密行列専用のプレコンディショニングつき 反復法の性能評価

岩里 洸介¹ 藤野 清次² 高橋 康人³

概要: 反復法の行列ベクトル積の計算において、疎行列の非零要素のみを格納し、間接参照によりその計算を行うことが多い。このような CRS 形式は、必要メモリ量が少なくかつ計算量も必要最少限で抑えられることから、疎行列向き格納法の一つであるとされる。一方、密行列に対しては、ごく自然な発想として、全ての要素を格納する 2 次元配列を使用すれば、直接参照による計算時間の短縮が図れる可能性がある。本論文では、密行列専用版として直接参照を用いる反復法を実装し、密行列専用版反復法がどの程度高速化が図れるかを調べることにする。

キーワード: 密行列, 反復法, CRS 形式

Performance evaluation of exclusive version of preconditioned iterative method for dense matrix

Abstract: As well known, only nonzero entries of a sparse matrix are stored in memory in CRS format. In this case, nonzero entries are referred using indirect access, because it requires a small amount of memory and short time of computation. CRS format, however, is inefficient in case of dense matrix because direct access can be done using two-dimensional array. In this article, we implement an exclusive version of iterative methods with two-dimensional array for dense matrix. Through numerical experiments, we examine speedup of computation time of the proposed version.

Keywords: Dense matrix, Iterative method, CRS format

1. はじめに

連立一次方程式 $Ax = b$ を解くことを考える。ここで、 A は非対称の係数行列、 x は解ベクトル、 b は右辺項ベクトルである。係数行列 A が疎であるとき、行列要素は CRS (Compressed Row Storage) 方式などを用いて非零要素のみ格納される。このような手法は間接参照を用いて非零要素のみ計算するため、要求されるメモリ量や計算量が抑えられ、疎行列に対して効率がよいとされる [3]。一方、密行列に対しては間接参照の回数が増加するため、効率が良いとは限らない。自然な考えとして、密行列に対しては

全ての要素を 2 次元配列に格納し、直接参照を用いて計算する方法が挙げられる [3]。

前処理において、係数行列が密行列である場合、行列ベクトル積の計算に要する計算量が増加する [4]。そのため、行列ベクトル積 2 回分の計算量を必要とする ILU(0) 前処理ではなく行列ベクトル積 1 回分とスカラーベクトル積 2 回分の計算量が必要な Eisenstat 版 SSOR 前処理 [11] が密行列に対して有効だと考えられる。

そこで、本論文では密行列専用版 (exclusive version) の解法として行列要素を全て 2 次元配列に格納し、直接参照を用いて計算を行う反復法を実装した。さらに、数値実験を通して、Eisenstat 版 SSOR 前処理付きの従来版と密行列専用版の解法を比較し、密行列専用版の解法の計算時間における高速化の度合いを調査する。

本論文の構成は以下の通りである。第 2 節で、Eisenstat 版 SSOR 前処理について述べる。第 3 節で、行列要素の格納方法について記述し、前進後退代入における実装方法の

¹ 九州大学大学院システム情報科学府
Graduate School of Information Science and Electrical Engineering, Kyushu University

² 九州大学情報基盤研究開発センター
Research Institute for Information Technology, Kyushu University

³ 同志社大学理工学部
Faculty of Science and Engineering, Doshisha University

違いを示す．第4節で，密行列専用版反復法の高速化の度合いを数値実験により調査し，第5節で，まとめを行う．

2. Eisenstat 版 SSOR 前処理

密行列に対して有効な前処理を考える．前処理行列 M を用いて $M^{-1}Ax = M^{-1}b$ と変形させる．ILU(0) などの前処理では，前処理を行うことにより行列ベクトル積の計算 2 回分の計算量が必要となる．一方，Eisenstat 版 SSOR 前処理 (以下，E-SSOR 前処理と表記)[11] で必要な計算量は行列ベクトル積 1 回とスカラーベクトル積 2 回分である．E-SSOR 前処理は ILU(0) 前処理よりも計算量が少ないため，密行列に対して有効であると考えられる [7]．したがって，本論文では E-SSOR 前処理を適用する．

