に基づいて、様々な提案がなされてきた解法群である。

2.1 BiCG 法のアルゴリズム構成

BiCG 法^{3),14)} では、係数行列 A が非対称である線形方程式 (1) を解くために、その双対系 (2) を導入し、初期残差 $\mathbf{r}_0 = \mathbf{b} - A\mathbf{x}_0$, $\mathbf{r}_0^\# = \mathbf{b}^\# - A^T\mathbf{x}_0^\#$ から、

$$\mathbf{r}_k = R_k(A)\mathbf{r}_0, \quad (5)$$

$$\mathbf{r}_k^\# = R_k(A^T)\mathbf{r}_0^\# \quad (6)$$

の双直交系を構成する解法である。本稿の中では、次式のように (1) と (2) を一括して表現し、BiCG 法について議論する^{2),17)}。

$$\check{A}\check{\mathbf{x}} = \check{\mathbf{b}}, \quad \check{A} = \begin{bmatrix} A & O \\ O & A^T \end{bmatrix}, \quad \check{\mathbf{x}} = \begin{bmatrix} \mathbf{x} \\ \mathbf{x}^\# \end{bmatrix}, \quad \check{\mathbf{b}} = \begin{bmatrix} \mathbf{b} \\ \mathbf{b}^\# \end{bmatrix}. \quad (7)$$

さらに、

$$\check{H} = \begin{bmatrix} O & I \\ I & O \end{bmatrix}, \quad \check{\mathbf{u}} = \begin{bmatrix} \mathbf{u} \\ \mathbf{u}^\# \end{bmatrix}, \quad \check{\mathbf{v}} = \begin{bmatrix} \mathbf{v} \\ \mathbf{v}^\# \end{bmatrix}$$

を定義する。ここで I は $n \times n$ の単位行列であり、 \mathbf{u}, \mathbf{v} , および $\mathbf{u}^\#, \mathbf{v}^\#$ は本小節の説明で用いる任意の n 次ベクトル、および、各々に対応する双対系の n 次ベクトルである。

これらを用い、上述の一括表現の系に対し、次のとおり双一次形式を表すことにする。

$$\langle\langle \check{\mathbf{u}}, \check{\mathbf{v}} \rangle\rangle_{\check{H}} \equiv \langle\langle \check{\mathbf{u}}, \check{H}\check{\mathbf{v}} \rangle\rangle = \langle\langle \check{\mathbf{v}}, \check{H}\check{\mathbf{u}} \rangle\rangle = \langle\langle \check{H}\check{\mathbf{u}}, \check{\mathbf{v}} \rangle\rangle. \quad (8)$$

このとき、 \check{A} は (8) のスカラー積 (演算方法自体は内積と同じであるものの、計量を伴わず、内積の性質は成り立たない^{5),19)}.) に関して、自己随伴 (自己共役) であり、

$$\langle\langle \check{\mathbf{u}}, \check{A}\check{\mathbf{v}} \rangle\rangle_{\check{H}} = \langle\langle \check{\mathbf{u}}, \check{H}\check{A}\check{\mathbf{v}} \rangle\rangle = \langle\langle \check{H}\check{A}\check{\mathbf{u}}, \check{\mathbf{v}} \rangle\rangle = \langle\langle \check{A}\check{\mathbf{u}}, \check{\mathbf{v}} \rangle\rangle_{\check{H}} \quad (9)$$

が成り立つ。ここで、次式のとおり $\check{H}\check{A}$ は対称行列であり、(8) (9) の系は対称性を有する。

$$\check{H}\check{A} = \begin{bmatrix} O & I \\ I & O \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A & O \\ O & A^T \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} O & A^T \\ A & O \end{bmatrix}. \quad (10)$$

以上を用いて、次の“一括表現による BiCG 法”として表わす^{*1)}。

Algorithm 1. 一括表現による BiCG 法:

$\check{\mathbf{x}}_0$, is an initial guess, $\check{\mathbf{r}}_0 = \check{\mathbf{b}} - \check{A}\check{\mathbf{x}}_0$, set $\check{\beta}_{-1} = 0$,

$k = 0, 1, 2, \dots$, until convergence, Do:

$$\begin{aligned} \check{\mathbf{p}}_k &= \check{\mathbf{r}}_k + \check{\beta}_{k-1}\check{\mathbf{p}}_{k-1}, \\ \check{\alpha}_k &= \frac{\langle\langle \check{\mathbf{r}}_k, \check{\mathbf{r}}_k \rangle\rangle_{\check{H}}}{\langle\langle \check{\mathbf{p}}_k, \check{A}\check{\mathbf{p}}_k \rangle\rangle_{\check{H}}}, \end{aligned} \quad (11)$$

$$\begin{aligned} \check{\mathbf{x}}_{k+1} &= \check{\mathbf{x}}_k + \check{\alpha}_k\check{\mathbf{p}}_k, \\ \check{\mathbf{r}}_{k+1} &= \check{\mathbf{r}}_k - \check{\alpha}_k\check{A}\check{\mathbf{p}}_k, \\ \check{\beta}_k &= \frac{\langle\langle \check{\mathbf{r}}_{k+1}, \check{\mathbf{r}}_{k+1} \rangle\rangle_{\check{H}}}{\langle\langle \check{\mathbf{r}}_k, \check{\mathbf{r}}_k \rangle\rangle_{\check{H}}}, \end{aligned} \quad (12)$$

End Do

Alg. 1 中の $\check{\alpha}_k$ と $\check{\beta}_k$ の演算を取り出し、BiCG 法への変換を進める。(11) について、

$$\check{\alpha}_k = \frac{\langle\langle \check{\mathbf{r}}_k, \check{\mathbf{r}}_k \rangle\rangle_{\check{H}}}{\langle\langle \check{\mathbf{p}}_k, \check{A}\check{\mathbf{p}}_k \rangle\rangle_{\check{H}}} = \frac{\langle\langle \check{\mathbf{r}}_k, \check{H}\check{\mathbf{r}}_k \rangle\rangle}{\langle\langle \check{\mathbf{p}}_k, \check{H}\check{A}\check{\mathbf{p}}_k \rangle\rangle} \quad (13)$$

であり、(8)(9) から、 $\check{\alpha}_k$ の分子・分母は対称性を有する。ここで、

$$\check{\mathbf{r}} = \begin{bmatrix} \mathbf{r} \\ \mathbf{r}^\# \end{bmatrix}, \quad \check{\mathbf{p}} = \begin{bmatrix} \mathbf{p} \\ \mathbf{p}^\# \end{bmatrix}.$$

