

BiCR法の残差をもとに構築したBiCRSafe法の収束性について

藤野 清次^{†1} 尾上 勇介^{†2}

本論文では、BiCG法の残差ベクトルではなく、BiCR法の残差ベクトルに基づくBiCRSafe法を新しく導出する。さらに、中間ベクトルの変換式の違いおよびパラメータの定義式の違いによるBiCRSafe法の3つの変形版を持つ前処理を導出する。そして、複数の前処理つきBiCRSafe法を、疎行列データベースの問題および実際の電磁場の渦電流解析の問題の求解に適用する。数値実験により、従来の様々な反復法と比べて、提案するBiCRSafe法が収束安全性を有していることを実証する。ここで、収束安全性とは、初期シャドウ残差ベクトル r_0^* の選択に対する収束特性の劣化の鈍さ、および加速ILU(0)分解前処理の加速パラメータ γ の変化に対する収束特性の劣化の鈍さ、を指すものとする。

Convergence of BiCRSafe Method Based on Residual of BiCR Method

SEIJI FUJINO^{†1} and YUSUKE ONOUE^{†2}

In this paper we introduce BiCRSafe method whose residual is based on the residual of BiCR method in place of that of BiCG method. Moreover we introduce also three variants of preconditionings of BiCRSafe method due to difference of definition of auxiliary vectors and parameters α_k and β_k . The effectiveness and safety of convergence of the preconditioned iterative method are studied for both some problems from database of sparse matrices and realistic problems in the electromagnetic field. We reveal that safety of convergence of the preconditioned BiCRSafe method does not depend upon choice of initial shadow residual vector r_0^* and accelerated parameter of ILU(0) decomposition. Our results demonstrate that preconditioned BiCRSafe method is very effective and safety compared with the conventional iterative methods.

1. はじめに

$n \times n$ の正則な疎行列 A を係数行列、 n 次元の右辺ベクトル b と解ベクトル x とする連立1次方程式

$$Ax = b \quad (1)$$

をクリロフ (Krylov) 部分空間法で解くことを考える。一般に、クリロフ部分空間法は、規模の大きな行列を係数行列として持つ連立1次方程式の求解においてよく利用されている。クリロフ部分空間法に属する反復法には多くのものがあるが^{(9), (14)}、本研究では、Bi-Conjugate Gradient (双共役勾配、以下BiCGと略す)法⁽³⁾とBi-Conjugate Residual (双共役残差、BiCRと略す)法⁽¹⁰⁾を取り扱う。すなわち、BiCG法

系統の反復法の算法中のパラメータ α_k, β_k の値を決めるとき、元のBiCG法の残差ベクトル r_k^{BiCG} に基づいて決めるのではなく、BiCR法の残差ベクトル r_k^{BiCR} に基づいて決めることを考える。一般に、これらのBiCG法系統の反復法は積型反復法と呼ばれ、その残差ベクトル r_k は、BiCG法の収束性を加速する加速多項式 $H_k(A)$ とランチョス多項式 $R_k(A)$ との積で定義される⁽¹⁵⁾。

最近、阿部らは文献1)において、CGS (Squared)法の残差ベクトル r_k^{CGS} を、BiCG法の残差ベクトル r_k^{BiCG} からBiCR法の残差ベクトル r_k^{BiCR} に置き換えた新しい反復法：CRS (Conjugate Residual Squared)法を発表した。そして、CRS法が従来のCGS法と比較し収束性が安定であるという特長を有することを明らかにした。

そこで、本論文の目的は、BiCRSafe法の残差ベクトルに対して、BiCG法の残差ベクトル r_k^{BiCG} からBiCR法の残差ベクトル r_k^{BiCR} に置き換えたBiCR-Safe法を導出し、その収束性を検証することである。

†1 九州大学情報基盤開発センター

Research Institute for Information Technology, Kyushu University

†2 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

さらに、BiCRSafe 法では、中間ベクトルの変換式の違いおよびパラメータ α_k, β_k の定義式の違いにより 3 つの変形版を持つ前処理が導けることを示す。さらに、本論文では、「収束安全性」について考察し、初期シャドウ残差ベクトル r_0^* の選択に対する収束特性の劣化の鈍さ（緩やかさ）、および加速 ILU(0) 分解前処理の加速パラメータ γ の変化に対する収束特性の劣化の鈍さ（緩やかさ）、と位置づけ、提案する 3 つの変形版前処理つき BiCRSafe 法がこれらの性質を、できるだけいろいろな応用分野の問題に対して有することを明らかにする。