2.1 SSOR 前処理

まず，SSOR 前処理 [2] について述べる．SSOR 前処理では，係数行列を $A = L + D + U$ と分離して得られる行列を用いて，前処理行列 K を

$$K = (L + D/\omega)(D/\omega)^{-1}(U + D/\omega) \quad (1)$$

とする．ここで， ω は緩和係数を意味する．両側前処理後の係数行列を $\tilde{A}$ ，解ベクトルを $\tilde{x}$ ，右辺項を $\tilde{b}$ とすると，

$$\tilde{A} = (L + D/\omega)^{-1}A(U + D/\omega)^{-1}(D/\omega), \quad (2)$$

$$\tilde{x} = (D/\omega)^{-1}(U + D/\omega)x, \quad (3)$$

$$\tilde{b} = (L + D/\omega)^{-1}b \quad (4)$$

である．また，反復 k 回目における前処理後の残差 $r_k := b - Ax_k$ を $\tilde{r}_k$ とすると，

$$\begin{aligned} \tilde{r}_n &= \tilde{b} - \tilde{A}\tilde{x}_n \\ &= (L + D/\omega)^{-1}b - (L + D/\omega)^{-1}A \times \\ &\quad (U + D/\omega)^{-1}(D/\omega)(D/\omega)^{-1}(U + D/\omega)x_n \\ &= (L + D/\omega)^{-1}(b - Ax_n) \\ &= (L + D/\omega)^{-1}r_n \end{aligned} \quad (5)$$

と表される．

2.2 Eisenstat trick

SSOR 前処理は Eisenstat trick と呼ばれる手法を用いて実装することで計算量を削減できる [9]．式 (2) を

$$\begin{aligned} \tilde{A} &= ((U + D/\omega)^{-1} \\ &\quad + (L + D/\omega)^{-1}(I + (1 - 2/\omega)D(U + D/\omega)^{-1}))(D/\omega) \end{aligned} \quad (6)$$

と式変形し，行列ベクトル積 $\tilde{A}v$ を以下の手順で計算する [5][8]．

1. $y = (U + D/\omega)^{-1}(D/\omega)v$,
2. $z = (D/\omega)v + (1 - 2/\omega)Dy$,
3. $w = (L + D/\omega)^{-1}z$,
4. $\tilde{A}v = y + w$.

3. 行列要素の格納方法と前進後退代入演算

3.1 従来の格納方法と前進後退代入演算

非対称疎行列の行列要素の格納方法として CRS (Compressed Row Storage) 方式 [3] が用いられる．プログラム例 1 に CRS 方式における前進代入演算のプログラム例を示す．ここで， n は次元数， $pivot$ は各行の対角項の逆数を取ったものである． $lval$ は下三角行列 L の非零要素の配列， $lrowptr$ は下三角行列 L のポインタ配列， $lcolind$ は下三角行列 L のインデックス配列である． $omega$ は加速係数である． w はベクトルの要素を格納した配列である．

プログラム例 1: CRS 方式における前進代入演算

1. **do** $i = 1, n$
2. $tmp = w(i)$
3. **do** $j = lrowptr(i), lrowptr(i + 1) - 1$
4. $tmp = tmp - lval(j) * w(lcolind(j))$
5. **end do**
6. $w(i) = omega * tmp * pivot(i)$
7. **end do**

プログラム例 2 に CRS 方式を使用した場合の後退代入演算のプログラム例を示す． $uval$ は上三角行列 U の非零要素の配列， $urowptr$ は上三角行列 U のポインタ配列， $ucolind$ は上三角行列 U のインデックス配列である．

プログラム例 2: CRS 方式における後退代入演算

1. **do** $i = n, 1, -1$
2. $tmp = w(i)$
3. **do** $j = urowptr(i), urowptr(i + 1) - 1$
4. $tmp = tmp - uval(j) * w(ucolind(j))$
5. **end do**
6. $u(i) = omega * tmp * pivot(i)$
7. **end do**

プログラム例 1，同例 2 のように，密行列を CRS 方式で格納する場合，4 行目の $w(ucolind(j))$ において間接参照が行われる．まず， $ucolind(j)$ で配列 w の番地を参照してから， w に格納されている値を参照する． w の値を求めるために 2 個の配列を参照するため，計算時間が長くなる．

3.2 密行列専用の格納方法と前進後退代入演算

密行列用に行列要素を 2 次元配列で格納する [6]．2 次元配列では全ての行列要素を格納する．プログラム例 3，同例 4 に 2 次元配列における前進後退代入のプログラム例を示す [3]． mat は行列要素を格納した 2 次元配列である．

プログラム例 3: 2次元配列における前進代入演算

1. do $i = 1, n$
2. $tmp = w(i)$
3. do $j = 1, i - 1$
4. $tmp = tmp - mat(j, i) * w(j)$
5. end do
6. $w(i) = omega * tmp * pivot(i)$
7. end do

プログラム例 4: 2次元配列における後退代入演算

1. do $i = n, 1, -1$
2. $tmp = w(i)$
3. do $j = i + 1, n$
4. $tmp = tmp - mat(j, i) * w(j)$
5. end do
6. $w(i) = omega * tmp * pivot(i)$
7. end do

プログラム例 3, 同例 4 のように, 行列要素を 2 次元配列で格納した場合, 4 行目の配列 w の値を直接参照で求められるため, 密行列に対して反復法の高速化が期待できるが, どの程度改善できるかを知りたい.