(13) の分母と分子については、各々、

*1 本稿では収束判定の議論は扱わないので、その記述は省略する。収束判定に関する議論は文献 1), 8) などがある。特に文献 8) の研究から派生して、文献 6), 7) などは、本稿の議論に至った先行研究でもある。

$$\begin{aligned} \langle \langle \check{\mathbf{p}}_k, \check{H} \check{A} \check{\mathbf{p}}_k \rangle \rangle &= \langle \mathbf{p}_k, A^T \mathbf{p}_k^\# \rangle + \langle \mathbf{p}_k^\#, A \mathbf{p}_k \rangle = 2 \langle \mathbf{p}_k^\#, A \mathbf{p}_k \rangle, \\ \langle \langle \check{\mathbf{r}}_k, \check{H} \check{\mathbf{r}}_k \rangle \rangle &= 2 \langle \mathbf{r}_k^\#, \mathbf{r}_k \rangle \end{aligned} \quad (14)$$

である。(14)を用いて $\check{\beta}$ も同様に変換できる。残りのベクトル、 $\check{\mathbf{p}}_k, \check{\mathbf{x}}_{k+1}, \check{\mathbf{r}}_{k+1}$ についても同様に変換できる。これらから、次のBiCG法が得られる。ここで、 α_k と β_k の算出に用いる $\langle \mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle$ はスカラー積^{*1}である。

Algorithm 2. BiCG 法:

\mathbf{x}_0 , is an initial guess, $\mathbf{r}_0 = \mathbf{b} - A\mathbf{x}_0$,

$\mathbf{r}_0^\#$ is an arbitrary vector, such that $\langle \mathbf{r}_0^\#, \mathbf{r}_0 \rangle \neq 0$, e.g., $\mathbf{r}_0^\# = \mathbf{r}_0$,

set $\beta_{-1} = 0$,

$k = 0, 1, 2, \dots$, until convergence, Do:

$$\begin{aligned} \mathbf{p}_k &= \mathbf{r}_k + \beta_{k-1} \mathbf{p}_{k-1}, \quad \mathbf{p}_k^\# = \mathbf{r}_k^\# + \beta_{k-1} \mathbf{p}_{k-1}^\#, \\ \alpha_k &= \frac{\langle \mathbf{r}_k^\#, \mathbf{r}_k \rangle}{\langle \mathbf{p}_k^\#, A \mathbf{p}_k \rangle}, \\ \mathbf{x}_{k+1} &= \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{p}_k, \\ \mathbf{r}_{k+1} &= \mathbf{r}_k - \alpha_k A \mathbf{p}_k, \quad \mathbf{r}_{k+1}^\# = \mathbf{r}_k^\# - \alpha_k A^T \mathbf{p}_k^\#, \\ \beta_k &= \frac{\langle \mathbf{r}_{k+1}^\#, \mathbf{r}_{k+1} \rangle}{\langle \mathbf{r}_k^\#, \mathbf{r}_k \rangle}, \end{aligned}$$

End Do

2.2 CGS 法の導出

CGS法はBiCG法に現れる A^T の表現を消去するようBiCGの中の変数を変換して得られた解法である¹⁸⁾。その導出過程では、(1)(2)に対する残差ベクトルの多項式表現(5)(6)、および、探索方向ベクトルの多項式表現

$$\mathbf{p}_k = P_k(A) \mathbf{r}_0, \quad (15)$$

$$\mathbf{p}_k^\# = P_k(A^T) \mathbf{r}_0^\# \quad (16)$$

を、BiCG法の α と β に現れるスカラー積に代入すると、

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r}_k^\#, \mathbf{r}_k \rangle &= \langle R_k(A^T) \mathbf{r}_0^\#, R_k(A) \mathbf{r}_0 \rangle = \langle \mathbf{r}_0^\#, R_k^2(A) \mathbf{r}_0 \rangle, \\ \langle \mathbf{p}_k^\#, A \mathbf{p}_k \rangle &= \langle P_k(A^T) \mathbf{r}_0^\#, A P_k(A) \mathbf{r}_0 \rangle = \langle \mathbf{r}_0^\#, A P_k^2(A) \mathbf{r}_0 \rangle. \end{aligned}$$

ここで、

$$\mathbf{r}_k^{\text{CGS}} \equiv R_k^2(A) \mathbf{r}_0, \quad \mathbf{p}_k^{\text{CGS}} \equiv P_k^2(A) \mathbf{r}_0$$

とおくと、

$$\begin{aligned} \alpha_k^{\text{BiCG}} &= \frac{\langle \mathbf{r}_k^\#, \mathbf{r}_k \rangle}{\langle \mathbf{p}_k^\#, A \mathbf{p}_k \rangle} \equiv \frac{\langle \mathbf{r}_0^\#, \mathbf{r}_k^{\text{CGS}} \rangle}{\langle \mathbf{r}_0^\#, A \mathbf{p}_k^{\text{CGS}} \rangle} = \alpha_k^{\text{CGS}}, \\ \beta_k^{\text{BiCG}} &= \frac{\langle \mathbf{r}_{k+1}^\#, \mathbf{r}_{k+1} \rangle}{\langle \mathbf{r}_k^\#, \mathbf{r}_k \rangle} \equiv \frac{\langle \mathbf{r}_0^\#, \mathbf{r}_{k+1}^{\text{CGS}} \rangle}{\langle \mathbf{r}_0^\#, \mathbf{r}_k^{\text{CGS}} \rangle} = \beta_k^{\text{CGS}}. \end{aligned}$$

その他のベクトルも多項式表現、

$$\mathbf{q}_k^{\text{CGS}} \equiv P_k(A) R_{k+1}(A) \mathbf{r}_0, \quad \mathbf{u}_k^{\text{CGS}} \equiv P_k(A) R_k(A) \mathbf{r}_0, \quad \mathbf{r}_k^{\text{CGS}} = \mathbf{b} - A \mathbf{x}_k^{\text{CGS}}$$

を用いて式変形すると、次に表すCGS法が得られる。

Algorithm 3. CGS 法:

\mathbf{x}_0 , is an initial guess, $\mathbf{r}_0 = \mathbf{b} - A\mathbf{x}_0$,

$\mathbf{r}_0^\#$ is an arbitrary vector, such that $\langle \mathbf{r}_0^\#, \mathbf{r}_0 \rangle \neq 0$, e.g., $\mathbf{r}_0^\# = \mathbf{r}_0$,

set $\beta_{-1} = 0$,

$k = 0, 1, 2, \dots$, until convergence, Do:

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_k &= \mathbf{r}_k + \beta_{k-1} \mathbf{q}_{k-1}, \\ \mathbf{p}_k &= \mathbf{u}_k + \beta_{k-1} (\mathbf{q}_{k-1} + \beta_{k-1} \mathbf{p}_{k-1}), \\ \alpha_k &= \frac{\langle \mathbf{r}_0^\#, \mathbf{r}_k \rangle}{\langle \mathbf{r}_0^\#, A \mathbf{p}_k \rangle}, \\ \mathbf{q}_k &= \mathbf{u}_k - \alpha_k A \mathbf{p}_k, \\ \mathbf{x}_{k+1} &= \mathbf{x}_k + \alpha_k (\mathbf{u}_k + \mathbf{q}_k), \\ \mathbf{r}_{k+1} &= \mathbf{r}_k - \alpha_k A (\mathbf{u}_k + \mathbf{q}_k), \\ \beta_k &= \frac{\langle \mathbf{r}_0^\#, \mathbf{r}_{k+1} \rangle}{\langle \mathbf{r}_0^\#, \mathbf{r}_k \rangle}, \end{aligned}$$