本論文は次のように構成されている。2 章で、まず積型反復法の概要について記述し、次に、BiCR 法システムの反復法におけるパラメータ α_k, β_k の決定法について記述する。3 章では、BiCRSafe 法の漸化式とパラメータ ζ_k, η_k の決定方法に関する議論およびアルゴリズムの導出を行う。4 章では、BiCRSafe 法の 3 つの変形版を持つ前処理を導出する。5 章では、数値実験を通して、従来の CGS 法¹¹⁾、CRS 法¹⁾、BiCGStab 法¹³⁾、BiCRStab 法¹⁾、GP-BiCG 法¹⁵⁾、GPBiCR 法¹⁾、BiCGSafe 法^{4),5)} と新しい前処理つき BiCRSafe(M-a) 法、BiCRSafe(M-b) 法、BiCRSafe(M-c) 法を比較し、提案する方法の収束安全性を明らかにする。最後に、6 章でまとめを行う。

2. 積型反復法について

2.1 BiCG 法システムの積型反復法の概要

式 (1) で表される連立一次方程式を反復法で解く。一般に、BiCG 法の残差ベクトル r_k^{BiCG} は

$$r_k^{\text{BiCG}} = R_k(A)r_0 \quad (2)$$

と表せる。ここで、残差多項式 $R_k(A)$ は、BiCG 法の 2 つのパラメータ α_k, β_k から定まり、次の 3 項漸化式を満たす。

$$R_0(\lambda) = 1, \quad (3)$$

$$R_1(\lambda) = 1 - \alpha_0\lambda, \quad (4)$$

$$R_{k+1}(\lambda) = \left(1 + \alpha_k \frac{\beta_{k-1}}{\alpha_{k-1}} - \alpha_k\lambda\right) R_n(\lambda) - \alpha_k \frac{\beta_{k-1}}{\alpha_{k-1}} R_{k-1}(\lambda), \quad k = 1, 2, \dots \quad (5)$$

また、BiCG 法に基づく積型反復法では、第 k 回目の反復の残差ベクトル r_k は、BiCG 法の収束性を高める k 次多項式 $H_k(\lambda)$ とランチョス多項式 $R_k(\lambda)$ の積の形で次のように定義される¹¹⁾。

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

ここで、 r_0 は初期残差ベクトルと呼ばれ、初期近似解ベクトル x_0 、右辺ベクトル b を用いて、 $r_0 := b - Ax_0$

と定義される。また、補助多項式 $P_k(\lambda)$ を用いて、ランチョス多項式 $R_k(\lambda)$ は次の交代漸化式を満たす。

$$R_0(\lambda) = 1, \quad P_0(\lambda) = 1, \quad (6)$$

$$R_{k+1}(\lambda) = R_k(\lambda) - \alpha_k\lambda P_k(\lambda), \quad (7)$$

$$P_{k+1}(\lambda) = R_{k+1}(\lambda) + \beta_k P_k(\lambda), \quad k = 0, 1, \dots \quad (8)$$

さらに、パラメータ α_k は、双直交条件 $(r_i, r_j^*) = 0$ ($i > j$) によって求められる。

$$\alpha_k = \frac{(r_k, r_k^*)}{(Ap_k, p_k^*)}. \quad (9)$$

同様に、 β_k は、A-共役条件： $(Ap_i, p_j^*) = 0$ ($i > j$) によって、次のように求められる。

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

2.2 BiCR 法システムの積型反復法のパラメータ

元の BiCR 法の残差ベクトル r_k は

$$r_k = R_k(A)r_0 \quad (11)$$

と表せ、BiCR 法によって生成されるベクトル r_k^* は

$$r_k^* = R_k(A^T)r_0^* \quad (12)$$

と表せる。ここで、 T は行列の転置を表す。一方、BiCR 法のパラメータ β_k は

$$\beta_k = \frac{(Ar_{k+1}, r_{k+1}^*)}{(Ar_k, r_k^*)} \quad (13)$$

と表せる。次に、内積 ρ_k を考える。

$$\begin{aligned} \rho_k &= (AS_k(A)R_k(A)r_0, r_0^*) \\ &= (AR_k(A)r_0, S_k(A^T)r_0^*). \end{aligned} \quad (14)$$

ただし、

$$S_k(A^T) = \sum_{i=0}^k s_k^i (A^T)^i, \quad (15)$$

$$R_k(A) = \sum_{i=0}^k r_k^i (A)^i \quad (16)$$

とおく。ここで、 s_k^i と r_k^i は係数とする。このとき、 $AR_k(A)r_0$ は、 $(A^T)^i r_0$ ($i < k$) と直交するので、内積 ρ_k は次のように表せる。

$$\begin{aligned} \rho_k &= (AR_k(A)r_0, s_k^k (A^T)^k r_0^*) \\ &= (AR_k(A)r_0, \frac{s_k^k}{r_k^k} R_k(A^T)r_0^*) \\ &= \frac{s_k^k}{r_k^k} (AR_k(A)r_0, R_k(A^T)r_0^*). \end{aligned} \quad (17)$$