4. 数値実験

4.1 電磁界解析で現れたテスト行列

同志社大学理工学部 藤原・高橋研究室より提供された電磁界解析モデルのテスト行列に対する密行列専用版反復法の収束性を調査する. 使用した行列は 2 個で, 共に密行列である. 行列 boxshield (次元数: 4,902) は 2 個のコイルに挟まれた箱の解析モデル, 行列 problem13 (次元数: 16,800) は TEAM (Testing Electromagnetic Analysis Method) Workshop により公開されている検証用の解析モデルである. 図 1 に行列 boxshield, 図 2 に行列 problem13 の解析モデルとメッシュ図と磁束密度分布を示す. ここで, メッシュ図は対称性から図 1 では全体の 1/8, 図 2 では 1/4 のみ表示した.

4.1.1 計算機環境と計算条件

計算機は Dell PowerEdge R210 (戦略名: Sandy Bridge, CPU: Intel Xeon E3-1220, クロック周波数: 3.1GHz, メモリ: 8.2Gbytes, L3 キャッシュメモリ: 8.2Mbytes, OS: Red Hat Linux Enterprise) を使用した. プログラムは Fortran90 を用いて実装し, コンパイラは Intel Fortran Compiler ver.12.1.3 を使用した. 最適化オプションは “-O3” を使用した. 右辺項は物理的条件から得られる値を用いた. 収束判定条件は相対残差の 2 ノルム: $\|r_{k+1}\|_2 / \|r_0\|_2 \leq 10^{-8}$ とした. 初期近似解 x_0 はすべて 0 とした. 前処理は対角スケールと E-SSOR 前処理を使用した. 最大反

図 1 行列 boxshield の解析モデルとメッシュ図と磁束密度分布
 Fig. 1 Analytic model, mesh and distribution of density in case of matrix boxshield.

図 2 行列 problem13 の解析モデルとメッシュ図と磁束密度分布
 Fig. 2 Analytic model, mesh and distribution of density in case of matrix problem13.

復回数は 10000 回とした. 解法は GPBiCG 法 [14], GP-BiCG_variant4 法 (以下 GPBiCG_v4 と表記) [1], BiCGSafe 法 [10], GMRES 法 [12], GBiCGSTAB(s,L) [13] 法の 5 種類を使用した.

4.1.2 実験結果

表 1, 表 2 に行列 boxshield に対する E-SSOR 前処理つき反復法の収束性を示す. 表中の GMRES 法のリスタート係数は 500, 加速係数は 0.1 から 1.0 まで 0.1 刻みで実験を行った. ここで, 0.6 から 0.9 までの実験結果については全ての解法で最短で収束するケースが無かったので, 省略した. GBiCGStab(s,L) 法では s を 4, 8, 10, 12, 14, L を 1, 2 と変化させた. TRR は True Relative Residual の略で常用対数 $\log_{10} (\|b - Ax_{k+1}\|_2 / \|b - Ax_0\|_2)$ の値を意味する. “acc-c.” は accelerated coefficient の略で加速係数を示す. また, “pre-t.” は前処理にかかった時間, “itr-t.” は反復計算にかかった時間, “tot-t.” は前処理と反復計算の合計時

表 1 行列 boxshield に対する E-SSOR 前処理つき反復法の収束性
Table 1 Convergence rate of four E-SSOR preconditioned iterative methods for matrix boxshield.

method	acc-c.	itr.	pre-t. [sec.]	itr-t. [sec.]	tot-t. [sec.]	ratio	TRR
GPBiCG	0.1	125	0.02	4.20	4.22	0.26	-8.0
	0.2	180	0.02	6.03	6.05	0.38	-8.0
	0.3	150	0.02	5.02	5.05	0.31	-7.6
	0.4	205	0.02	6.85	6.87	0.43	-8.5
	0.5	230	0.02	7.68	7.70	0.48	-8.2
	1.0	480	0.02	16.01	16.04	1.00	-8.0
GPBiCG_v4	0.1	105	0.02	3.54	3.56	0.22	-8.5
	0.2	215	0.02	7.19	7.21	0.45	-8.5
	0.3	260	0.02	8.69	8.71	0.54	-8.1
	0.4	170	0.02	5.69	5.71	0.36	-8.1
	0.5	195	0.02	6.54	6.56	0.41	-8.3
	1.0	620	0.02	20.68	20.71	1.29	-8.4
BiCGSafe	0.1	235	0.02	7.86	7.88	0.49	-8.7
	0.2	225	0.02	7.52	7.54	0.47	-8.0
	0.3	230	0.02	7.69	7.71	0.48	-8.2
	0.4	170	0.02	5.69	5.71	0.36	-8.7
	0.5	185	0.02	6.18	6.21	0.39	-8.1
	1.0	720	0.02	23.99	24.01	1.50	-8.1
GMRES	0.1	142	0.02	2.34	2.37	0.15	-8.2
	0.2	137	0.02	2.25	2.27	0.14	-8.2
	0.3	145	0.02	2.39	2.41	0.15	-8.1
	0.4	156	0.02	2.58	2.60	0.16	-8.0
	0.5	174	0.02	2.87	2.89	0.18	-7.9
	1.0	390	0.02	6.61	6.63	0.41	-7.5