End Do

*1 ここで表す $\langle \mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle$ のスカラー積は、特に、双対空間に属する双対性のあるベクトルどうしの積を指す。

上述のとおり，CGS 法は BiCG 法のベクトルに対し多項式を用いて変数変換して導出された解法である．さらに，線形系と双対系とで (5) と (6)，および，(15) と (16) との対応となり，共に同じ多項式に対して A と A^T とを用いているだけである．

2.3 前処理付き BiCG 法の導出

つぎに，(7) の一括表現の系に対する前処理変換により前処理付き BiCG 法を導出する．まず，(3) に対する一括表現の前処理行列は，

$$\check{A} \approx \check{K} = \begin{bmatrix} K & O \\ O & K^T \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} K_L & O \\ O & K_R^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} K_R & O \\ O & K_L^T \end{bmatrix} \equiv \check{K}_L \check{K}_R \quad (17)$$

である．このとき，

$$\begin{aligned} \check{A} \Rightarrow \check{K}_L^{-1} \check{A} \check{K}_R^{-1} &= \begin{bmatrix} K_L^{-1} & O \\ O & K_R^{-T} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A & O \\ O & A^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} K_R^{-1} & O \\ O & K_L^{-T} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} K_L^{-1} A K_R^{-1} & O \\ O & K_R^{-T} A^T K_L^{-T} \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} \check{A} & O \\ O & \check{A}^T \end{bmatrix} \end{aligned}$$

これらを用い，

$$\check{A} \Rightarrow \check{K}_L^{-1} \check{A} \check{K}_R^{-1}, \quad \check{x} \Rightarrow \check{K}_R \check{x}, \quad \check{p} \Rightarrow \check{K}_R \check{p}, \quad \check{r} \Rightarrow \check{K}_L^{-1} \check{r} \quad (18)$$

と変換すれば良い．このとき，(11) で示した一括表現による BiCG 法の $\check{\alpha}$ に対して前処理変換を施したものは，

$$\check{\alpha}_k = \frac{\langle \langle \check{r}_k, \check{r}_k \rangle \rangle_{\check{H}}}{\langle \langle \check{p}_k, \check{A} \check{p}_k \rangle \rangle_{\check{H}}} = \frac{\langle \langle \check{K}_L^{-1} \check{r}_k, \check{K}_L^{-1} \check{r}_k \rangle \rangle_{\check{H}}}{\langle \langle \check{K}_R \check{p}_k, \check{K}_L^{-1} \check{A} \check{K}_R^{-1} \check{K}_R \check{p}_k \rangle \rangle_{\check{H}}} \quad (19)$$

(19) の分母は，

$$\begin{aligned} &\langle \langle \check{K}_R \check{p}_k, \check{K}_L^{-1} \check{A} \check{K}_R^{-1} \check{K}_R \check{p}_k \rangle \rangle_{\check{H}} = \langle \langle \check{p}_k, \check{K}_R^T \check{H} \check{K}_L^{-1} \check{A} \check{p}_k \rangle \rangle \\ &= \left\langle \left\langle \check{p}_k, \begin{bmatrix} K_R^T & O \\ O & K_L \end{bmatrix} \begin{bmatrix} O & K_R^{-T} \\ K_L^{-1} & O \end{bmatrix} \check{A} \check{p}_k \right\rangle \right\rangle \\ &= \langle \langle \check{p}_k, \check{H} \check{A} \check{p}_k \rangle \rangle = \langle \langle \check{H} \check{p}_k, \check{A} \check{p}_k \rangle \rangle = \langle \langle \mathbf{p}_k^\sharp, A \mathbf{p}_k \rangle \rangle + \langle \langle \mathbf{p}_k, A^T \mathbf{p}_k^\sharp \rangle \rangle = 2 \langle \langle \mathbf{p}_k^\sharp, A \mathbf{p}_k \rangle \rangle \end{aligned}$$

この途中で現れるスカラー積では，(10) から，

$$\langle \langle \check{p}_k, \check{H} \check{A} \check{p}_k \rangle \rangle = \langle \langle \check{H} \check{A} \check{p}_k, \check{p}_k \rangle \rangle$$

が成り立ち，この分母のスカラー積に関して自己随伴である．

(19) の分子は，

$$\begin{aligned} &\langle \langle \check{K}_L^{-1} \check{r}_k, \check{K}_L^{-1} \check{r}_k \rangle \rangle_{\check{H}} = \langle \langle \check{r}_k, \check{K}_L^{-T} \check{H} \check{K}_L^{-1} \check{r}_k \rangle \rangle \\ &= \left\langle \left\langle \check{r}_k, \begin{bmatrix} K_L^{-T} & O \\ O & K_R^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} O & K_R^{-T} \\ K_L^{-1} & O \end{bmatrix} \check{r}_k \right\rangle \right\rangle = \left\langle \left\langle \check{r}_k, \begin{bmatrix} O & K^{-T} \\ K^{-1} & O \end{bmatrix} \check{r}_k \right\rangle \right\rangle \\ &= \langle \langle \check{r}_k, \check{H} \check{K}^{-1} \check{r}_k \rangle \rangle = \langle \langle \check{H} \check{r}_k, \check{K}^{-1} \check{r}_k \rangle \rangle \\ &= \langle \langle \mathbf{r}_k^\sharp, K^{-1} \mathbf{r}_k \rangle \rangle + \langle \langle \mathbf{r}_k, K^{-T} \mathbf{r}_k^\sharp \rangle \rangle = 2 \langle \langle \mathbf{r}_k^\sharp, K^{-1} \mathbf{r}_k \rangle \rangle \end{aligned}$$

この途中で現れる式についても $\check{H} \check{K}^{-1}$ が対称行列であるので，

$$\langle \langle \check{r}_k, \check{H} \check{K}^{-1} \check{r}_k \rangle \rangle = \langle \langle \check{H} \check{K}^{-1} \check{r}_k, \check{r}_k \rangle \rangle \cdot$$

(19) の分子のスカラー積に関して自己随伴である． $\check{\beta}_k$ も $\check{\alpha}$ の分子の変換と同様である．

以上から， $\check{\alpha}_k$ ， $\check{\beta}_k$ に現れるスカラー積は，前処理変換された系に対しても対称性を有することが分かる．

最終的な前処理付き BiCG 法の導出では， $\check{\alpha}_k$ ， $\check{\beta}_k$ 以外のベクトルについても同様に変換し，一旦，一括表現した上で，前処理付き BiCG 法を導出すれば良い．

3. 前処理付き CGS 法の適正化

本節では，まず，従来の前処理変換に基づく前処理付き CGS 法（従来版 PCGS 法）を示し，そこでの問題点を指摘した上で，改善した適切な前処理付き CGS 法（改善版 PCGS 法）のアルゴリズムを提案する．