したがって、BiCR 法システムの反復法の残差ベクトルを、

$$r_k^{\text{PBCR}} := S_k(A)R_k(A)r_0 \quad (18)$$

と定義すると、パラメータ β_k は、

$$\beta_k = \frac{(AR_{k+1}(A)r_0, R_{k+1}(A^T)r_0^*)}{(AR_k(A)r_0, R_k(A^T)r_0^*)}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{T_{k+1}^{k+1} S_k^k \rho_{k+1}}{S_{k+1}^{k+1} r_k^k \rho_k} \\
&= \frac{\alpha_k (Ar_{k+1}^{\text{PBCR}}, \mathbf{r}_0^*)}{\zeta_k (Ar_k^{\text{PBCR}}, \mathbf{r}_0^*)} \quad (19)
\end{aligned}$$

と表せる．一方，BiCR 法のパラメータ α_k は，

$$\alpha_k = \frac{(Ar_k, \mathbf{r}_k^*)}{(Ap_k, A^T \mathbf{p}_k^*)} \quad (20)$$

と表せる．ここで，補助ベクトルを

$$\mathbf{p}_k^{\text{PBCR}} := S_k(A)P_k(A)\mathbf{r}_0 \quad (21)$$

と定義すると，BiCR 法系統の積型反復法のパラメータ α_k の計算式は，

$$\begin{aligned}
\alpha_k &= \frac{(AR_k(A)\mathbf{r}_0, R_k(A^T)\mathbf{r}_0^*)}{(AP_k(A)\mathbf{r}_0, A^T P_k(A^T)\mathbf{r}_0^*)} \\
&= \frac{(AR_k(A)\mathbf{r}_0, S_k(A^T)\mathbf{r}_0^*)}{(AP_k(A)\mathbf{r}_0, A^T S_k(A^T)\mathbf{r}_0^*)} \\
&= \frac{(AR_k(A)S_k(A)\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_0^*)}{(AP_k(A)S_k(A)\mathbf{r}_0, A^T \mathbf{r}_0^*)} \\
&= \frac{(Ar_k^{\text{PBCR}}, \mathbf{r}_0^*)}{(Ap_k^{\text{PBCR}}, A^T \mathbf{r}_0^*)} \quad (22)
\end{aligned}$$

と表せる．

3. BiCRSafe 法の漸化式の導出

まず，前述の 3 項漸化式 (3)–(5) から，2 つのパラメータ ζ_{n-1} と η_{n-1} を使って，以下の 3 項漸化式を満たすように n 次多項式列 $S_n(\lambda)$ を設計する．

$$S_0(\lambda) := 1, \quad (23)$$

$$S_1(\lambda) := (1 - \zeta_0 \lambda)S_0(\lambda), \quad (24)$$

$$S_n(\lambda) := (1 + \eta_{n-1} - \zeta_{n-1} \lambda)S_{n-1}(\lambda) - \eta_{n-1} S_{n-2}(\lambda), \quad n = 2, 3, \dots \quad (25)$$

式 (23)–(25) によって生成された多項式列 $S_n(\lambda)$ はすべて $S_n(0) = 1$ を満足する．したがって，次の式を満足する n 次多項式 $G_n(\lambda)$ が存在する．

$$G_{n-1}(\lambda) := (S_{n-1}(\lambda) - S_n(\lambda))/\lambda.$$

漸化式 (25) を，多項式 $G_n(\lambda)$ を使って書き直すと，多項式列 $S_n(\lambda)$ ， $G_n(\lambda)$ の交代漸化式が生成される．

$$S_0(\lambda) = 1, \quad G_0(\lambda) = \zeta_0, \quad (26)$$

$$S_n(\lambda) = S_{n-1}(\lambda) - \lambda G_{n-1}(\lambda), \quad (27)$$

$$G_n(\lambda) = \zeta_n S_n(\lambda) + \eta_n G_{n-1}(\lambda), \quad (28)$$

$$n = 1, 2, \dots$$

次に，2 つの多項式の積 $S_{k+1}(\lambda)R_{k+1}(\lambda)$ を次のように変形する．ただし，紙面横幅の制約から多項式 $R_k(\lambda)$ ， $S_k(\lambda)$ は R_k ， S_k と各々略記する．

$$S_{k+1}R_{k+1} = S_k R_k - \alpha_k \lambda S_k P_k - \lambda G_k R_{k+1}$$

ここで， $S_k P_k$ ， $G_k R_{k+1}$ は次のように変形される．

$$\begin{aligned}
&S_k P_k \\
&= S_k R_k + \beta_{k-1}(S_{k-1}P_{k-1} - \lambda G_{k-1}P_{k-1}), \\
&G_k R_{k+1} = \zeta_k S_k R_k + \eta_k G_{k-1}R_k - \alpha_k \lambda G_k P_k.
\end{aligned}$$