間である。ratio は GPBiCG 法の加速係数 1.0 における合計時間を 1 としたときの他の解法の合計時間の比である。

表 1, 表 2 より以下のことがわかる。

- (1) GMRES 法で加速係数が 0.2 のとき、合計時間は 2.27 秒で最も速く収束した。
 - (2) 次に、GPBiCGStab 法が $(s,L)=(10,2)$ で加速係数 0.2 のとき 2.97 秒で収束した。
- 表 3, 表 4 に行列 problem13 に対する E-SSOR 前処理つき反復法の収束性を示す。
- 表 3, 表 4 より以下のことがわかる。
- (1) GMRES 法で加速係数が 0.3 のとき、合計時間は 43.02 秒で最も速く収束した。
 - (2) 次に、BiCGSafe 法が加速係数 0.2 のとき 88.83 秒で収束した。

4.2 積分方程式法によるテスト行列の場合

積分法試験法による解析で得られた解析モデルの行列 2 個で、次元数 11,308, 非零要素数 127,870,864(小規模モデル) と次元数 20,756, 非零要素数 430,811,536(中規模モデル) でどちらも密行列である。

4.2.1 計算機環境と計算条件

計算はすべて倍精度浮動小数点演算で行った。小規模モデルに対しては、計算機は Dell PowerEdge R210 (戦略名: Sandy Bridge, CPU: Intel Xeon E3-1220, クロック

表 2 行列 boxshield に対する E-SSOR 前処理つき GBiCGStab(s,L) 法の収束性

Table 2 Convergence rate of E-SSOR preconditioned GBiCGStab(s,L) method for matrix boxshield.

(a) in case of $s = 4 \sim 10$

s	L	acc-c.	itr.	pre-t. [sec.]	itr-t. [sec.]	tot-t. [sec.]	ratio	TRR
4	1	0.1	max	0.02	-	-	-	60.9
		0.2	225	0.02	4.30	4.32	0.27	-8.1
		0.3	3,010	0.02	57.42	57.44	3.58	-8.1
		0.4	1,575	0.02	30.02	30.04	1.87	-8.0
		0.5	510	0.02	9.74	9.76	0.61	-8.0
		1.0	1,060	0.02	20.23	20.25	1.26	-7.2
4	2	0.1	190	0.02	3.33	3.36	0.21	-6.9
		0.2	180	0.02	3.16	3.18	0.20	-7.8
		0.3	210	0.02	3.68	3.71	0.23	-7.9
		0.4	240	0.02	4.22	4.25	0.27	-7.9
		0.5	260	0.02	4.56	4.58	0.29	-7.8
		1.0	800	0.02	13.98	14.00	0.87	-8.1
8	1	0.1	792	0.02	14.04	14.06	0.88	-5.6
		0.2	243	0.02	4.32	4.34	0.27	-7.1
		0.3	1,719	0.02	30.44	30.46	1.90	-8.0
		0.4	1,035	0.02	18.31	18.33	1.14	-7.5
		0.5	720	0.02	12.76	12.79	0.80	-7.3
		1.0	945	0.02	16.74	16.76	1.05	-7.1
8	2	0.1	198	0.02	3.35	3.37	0.21	-7.4
		0.2	180	0.02	3.05	3.07	0.19	-7.0
		0.3	198	0.02	3.35	3.37	0.21	-7.7
		0.4	216	0.02	3.65	3.68	0.23	-7.1
		0.5	270	0.02	4.56	4.58	0.29	-7.2
		1.0	684	0.02	11.52	11.54	0.72	-7.4
10	1	0.1	209	0.02	3.65	3.68	0.23	-7.0
		0.2	297	0.02	5.19	5.21	0.33	-7.0
		0.3	187	0.02	3.28	3.30	0.21	-7.5
		0.4	528	0.02	9.20	9.22	0.58	-7.4
		0.5	1,507	0.02	26.21	26.23	1.64	-7.5
		1.0	1,111	0.02	19.34	19.36	1.21	-7.7
10	2	0.1	198	0.02	3.31	3.33	0.21	-6.8
		0.2	176	0.02	2.95	2.97	0.19	-6.8
		0.3	198	0.02	3.32	3.34	0.21	-6.7
		0.4	220	0.02	3.69	3.71	0.23	-7.3
		0.5	286	0.02	4.78	4.81	0.30	-6.6
		1.0	682	0.02	11.39	11.41	0.71	-7.2