本稿で議論する解法と前処理付きアルゴリズムの論理構造を図 1 としてまとめた．従来の前処理付き CGS 法では，「導出 1」→「前処理変換 2」の手順で導出しているが，ここで得られる従来版 PCGS 法とは，「前処理変換 2」における初期シャドウ残差ベクトルに対する前処理変換の自由度のため，「導出 1」で議論された数値構造を反映しないアルゴリズムである (3.1 節)．一方，本提案では，「前処理変換 1」で得られた前処理付き BiCG (PBiCG) 法を基にし，CGS 法の「導出 1」の議論を当てはめて改善版 PCGS 法を導出する (3.2 節)．

3.1 CGS 法に対する従来の前処理付きアルゴリズムとその問題点

従来の前処理付き CGS 法^{1),4),18)} では，前節で示した CGS 法に対し，

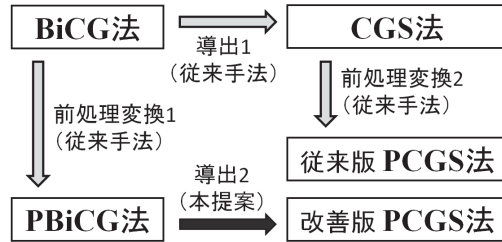


図1 BiCG法とCGS法, および, 各々の前処理付きアルゴリズムとの関係.

$$(K_L^{-1}AK_R^{-1})(K_R\mathbf{x}) = K_L^{-1}\mathbf{b},$$

$$\tilde{\mathbf{u}} \Rightarrow K_L^{-1}\mathbf{u}, \tilde{\mathbf{p}} \Rightarrow K_L^{-1}\mathbf{p}, \tilde{\mathbf{q}} \Rightarrow K_L^{-1}\mathbf{q}, \tilde{\mathbf{r}} \Rightarrow K_L^{-1}\mathbf{r}, \tilde{\mathbf{r}}_0^\# \Rightarrow K_L^T\mathbf{r}_0^\#$$

(20) と変換を施し, 次のアルゴリズムとして表される (図1の「従来版 PCGS 法」).

Algorithm 4. 従来の前処理付き CGS 法:

\mathbf{x}_0 , is an initial guess, $\mathbf{r}_0 = \mathbf{b} - A\mathbf{x}_0$,
 $\mathbf{r}_0^\#$ is an arbitrary vector, such that $\langle K_L^T\mathbf{r}_0^\#, K_L^{-1}\mathbf{r}_0 \rangle \neq 0$, e.g., $\mathbf{r}_0^\# = \mathbf{r}_0$,
 set $\beta_{-1} = 0$,
 $k = 0, 1, 2, \dots$, until convergence, Do:

$$\mathbf{u}_k = \mathbf{r}_k + \beta_{k-1}\mathbf{q}_{k-1},$$

$$\mathbf{p}_k = \mathbf{u}_k + \beta_{k-1}(\mathbf{q}_{k-1} + \beta_{k-1}\mathbf{p}_{k-1}),$$

$$\alpha_k = \frac{\langle \mathbf{r}_0^\#, \mathbf{r}_k \rangle}{\langle \mathbf{r}_0^\#, AK^{-1}\mathbf{p}_k \rangle},$$

(21)

$$\mathbf{q}_k = \mathbf{u}_k - \alpha_k AK^{-1}\mathbf{p}_k,$$

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k K^{-1}(\mathbf{u}_k + \mathbf{q}_k),$$

$$\mathbf{r}_{k+1} = \mathbf{r}_k - \alpha_k AK^{-1}(\mathbf{u}_k + \mathbf{q}_k),$$

$$\beta_k = \frac{\langle \mathbf{r}_0^\#, \mathbf{r}_{k+1} \rangle}{\langle \mathbf{r}_0^\#, \mathbf{r}_k \rangle},$$

(22)

End Do

このアルゴリズムは, 従来から世界的な標準として用いられてきている前処理付きアルゴ

リズムである. これは, Van der Vorst, H. A. が BiCGSTAB 法を提案した文献 (21) の中での記述であり, Sonneveld, P. が CGS 法を提案した際の文献中の前処理付き CGS 法¹⁸⁾を基にして, 更に変形したものである^{*1}. (20) における $K_L^{-1}\mathbf{r}$, $K_L^T\mathbf{r}_0^\#$ の前処理変換のため, アルゴリズム中の (21)(22) の $\langle \mathbf{r}_0^\#, \mathbf{r}_k \rangle$ には K^{-1} が現われ無い.

ところで, 双対系 (2) の前処理変換を考えてみる. (3) による前処理行列 $K = K_L K_R$ に基づき, (2) を前処理変換すると,

$$\tilde{A}^T \tilde{\mathbf{x}}^\# = \tilde{\mathbf{b}}^\#, K_R^{-T} A^T K_L^{-T} \equiv \tilde{A}^T, K_L^T \mathbf{x}^\# \equiv \tilde{\mathbf{x}}^\#, K_R^{-T} \mathbf{b}^\# \equiv \tilde{\mathbf{b}}^\#$$

(23)

このときシャドウ残差ベクトルは,

$$K_R^{-T} \mathbf{r}^\# = K_R^{-T} \mathbf{b}^\# - (K_R^{-T} A^T K_L^{-T}) (K_L^T \mathbf{x}^\#).$$

(24)

したがって, 初期シャドウ残差ベクトルに対する前処理変換も,

$$\tilde{\mathbf{r}}_0^\# \Rightarrow K_R^{-T} \mathbf{r}_0^\#$$

(25)

となるはずである. ところが, 従来の前処理付きアルゴリズムの変換では, (20) のとおり,

$$\tilde{\mathbf{r}}_0^\# \Rightarrow K_L^T \mathbf{r}_0^\#$$

(26)

の変換に基づいている. つまり, 従来の前処理変換に基づくアルゴリズムでは, \tilde{A}^T に基づく双対系を構成していないとも考えられる.

従来の前処理変換に基づく $\tilde{\mathbf{r}}_0 \Rightarrow K_L^{-1}\mathbf{r}_0$, $\tilde{\mathbf{r}}_0^\# \Rightarrow K_L^T\mathbf{r}_0^\#$ としているので, 一括表現における前処理行列は,

$$\check{A} \approx \check{K} = \begin{bmatrix} K & O \\ O & K^T \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} K_L & O \\ O & K_L^{-T} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} K_R & O \\ O & K_L^T K^T \end{bmatrix} \equiv \check{M}_L \check{M}_R$$

(27)

である.