周波数: 3.1GHz, メモリ: 8.2Gbytes, L3 キャッシュメモリ: 8.2Mbytes, OS: Red Hat Linux Enterprise) を使用した。プログラムは Fortran90 を用いて実装し、コンパイラは Intel Fortran Compiler ver.12.1.3 を使用した。中規模モデルに対しては、計算機は CX400 (CPU: Intel Xeon E5-2690, クロック周波数: 2.7GHz, メモリ: 128Gbytes, キャッシュメモリ: 20Gbytes, OS: Red Hat Linux Enterprise) を使用した。プログラムは Fortran90 を用いて実装し、コンパイラは Fujitsu Fortran Compiler を使用した。最適化オプションは "-O3" を使用した。右辺項は物理的条件から得られる値を用いた。収束判定条件は相対残差の 2 ノルム: $\|r_{k+1}\|_2 / \|r_0\|_2 \leq 10^{-8}$ とした。初期近似解 x_0 はすべて 0 とした。前処理は対角スケーリングと E-SSOR

(b) in case of $s = 12$ and 14

s	L	acc-c.	itr.	pre-t. [sec.]	itr-t. [sec.]	tot-t. [sec.]	ratio	TRR
12	1	0.1	663	0.02	11.37	11.39	0.71	-6.7
		0.2	416	0.02	7.14	7.16	0.45	-7.2
		0.3	416	0.02	7.14	7.16	0.45	-7.2
		0.4	936	0.02	16.03	16.05	1.00	-7.0
		0.5	299	0.02	5.13	5.15	0.32	-7.1
		1.0	923	0.02	15.82	15.84	0.99	-7.8
12	2	0.1	208	0.02	3.45	3.47	0.22	-7.0
		0.2	182	0.02	3.03	3.05	0.19	-6.7
		0.3	182	0.02	3.03	3.05	0.19	-6.6
		0.4	234	0.02	3.88	3.90	0.24	-6.9
		0.5	260	0.02	4.31	4.33	0.27	-7.0
		1.0	676	0.02	11.19	11.21	0.70	-6.5
14	1	0.1	255	0.02	4.34	4.37	0.27	-6.9
		0.2	180	0.02	3.07	3.10	0.19	-7.1
		0.3	210	0.02	3.58	3.60	0.22	-7.4
		0.4	1,035	0.02	17.57	17.59	1.10	-7.0
		0.5	255	0.02	4.34	4.36	0.27	-6.9
		1.0	1,125	0.02	19.09	19.11	1.19	-7.2
14	2	0.1	210	0.02	3.47	3.49	0.22	-6.5
		0.2	180	0.02	2.98	3.00	0.19	-6.0
		0.3	210	0.02	3.47	3.49	0.22	-6.5
		0.4	240	0.02	3.97	3.99	0.25	-6.6
		0.5	270	0.02	4.46	4.49	0.28	-6.8
		1.0	720	0.02	11.85	11.87	0.74	-7.4

表 3 行列 problem13 に対する E-SSOR 前処理つき反復法の収束性

Table 3 Convergence rate of four E-SSOR preconditioned iterative methods for matrix problem13.

method	acc-c.	itr.	pre-t. [sec.]	itr-t. [sec.]	tot-t. [sec.]	ratio	TRR
GPBiCG	0.1	330	1.49	128.73	130.22	0.35	-7.9
	0.2	275	0.25	106.49	106.74	0.28	-6.5
	0.3	385	0.33	149.55	149.87	0.40	-8.3
	0.4	300	0.25	116.41	116.67	0.31	-8.2
	0.5	320	0.25	124.10	124.35	0.33	-8.2
	1.0	975	0.25	377.05	377.30	1.00	-8.0
GPBiCG_v4	0.1	350	0.25	135.56	135.81	0.36	-8.0
	0.2	295	0.26	114.52	114.77	0.30	-8.3
	0.3	245	0.25	95.04	95.29	0.25	-8.1
	0.4	265	0.25	102.86	103.12	0.27	-8.5
	0.5	295	0.25	114.57	114.83	0.30	-8.3
	1.0	675	0.26	262.53	262.79	0.70	-8.1
BiCGSafe	0.1	305	0.25	118.11	118.36	0.31	-8.4
	0.2	230	0.25	88.58	88.83	0.24	-7.7
	0.3	230	0.25	89.22	89.47	0.24	-8.4
	0.4	250	0.25	97.90	98.15	0.26	-8.2
	0.5	270	0.25	104.16	104.42	0.28	-8.3
	1.0	915	0.25	359.08	359.33	0.95	-8.0
GMRES	0.1	229	0.25	43.32	43.57	0.12	-8.0
	0.2	230	0.25	43.55	43.81	0.12	-8.0
	0.3	229	0.25	42.76	43.02	0.11	-8.2
	0.4	241	0.25	45.00	45.25	0.12	-8.1
	0.5	258	0.25	48.25	48.50	0.13	-7.9
	1.0	594	0.25	112.21	112.46	0.30	-7.6

前処理を使用した．最大反復回数は 10000 回とした．

表 4 行列 problem13 に対する E-SSOR 前処理つき GBiCGStab(s,L) 法の収束性

Table 4 Convergence rate of E-SSOR preconditioned GBiCGStab(s,L) method for matrix problem13.

(a) in case of $s = 4 \sim 10$

s	L	acc-c.	itr.	pre-t. [sec.]	itr-t. [sec.]	tot-t. [sec.]	ratio	TRR
4	1	0.1	max	0.320	-	-	-	31.6
		0.2	max	0.683	-	-	-	46.2
		0.3	1,125	0.697	249.11	249.80	0.66	-7.4
		0.4	550	1.222	122.22	123.44	0.33	-7.6
		0.5	790	0.440	174.94	175.38	0.46	-8.0
		1.0	1,795	0.626	398.33	398.96	1.06	-7.9
4	2	0.1	350	0.356	71.03	71.39	0.19	-6.5
		0.2	370	0.402	75.13	75.53	0.20	-7.5
		0.3	390	0.605	80.49	81.10	0.21	-7.6
		0.4	400	0.876	81.42	82.29	0.22	-6.8
		0.5	470	0.663	95.54	96.20	0.25	-8.1
		1.0	1,270	0.388	257.88	258.27	0.68	-7.1
8	1	0.1	max	0.967	-	-	-	16.3
		0.2	468	0.644	96.14	96.78	0.26	-6.8
		0.3	450	0.528	92.67	93.20	0.25	-6.7
		0.4	378	1.554	78.16	79.71	0.21	-6.9
		0.5	837	0.780	172.48	173.26	0.46	-7.1
		1.0	1,260	0.386	258.63	259.01	0.69	-6.3
8	2	0.1	324	0.494	63.81	64.30	0.17	-5.6
		0.2	324	0.411	64.08	64.49	0.17	-6.1
		0.3	360	0.455	71.59	72.04	0.19	-5.9
		0.4	324	0.405	63.50	63.90	0.17	-7.1
		0.5	414	0.510	80.56	81.07	0.21	-6.7
		1.0	1,152	0.413	225.67	226.08	0.60	-6.5
10	1	0.1	341	0.448	68.84	69.29	0.18	-6.6
		0.2	528	0.521	106.53	107.05	0.28	-6.6
		0.3	330	0.731	66.65	67.38	0.18	-6.6
		0.4	440	0.337	88.89	89.23	0.24	-6.9
		0.5	506	0.316	102.15	102.47	0.27	-6.7
		1.0	1,507	0.476	303.83	304.31	0.81	-6.8
10	2	0.1	308	0.424	59.56	59.98	0.16	-5.4
		0.2	330	0.635	63.97	64.60	0.17	-6.2
		0.3	308	0.485	60.68	61.17	0.16	-6.0
		0.4	352	0.455	69.69	70.14	0.19	-6.4
		0.5	396	0.323	76.36	76.68	0.20	-6.6
		1.0	990	0.331	190.70	191.03	0.51	-6.7

4.2.2 実験結果

表 5 に小規模モデルに対する密行列専用版 E-SSOR 前処理付き GMRES(k) 法の収束性を示す．リスタート係数は 2200，加速係数は 0.7 で実験を行った．

表 5 より密行列専用版 E-SSOR 前処理 GMRES(k) 法が従来法より 18% 計算時間が短縮された．

表 6 に中規模モデルに対する密行列専用版 E-SSOR 前処理付き反復法の収束性を示す．ここで，加速係数は 0.6 から 1.0 まで 0.1 刻みで変化させた．表中の ratio は従来版の合計時間を 1 とした時の専用版の合計時間の比である．