ここで, 2.3 節と同じく, 上記の前処理変換を BiCG 法に適用したときの対称性について議論してみる. (27) を (19) の $\tilde{\alpha}_k$ の変換に当てはめると, 分母は,

*1 ここでオリジナルの文献 (18) の記述に従わず, あらためて文献 (21) と表された主な理由として, 文献 (18) の記述では, 前処理変換次第でアルゴリズム中の残差ベクトルが本来の情報とは異なるものになっており, 好ましくないアルゴリズムと考えられる. 文献 (21) では前処理変換により情報を変えない前処理付きアルゴリズムとなっている. このような前処理系の議論として, 文献 (7), (10) などを参照.

$$\begin{aligned} & \langle \langle \check{M}_R \check{\mathbf{p}}_k, \check{M}_L^{-1} \check{A} \check{M}_R^{-1} \check{M}_R \check{\mathbf{p}}_k \rangle \rangle_{\check{H}} = \langle \langle \check{\mathbf{p}}_k, \check{M}_R^T \check{H} \check{M}_L^{-1} \check{A} \check{\mathbf{p}}_k \rangle \rangle \\ & = \left\langle \left\langle \check{\mathbf{p}}_k, \begin{bmatrix} K_R^T & O \\ O & K K_L \end{bmatrix} \begin{bmatrix} O & K_L^T \\ K_L^{-1} & O \end{bmatrix} \check{A} \check{\mathbf{p}}_k \right\rangle \right\rangle \\ & = \left\langle \left\langle \check{\mathbf{p}}_k, \begin{bmatrix} O & K^T \\ K & O \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A & O \\ O & A^T \end{bmatrix} \check{\mathbf{p}}_k \right\rangle \right\rangle = \left\langle \left\langle \check{\mathbf{p}}_k, \begin{bmatrix} O & K^T A^T \\ K A & O \end{bmatrix} \check{\mathbf{p}}_k \right\rangle \right\rangle \end{aligned}$$

であり、対称性は無い。(19)の分子についても同様に、

$$\begin{aligned} & \langle \langle \check{M}_L^{-1} \check{\mathbf{r}}_k, \check{M}_L^{-1} \check{\mathbf{r}}_k \rangle \rangle_{\check{H}} = \langle \langle \check{\mathbf{r}}_k, \check{M}_L^{-1} \check{H} \check{M}_L^{-1} \check{\mathbf{r}}_k \rangle \rangle \\ & = \left\langle \left\langle \check{\mathbf{r}}_k, \begin{bmatrix} K_L^{-1} & O \\ O & K_L^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} O & K_L^T \\ K_L^{-1} & O \end{bmatrix} \check{\mathbf{r}}_k \right\rangle \right\rangle \\ & = \left\langle \left\langle \check{\mathbf{r}}_k, \begin{bmatrix} O & K_L^{-1} K_L^T \\ K_L^T K_L^{-1} & O \end{bmatrix} \check{\mathbf{r}}_k \right\rangle \right\rangle \end{aligned}$$

であり、こちらも対称性は無い。

次小節にて、この問題点を改善するよう前処理付き CGS 法を導出した新しいアルゴリズムを提案する。

3.2 前処理付き BiCG 法を基にした CGS 法の導出

本研究では、BiCG 法から CGS 法を導出した手順にならない、前処理付き BiCG (PBiCG) 法に対して、CGS 法の導出手順を適用し、前処理付き CGS (PCGS) 法を導出する。

(5) (15) に対して、前処理変換した残差ベクトル $\tilde{\mathbf{r}}_k$ と探索方向ベクトル $\tilde{\mathbf{p}}_k$ では、次の多項式表現を用いる。

$$\tilde{\mathbf{r}}_k = R_k(\tilde{A})\tilde{\mathbf{r}}_0 = R_k(K_L^{-1}AK_R^{-1})\tilde{\mathbf{r}}_0, \quad (28)$$

$$\tilde{\mathbf{p}}_k = P_k(\tilde{A})\tilde{\mathbf{r}}_0 = P_k(K_L^{-1}AK_R^{-1})\tilde{\mathbf{r}}_0. \quad (29)$$

双対系に対しては、(6) (16) から、

$$\tilde{\mathbf{r}}_k^\sharp = R_k(\tilde{A}^T)\tilde{\mathbf{r}}_0^\sharp = R_k(K_R^{-T}A^TK_L^{-T})\tilde{\mathbf{r}}_0^\sharp \equiv R_k^T(\tilde{A})\tilde{\mathbf{r}}_0^\sharp, \quad (30)$$

$$\tilde{\mathbf{p}}_k^\sharp = P_k(\tilde{A}^T)\tilde{\mathbf{r}}_0^\sharp = P_k(K_R^{-T}A^TK_L^{-T})\tilde{\mathbf{r}}_0^\sharp \equiv P_k^T(\tilde{A})\tilde{\mathbf{r}}_0^\sharp. \quad (31)$$

これらを、PBiCG 法の α_k と β_k に現れるスカラー積に代入すると、

$$\begin{aligned} \langle \tilde{\mathbf{r}}_k^\sharp, \tilde{\mathbf{r}}_k \rangle &= \langle R_k^T(\tilde{A})\tilde{\mathbf{r}}_0^\sharp, R_k(\tilde{A})\tilde{\mathbf{r}}_0 \rangle = \langle \tilde{\mathbf{r}}_0^\sharp, R_k^2(\tilde{A})\tilde{\mathbf{r}}_0 \rangle, \\ \langle \tilde{\mathbf{p}}_k^\sharp, \tilde{A}\tilde{\mathbf{p}}_k \rangle &= \langle P_k^T(\tilde{A})\tilde{\mathbf{r}}_0^\sharp, \tilde{A}P_k(\tilde{A})\tilde{\mathbf{r}}_0 \rangle = \langle \tilde{\mathbf{r}}_0^\sharp, \tilde{A}P_k^2(\tilde{A})\tilde{\mathbf{r}}_0 \rangle. \end{aligned}$$

ここで、

$$\tilde{\mathbf{r}}_0^\sharp \Rightarrow K_R^{-T}\mathbf{r}_0^\sharp, \quad K_L^{-1}\mathbf{r}_k^{\text{CGS}} = R_k^2(\tilde{A})\tilde{\mathbf{r}}_0, \quad K_R\mathbf{p}_k^{\text{CGS}} = P_k^2(\tilde{A})\tilde{\mathbf{r}}_0$$

とおくと、

$$\alpha_k^{\text{PBiCG}} = \frac{\langle \tilde{\mathbf{r}}_k^\sharp, \tilde{\mathbf{r}}_k \rangle}{\langle \tilde{\mathbf{p}}_k^\sharp, \tilde{A}\tilde{\mathbf{p}}_k \rangle} \equiv \frac{\langle K_R^{-T}\mathbf{r}_0^\sharp, K_L^{-1}\mathbf{r}_k^{\text{CGS}} \rangle}{\langle K_R^{-T}\mathbf{r}_0^\sharp, K_L^{-1}AK_R^{-1}K_R\mathbf{p}_k^{\text{CGS}} \rangle} = \frac{\langle \mathbf{r}_0^\sharp, K^{-1}\mathbf{r}_k^{\text{CGS}} \rangle}{\langle \mathbf{r}_0^\sharp, K^{-1}A\mathbf{p}_k^{\text{CGS}} \rangle} = \alpha_k^{\text{PCGS}},$$

$$\beta_k^{\text{PBiCG}} = \frac{\langle \tilde{\mathbf{r}}_{k+1}^\sharp, \tilde{\mathbf{r}}_{k+1} \rangle}{\langle \tilde{\mathbf{r}}_k^\sharp, \tilde{\mathbf{r}}_k \rangle} \equiv \frac{\langle K_R^{-T}\mathbf{r}_0^\sharp, K_L^{-1}\mathbf{r}_{k+1}^{\text{CGS}} \rangle}{\langle K_R^{-T}\mathbf{r}_0^\sharp, K_L^{-1}\mathbf{r}_k^{\text{CGS}} \rangle} = \frac{\langle \mathbf{r}_0^\sharp, K^{-1}\mathbf{r}_{k+1}^{\text{CGS}} \rangle}{\langle \mathbf{r}_0^\sharp, K^{-1}\mathbf{r}_k^{\text{CGS}} \rangle} = \beta_k^{\text{PCGS}}.$$

その他のベクトルも、前処理変換した多項式変換

$$\begin{aligned} K_R\mathbf{q}_k^{\text{CGS}} &= P_k(\tilde{A})R_{k+1}(\tilde{A})\tilde{\mathbf{r}}_0, \quad K_R\mathbf{u}_k^{\text{CGS}} = P_k(\tilde{A})R_k(\tilde{A})\tilde{\mathbf{r}}_0, \\ K_L^{-1}\mathbf{r}_k^{\text{CGS}} &= \tilde{\mathbf{b}} - \tilde{A}(K_R\mathbf{x}_k^{\text{CGS}}) \end{aligned}$$

を用いて、

$$(K_L^{-1}AK_R^{-1})(K_R\mathbf{x}) = K_L^{-1}\mathbf{b},$$

$$\tilde{\mathbf{u}} \Rightarrow K_R\mathbf{u}, \quad \tilde{\mathbf{p}} \Rightarrow K_R\mathbf{p}, \quad \tilde{\mathbf{q}} \Rightarrow K_R\mathbf{q}, \quad \tilde{\mathbf{r}} \Rightarrow K_L^{-1}\mathbf{r}, \quad \tilde{\mathbf{r}}_0^\sharp \Rightarrow K_R^{-T}\mathbf{r}_0^\sharp \quad (32)$$

と変換した次の前処理付き CGS 法が得られる (図 1 の「改善版 PCGS 法」)。

Algorithm 5. 適切な変換による改善版前処理付き CGS 法:

\mathbf{x}_0 , is an initial guess, $\mathbf{r}_0 = \mathbf{b} - A\mathbf{x}_0$,

\mathbf{r}_0^\sharp is an arbitrary vector, such that $\langle K_R^{-T}\mathbf{r}_0^\sharp, K_L^{-1}\mathbf{r}_0 \rangle \neq 0$, e.g., $\mathbf{r}_0^\sharp = K^{-1}\mathbf{r}_0$,

set $\beta_{-1} = 0$,

$k = 0, 1, 2, \dots$, until convergence, Do:

$$\mathbf{u}_k = K^{-1}\mathbf{r}_k + \beta_{k-1}\mathbf{q}_{k-1},$$

$$\mathbf{p}_k = \mathbf{u}_k + \beta_{k-1}(\mathbf{q}_{k-1} + \beta_{k-1}\mathbf{p}_{k-1}),$$

$$\alpha_k = \frac{\langle \mathbf{r}_0^\sharp, K^{-1}\mathbf{r}_k \rangle}{\langle \mathbf{r}_0^\sharp, K^{-1}A\mathbf{p}_k \rangle},$$

$$\mathbf{q}_k = \mathbf{u}_k - \alpha_k K^{-1}A\mathbf{p}_k,$$

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k(\mathbf{u}_k + \mathbf{q}_k),$$

$$\mathbf{r}_{k+1} = \mathbf{r}_k - \alpha_k A(\mathbf{u}_k + \mathbf{q}_k),$$

$$\beta_k = \frac{\langle \mathbf{r}_0^\#, K^{-1} \mathbf{r}_{k+1} \rangle}{\langle \mathbf{r}_0^\#, K^{-1} \mathbf{r}_k \rangle},$$

End Do

Alg. 5 の $K^{-T} \mathbf{r}_0^\#$ の演算は反復前に 1 回行えば良く、従来版の Alg. 4 に対し、反復部分における演算量の増加は無い。

3.3 従来前処理付き CGS 法自体に対する改善

従来前処理付き CGS 法 Alg. 4 に対して初期シャドウ残差ベクトルのみを適正化し、

$$(K_L^{-1} A K_R^{-1})(K_R \mathbf{x}) = K_L^{-1} \mathbf{b},$$

$$\tilde{\mathbf{u}} \Rightarrow K_L^{-1} \mathbf{u}, \tilde{\mathbf{p}} \Rightarrow K_L^{-1} \mathbf{p}, \tilde{\mathbf{q}} \Rightarrow K_L^{-1} \mathbf{q}, \tilde{\mathbf{r}} \Rightarrow K_L^{-1} \mathbf{r}, \tilde{\mathbf{r}}_0^\# \Rightarrow K_R^{-T} \mathbf{r}_0^\# \quad (33)$$

と変換すると、別の前処理付き CGS 法も得られる (Algorithm 6. 図 1 の「改善版 PCGS 法」の変種). Alg.6 の $K^{-T} \mathbf{r}_0^\#$ の演算は反復前に 1 回行えば良く、従来版の Alg. 4 に対し、反復部分における演算量の増加は無い。

4. 数値実験

これまで議論してきた、CGS 法の初期シャドウ残差ベクトルの前処理変換方法の違いの影響について数値実験により確認する。

線形方程式のテスト問題として、Matrix Market¹⁶⁾ と Tim Davis's collection²⁰⁾ の中から線形方程式向きの行列を用いて求解問題を用意した。右辺項のベクトルは、解ベクトルの全要素を 1.0 とし式 (1) に代入して生成した。求解アルゴリズムは、数値計算ライブラリ Lis (Library of Iterative Solvers for Linear Systems)¹⁵⁾ のバージョン 1.1.2 逐次コードを倍精度で使用し、コンパイルオプションは、Lis の Makefile に記載されている値を用いた。アルゴリズムに与える初期解は、 $\mathbf{x}_0 = \mathbf{0}$ とした。収束判定は、アルゴリズム中の残差ベクトルに対する相対残差ノルムが $\|\mathbf{r}_k\|_2 / \|\mathbf{b}\|_2 \leq 1.0 \times 10^{-12}$ を満たすときとした (\mathbf{r}_k はアルゴリズム中の残差ベクトル、 k は反復回数)。最大反復回数には基本的に行列のサイズを用いたが、問題によっては、収束の振舞いの確認のため、上限を増やしたものもある。これらのテスト条件は、数値計算アルゴリズムに対する典型的な評価方法の内の一つである。