図 3 に各解法の従来版と専用版の合計時間比を示す．

図 4 に各解法の従来版と専用版の合計時間を比較した図を示す．

(b) in case of $s=12$ and 14

s	L	acc-c.	itr.	pre-t. [sec.]	itr-t. [sec.]	tot-t. [sec.]	ratio	TRR
12	1	0.1	481	0.53	95.58	96.10	0.25	-6.3
		0.2	299	0.79	59.59	60.38	0.16	-6.0
		0.3	312	0.82	62.16	62.98	0.17	-6.5
		0.4	351	0.55	69.79	70.34	0.19	-6.4
		0.5	559	0.58	111.10	111.68	0.30	-7.3
		1.0	1,625	0.41	321.51	321.91	0.85	-7.2
12	2	0.1	286	0.46	54.88	55.34	0.15	-5.2
		0.2	286	0.34	54.90	55.24	0.15	-5.4
		0.3	338	0.56	64.80	65.36	0.17	-6.1
		0.4	338	0.51	64.82	65.33	0.17	-6.3
		0.5	364	0.53	70.24	70.77	0.19	-6.3
		1.0	1,014	0.37	194.14	194.51	0.52	-6.5
14	1	0.1	330	0.50	65.02	65.52	0.17	-6.9
		0.2	330	0.45	65.14	65.59	0.17	-6.3
		0.3	315	0.48	62.15	62.62	0.17	-6.5
		0.4	375	0.26	75.18	75.44	0.20	-6.7
		0.5	585	0.26	114.77	115.03	0.30	-5.0
		1.0	1,395	0.26	273.53	273.79	0.73	-6.5
14	2	0.1	300	0.57	57.29	57.86	0.15	-5.5
		0.2	300	0.34	57.19	57.53	0.15	-5.0
		0.3	330	0.26	62.79	63.04	0.17	-4.8
		0.4	360	0.26	68.52	68.77	0.18	-4.7
		0.5	360	0.26	68.53	68.78	0.18	-5.7
		1.0	1,050	0.50	199.79	200.29	0.53	-6.4

表 5 小規模モデルに対する密行列専用版 E-SSOR 前処理付き GMRES(k) 法の収束性

Table 5 Convergence rate of exclusive version of E-SSOR preconditioned GMRES(k) method for small size of model.

store format	itr.	itr-t. [sec.]	tot-t. [sec.]	ratio	TRR
CRS format	2,108	283.03	283.44	1.00	-7.8
Exclusive ver.	2,108	204.51	204.64	0.72	-7.8

図 3 各解法の従来版と専用版の合計時間比の比較

Fig. 3 Comparison of the conventional CRS version and exclusive version of iterative methods in view of the ratio of total computation time.

表 6 中規模モデルに対する密行列専用版 E-SSOR 前処理付き反復法の収束性

Table 6 Convergence rate of exclusive version of four E-SSOR preconditioned iterative methods for middle size of model.

method	acc-c.	itr.	pre-t. [sec.]	itr-t. [sec.]	tot-t. [sec.]	ratio	TRR
GPBiCG (CRS)	0.6	180	1.82	225.14	226.96	1.00	-8.2
	0.7	175	1.81	218.87	220.68	1.00	-8.0
	0.8	175	1.78	218.96	220.74	1.00	-8.1
	0.9	195	1.81	243.91	245.72	1.00	-8.7
	1.0	180	1.81	225.02	226.83	1.00	-8.3
GPBiCG (exclu.)	0.6	180	0.43	208.57	209.01	0.92	-8.2
	0.7	175	0.43	202.76	203.20	0.92	-8.0
	0.8	175	0.44	202.77	203.20	0.92	-8.1
	0.9	195	0.44	225.83	226.28	0.92	-8.7
	1.0	180	0.44	208.54	208.97	0.92	-8.3
GPBiCG_v4 (CRS)	0.6	180	1.81	223.19	224.99	1.00	-8.2
	0.7	190	1.78	235.47	237.25	1.00	-8.0
	0.8	185	1.79	229.26	231.05	1.00	-8.3
	0.9	175	1.81	216.84	218.65	1.00	-8.1
	1.0	185	1.81	229.44	231.25	1.00	-8.1
GPBiCG_v4 (exclu.)	0.6	180	0.44	209.07	209.51	0.93	-8.2
	0.7	190	0.43	220.61	221.05	0.93	-8.0
	0.8	185	0.44	214.82	215.26	0.93	-8.3
	0.9	175	0.43	203.39	203.82	0.93	-8.1
	1.0	185	0.44	214.82	215.25	0.93	-8.1
BiCGSafe (CRS)	0.6	180	1.81	222.59	224.41	1.00	-8.0
	0.7	185	1.80	228.67	230.47	1.00	-8.2
	0.8	175	1.79	216.31	218.10	1.00	-8.1
	0.9	185	1.80	228.80	230.60	1.00	-8.2
	1.0	195	1.81	241.01	242.82	1.00	-8.2
BiCGSafe (exclu.)	0.6	180	0.44	208.59	209.02	0.93	-8.0
	0.7	185	0.45	214.29	214.74	0.93	-8.2
	0.8	175	0.44	202.76	203.20	0.93	-8.1
	0.9	185	0.44	214.38	214.82	0.93	-8.2
	1.0	195	0.44	225.97	226.40	0.93	-8.2
GMRES (CRS)	0.6	261	2.84	177.50	180.33	1.00	-8.1
	0.7	252	2.84	171.37	174.22	1.00	-8.0
	0.8	257	2.83	174.32	177.16	1.00	-7.9
	0.9	263	2.84	178.73	181.57	1.00	-7.9
	1.0	278	2.84	188.58	191.41	1.00	-7.8
GMRES (exclu.)	0.6	261	0.44	145.78	146.22	0.81	-8.1
	0.7	252	0.44	140.66	141.11	0.81	-8.0
	0.8	257	0.44	143.39	143.84	0.81	-7.9
	0.9	263	0.44	146.70	147.14	0.81	-7.9
	1.0	278	0.45	155.12	155.57	0.81	-7.8