数値実験に用いた計算サーバの環境は、計算サーバ自体は DELL Precision T7400, CPU は Intel Xeon E5420(2.5GHz), メモリサイズは 16GB, OS は Cent OS(Kernel 2.6.18), コンパイラは Intel icc 10.1, ifort 10.1 である。

ここでは、前処理は ILU(0) のみを用い CGS 法で各問題を求解した結果は、表 1 のとおりである。N は問題サイズ、NNZ は非零要素数、Conventional は Alg.4 で示した従来前処理変換に基づく PCGS 法 (グラフでは赤色)、Proper1 は Alg.5 で示した本提案の前処理変換に基づく PCGS 法 (グラフでは緑色)、Proper2 は Alg.6 で示した PCGS 法 (グラフでは青色) である。各々の欄に示した値は、上段が「収束までの所要反復回数」と、() 内が「真の相対残差ベクトルのノルム (数値解を代入したときの残差ベクトルに基づく、相対残差ノルムの \log_{10})」であり、最も少ない所要反復回数を太字で示している。また、参考情報として下段に「求解時間 [sec]」を示したが、本研究での議論は、CGS 法の初期シャドウ残差ベクトルに対する前処理変換の違いに対する収束性の違いに注目した議論が主であるため、計算時間は参考程度の情報である。

表 1, および、図 2 ~ 図 7 の結果をまとめると、以下のとおりである。

jpwh_991 については、従来前処理変換による Alg. 4 ではブレイクダウンし、本提案の変換 (33) に基づくアルゴリズム Alg. 5, Alg. 6 では正常に収束している。これは、CGS 法に限らず、双ランチョス系の前処理付きアルゴリズムで数種類の前処理を用いても同様の結果となることが、体系的性能評価¹¹⁾ などによっても確認されている^{7),9),12),13)}。cryg2500, olm5000 に対し、従来前処理変換では収束せず、本提案の 2 種類とも収束した。fs_760_3, watt_1 では Alg. 4 ~ Alg. 6 全て収束しているものの、Alg. 4 のみ収束の振る舞いが異なる。bfa782, viscoplastic2 については、真の相対残差ベクトルのノルムの値が Alg. 4 のみ異なり、Alg. 5, Alg. 6 の結果に対し著しく劣る。その他の問題では、収束が速いか遅いかという点で若干の差異は見られるものの、ほぼ同様の収束性を示している。

以上から、CGS 法の初期シャドウ残差ベクトルに対する前処理変換の違いの影響が確認できた。

5. まとめ

本論文では、PCGS 法の導出過程について体系的に説明した上で、従来 PCGS 法の問題点について述べ、前処理付き BiCG 法に CGS 法導出手順を適用したアルゴリズム (Proper1) を提案した。更に、従来 PCGS 法のアルゴリズムに対して、初期シャドウ残差ベクトルの前処理変換のみを変更するだけで容易に適正化できる PCGS 法 (Proper2) も提案した。いずれも反復過程における演算量は従来 CGS 法と同じである。以上の 2 種類の PCGS 法の各々の特徴は、次のとおりである：

- Proper1 (Alg. 5) : K^{-T} の演算が不要

表 1 様々なテスト問題に対する数値実験の結果

Matrix	N	NNZ	Conventional (Alg.4)	Proper1 (Alg.5)	Proper2 (Alg.6)
bfwa782	782	7514	93 (-9.36) 1.19e-2	78 (-12.82) 1.04e-2	84 (-12.17) 1.08e-2
Chebyshev4	68121	5377761	18 (-12.90) 2.81e0	32 (-12.85) 4.58e0	23 (-13.28) 3.44e0
cryg2500	2500	12349	No convergence	385 (-8.47) 8.98e-2	412 (-7.84) 8.84e-2
fs_760_3	760	5816	2429 (-11.06) 2.03e-1	1390 (-11.62) 1.20e-1	1554 (-11.54) 1.29e-1
jpwh_991	991	6027	Breakdown	16 (-12.44) 2.75e-3	16 (-12.44) 2.73e-3
memplus	17758	99147	303 (-12.13) 6.92e-1	305 (-12.12) 7.97e-1	327 (-12.30) 7.66e-1
olm5000	5000	19996	No convergence	34 (-12.20) 1.44e-2	33 (-12.21) 1.41e-2
viscoplastic2	32769	381326	812 (-7.55) 6.94e0	844 (-11.80) 7.31e0	886 (-11.81) 7.63e0
watt_1	1856	11360	27 (-13.01) 6.22e-3	35 (-12.11) 8.22e-3	35 (-12.11) 7.91e-3

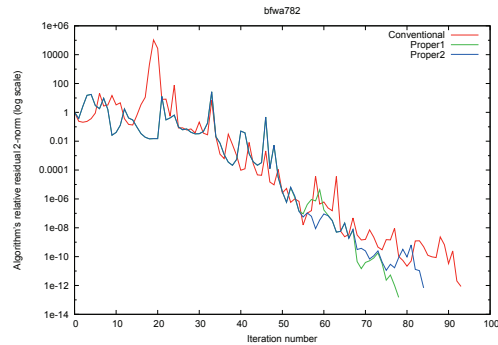


図 2 Convergence history of relative residual 2-norm (bfwa782).

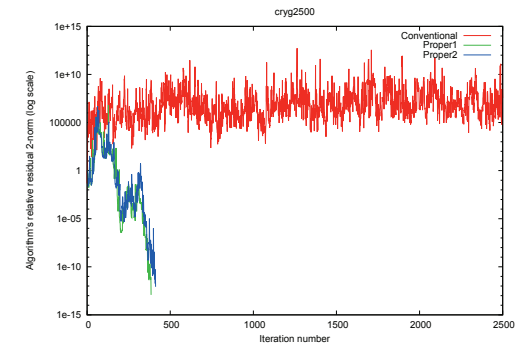


図 3 Convergence history of relative residual 2-norm (cryg2500).

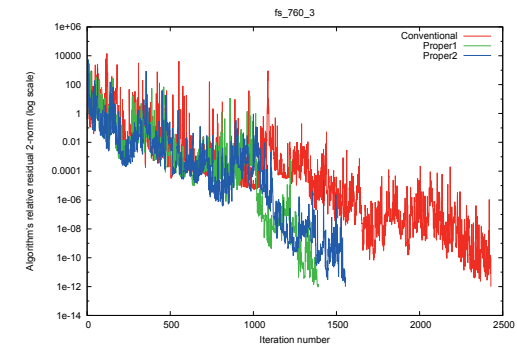


図 4 Convergence history of relative residual 2-norm (fs_760_3).

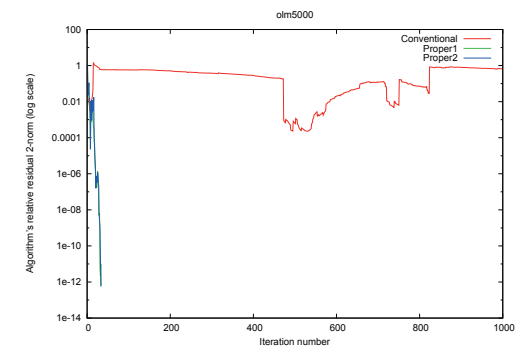


図 5 Convergence history of relative residual 2-norm (olm5000).

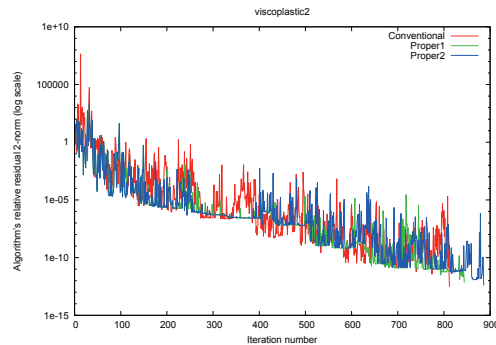


図 6 Convergence history of relative residual 2-norm (viscoplastic2).

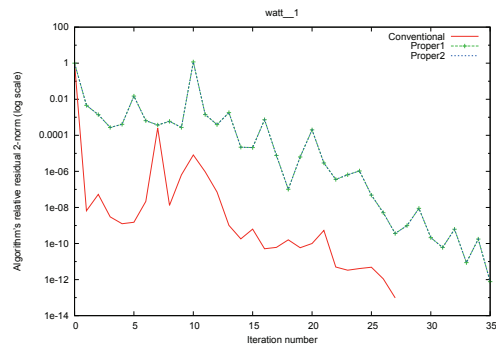


図 7 Convergence history of relative residual 2-norm (watt_1).

• Proper2 (Alg. 6) : K^{-T} の演算が生じるが、従来の PCGS 法からの改変が容易
数値実験による検証で、CGS 法の初期シャドウ残差ベクトルに対する前処理変換の違いの影響が確認され、本提案のアルゴリズムが優位であることも確認された。

しかしながら、本提案の PCGS 法であっても、反復求解中の Breakdown の可能性は残ったままである。これは、BiCG 法や CGS 法自体の特性に起因するものである。したがって、求解問題の性質によっては従来の PCGS 法でのみ求解できる問題もあるであろう。このような場合も想定されるとは言え、双対系に対する前処理変換と CGS 法の導出過程のロジックと照らし合わせても本提案の方が合理的であり、数値実験の結果からも本研究成果の波及効果は大きい。今後の課題として、本提案手法の下でのクリロフ部分空間の構造と双直交性について議論する。

本稿での議論は、求解アルゴリズムの設計や数値計算プログラム作成における品質管理 (QC) や品質保証 (QA) の面などでも重要である¹¹⁾。数理的なモデリングをせずに並列計算やチューニングを施したプログラムを用いた場合、大規模数値シミュレーションを実施するフェーズにおいては、本稿のような問題点の発見は非常に難しく、また、プログラム修正にも膨大な手間と時間を要することになる。

謝辞 本研究は文部科学省「e-サイエンス実現のためのシステム統合・連携ソフトウェアの研究開発」、シームレス高生産・高性能プログラミング環境、および、文部科学省科学研究費補助金基盤研究 (B) (課題番号: 21300007, 21300017) の支援を受けている。

参考文献

- 1) Barrett, R., et al., *Templates for the solution of linear systems: Building Blocks for Iterative Methods*, SIAM, (1994).
- 2) Den Heijer, C., Preconditioned Iterative Methods for Nonsymmetric Linear Systems, *Proc. of the Intern. Conference on Simulation of Semiconductor Devices and Processes.*, pp. 267–285 (1984).
- 3) Fletcher, R., Conjugate Gradient Methods for Indefinite Systems, *Numerical Analysis Dundee 1975*, ed. by Watson, G., Lecture Notes in Mathematics, 506, Springer-Verlag, pp.73–89 (1976).
- 4) 藤野清次, 張 紹良: 反復法の数理, 朝倉書店, (1996).
- 5) 伊理正夫: 岩波講座 応用数学「線形代数 II」, 岩波書店, (1997).
- 6) 伊藤祥司, 杉原正顕: 線形方程式求解に対するクリロフ部分空間法の前処理系に着目した体系的な特性分析, 日本応用数学会 2009 年度年会講演予稿集, 大阪, 9 月 (2009).
- 7) 伊藤祥司, 杉原正顕, 双ランチョス系統の前処理付きアルゴリズムの改善, 第 15 回

計算工学講演会, 九大, 2010.

- 8) 伊藤祥司, 杉原正顕, 姫野龍太郎: クリロフ部分空間法に対する前処理方式と収束判定について, 情報処理学会論文誌: コンピューティングシステム (ACS), Vol.3, No.2, pp.9-19, 2010.
- 9) 伊藤祥司, 杉原正顕, 双ランチョス系アルゴリズムの前処理変換について, 日本応用数学会 2010 年度年会講演予稿集, 東京, 9 月, 2010.
- 10) 伊藤祥司, 杉原正顕, クリロフ部分空間法に対する前処理方向とライブラリ実装における注意点, 日本応用数学会 2010 年度年会講演予稿集, 東京, 9 月, 2010.
- 11) Itoh, S. and Sugihara, M.: Systematic performance evaluation of linear solvers using quality control techniques, *Software Automatic Tuning From Concepts to State-of-the-Art Results* (eds. Naono, K., Teranishi, K., Cavazos, J. and Suda, R.), pp. 135-152, Springer, 2010.
- 12) Itoh, S., Katagiri, T., Sakurai, T., Igai, M., Ohshima, S., Kuroda, H., Naono, K., Nakajima, K., An improvement in preconditioned BiCGStab method, ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム論文集, p.62, 2011 年 1 月.
- 13) 伊藤祥司, 片桐孝洋, 櫻井隆雄, 猪貝光祥, 大島聡史, 黒田久泰, 直野 健, 中島研吾, 前処理付き BiCGStab 法の問題点に対する改良, 第 16 回 計算工学講演会, 東大柏, 2011.
- 14) Lanczos, C., Solution of Systems of Linear Equations by Minimized Iterations, *J. of Res. Nat. Bur. of Standards*, 49, pp.33-53, (1952).
- 15) Lis: <http://www.ssisc.org/lis/>
- 16) Matrix Market: <http://math.nist.gov/MatrixMarket/>
- 17) 名取 亮: BCG 法と CGS 法, 数理解析研究所講究録, 613, pp.135-143, (1987).
- 18) Sonneveld, P.: CGS, A fast Lanczos-type solver for nonsymmetric linear systems, *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, 10(1), pp. 36-52 (1989).
- 19) 杉原正顕, 室田一雄: 線形計算の数理, 岩波書店, (2009).
- 20) Univ. of Florida Sparse Matrix Collection: <http://www.cise.ufl.edu/research/sparse/matrices/>
- 21) Van der Vorst, Henk A.: BI-CGSTAB: A fast and smoothly converging variant of BI-CG for the solution of nonsymmetric linear systems, *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, 13(2), pp. 631-644 (1992).