表 6, 図 3, 図 4 より以下のことがわかる。

- (1) 全ての解法で従来版よりも専用版のほうが計算速度が向上した。
- (2) 特に, GMRES 法では専用版が従来版と比べて 19% 計算時間が短縮された。
- (3) 同様に, GPBiCG 法では専用版が従来版より 7.9% 短縮された。

5. まとめ

本論文では, 密行列に対して行列要素を 2 次元配列で

図 4 各解法の従来版と専用版の合計時間の比較

Fig. 4 Comparison of the conventional CRS version and exclusive version of iterative methods in view of total computation time.

全ての要素を格納する，密行列専用の E-SSOR 前処理付き反復法の高速化の度合いを調査した．数値実験では，密行列専用版 E-SSOR 前処理付きの GMRES 法が最も早く収束した．中規模モデルに対して GMRES 法では密行列専用版の合計時間が従来版より 19%短縮された．一方で，GPBiCG 法では 7.9%短縮された．以上より，GMRES 法が最も高速化され，密行列に対して有効であることが示された．

参考文献

- [1] Abe, K., Sleijpen, Gerard L.G.: Solving linear equations with a stabilized GPBiCG method, Appl. Numer. Math., doi:10.1016/j.apnum.2011.06.10, 2011.
- [2] Axelsson, O. : A generalized SSOR method, BIT, Vol.12, pp.443-467, 1972.
- [3] Barrett, R., Berry, M., et al.: Templates for the Solution of Linear Systems: Building Blocks for Iterative Methods, 長谷川里美, 長谷川秀彦, 藤野清次: 反復法 Templates, 朝倉書店, 1996 .
- [4] Benzi, M.: Preconditioning Techniques for Large Linear Systems: A Survey, Journal of computational Physics, Vol.182, pp.418-477, 2002.
- [5] Chan, T. F., van der Vorst, H. A.: Approximate and Incomplete Factorizations, Parallel Numerical Algorithms, ICASE/LaRC Interdisciplinary Series in Sci. and Eng., Kluwer Academic, Vol.4, pp.167-202, 1997.
- [6] Chen, K: Matrix Preconditioning Techniques and Applications, Cambridge Monographs on Applied and Computational Mathematics, 2005.
- [7] Chen, K.: On a class of preconditioning methods for dense linear systems from boundary elements, SIAM J. Sci. Comput., Vol.20, No.2, pp.684-698, 1998.
- [8] Chen, X., Toh, K. C., Phoon, K. K.: A modified SSOR preconditioner for sparse symmetric indefinite linear systems of equations, Int. J. Numer. Meth. Engng, Vol.65, pp.785-807, 2006.
- [9] Eisenstat, S. C.: Efficient implementation of a class of preconditioned conjugate gradient methods, SIAM J.

- Sci. Stat. Compute., Vol.2, pp.1-4, 1981.
- [10] Fujino, S., Fujiwara, M., Yoshida, M.: A proposal of preconditioned BiCGSafe method with safe convergence, Proc. of The 17th IMACSWorld Congress on Scientific Computation, Appl. Math. Simul., CD-ROM, Paris, France, 2005.
- [11] 村上啓一, 藤野清次: 残余行列の活用による Eisenstat 版前処理付き IDR(s)-R2 法の並列化, 研究室セミナー資料, 2.2011.
- [12] Saad, Y. : Iterative Methods for Sparse Linear Systems 2nd edition, SIAM, Philadelphia, 2003.
- [13] 塚田健, 深堀康紀, 谷尾真明, 杉原正顕: 自動残差修正機能付き GBiCGSTAB(s,L) 法, 数理解析研究所講究録, 第 1733 巻, pp.149-159, 2011.
- [14] Zhang, S.-L. : GPBi-CG: Generalized product-type methods preconditionings based on Bi-CG for solving nonsymmetric linear systems, SIAM J. Sci. Comput., pp.537-551, 1997.