さらに，次の 4 つの補助ベクトル

$$\mathbf{p}_k := S_k(\lambda)P_k(\lambda)\mathbf{r}_0, \quad (29)$$

$$\mathbf{u}_k := \lambda G_k(\lambda)P_k(\lambda)\mathbf{r}_0, \quad (30)$$

$$\mathbf{z}_k := G_k(\lambda)R_{k+1}(\lambda)\mathbf{r}_0, \quad (31)$$

$$\mathbf{y}_{k+1} := \lambda \mathbf{z}_k. \quad (32)$$

を定義すると，BiCRSafe 法の漸化式が以下のように導かれる．

$$\mathbf{r}_{k+1} = \mathbf{r}_k - \alpha_k A \mathbf{p}_k - A \mathbf{z}_k, \quad (33)$$

$$\mathbf{p}_k = \mathbf{r}_k + \beta_{k-1}(\mathbf{p}_{k-1} - \mathbf{u}_{k-1}), \quad (34)$$

$$\mathbf{u}_k = \zeta_k A \mathbf{p}_k + \eta_k (\mathbf{y}_k + \beta_k \mathbf{u}_{k-1}), \quad (35)$$

$$\mathbf{z}_k = \zeta_k \mathbf{r}_k + \eta_k \mathbf{z}_{k-1} - \alpha_k \mathbf{u}_k, \quad (36)$$

$$\mathbf{y}_{k+1} = \zeta_k A \mathbf{r}_k + \eta_k \mathbf{y}_k - \alpha_k A \mathbf{u}_k. \quad (37)$$

次に，パラメータ ζ_k ， η_k の求め方について述べる．残差ベクトル \mathbf{r}_{k+1} の式 (33) から分かるように，2 つのパラメータ ζ_k ， η_k は使われていない．そこで，新たな補助ベクトル $\mathbf{a}_k \mathbf{r}_k$ ($:= S_{k+1}(\lambda)R_k(\lambda)\mathbf{r}_0$) を導入する．この補助ベクトルを，以下では準残差ベクトルと呼ぶ．このとき，準残差ベクトル $\mathbf{a}_k \mathbf{r}_k$ は

$$\begin{aligned}
S_{k+1}R_k &= (S_k - \lambda G_k)R_k \\
&= S_k R_k - \zeta_k \lambda S_k R_k - \eta_k \lambda G_{k-1}R_k \quad (38)
\end{aligned}$$

と表せ，未確定パラメータ ζ_k ， η_k が含まれる．さらに，式 (38) を一連の補助ベクトルを使って記すと，

$$\mathbf{a}_k \mathbf{r}_k = \mathbf{r}_k - \zeta_k A \mathbf{r}_k - \eta_k \mathbf{y}_k \quad (39)$$

と表せる．BiCRSafe 法では，準残差ベクトル $\mathbf{a}_k \mathbf{r}_k$ のノルムの最小化から，次のように 2 つのパラメータ ζ_k ， η_k の値が決定される．

$$\|\mathbf{a}_k \mathbf{r}_k\|_2 = \min_{\zeta_k, \eta_k} \|\mathbf{r}_k - \zeta_k A \mathbf{r}_k - \eta_k \mathbf{y}_k\|_2. \quad (40)$$

すなわち，パラメータ ζ_k ， η_k の値は，

$$\begin{aligned}
\zeta_k &= \frac{(\mathbf{y}_k, \mathbf{y}_k)(Ar_k, \mathbf{r}_k) - (\mathbf{y}_k, \mathbf{r}_k)(Ar_k, \mathbf{y}_k)}{(Ar_k, Ar_k)(\mathbf{y}_k, \mathbf{y}_k) - (\mathbf{y}_k, Ar_k)(Ar_k, \mathbf{y}_k)}, \\
\eta_k &= \frac{(Ar_k, Ar_k)(\mathbf{y}_k, \mathbf{r}_k) - (\mathbf{y}_k, Ar_k)(Ar_k, \mathbf{r}_k)}{(Ar_k, Ar_k)(\mathbf{y}_k, \mathbf{y}_k) - (\mathbf{y}_k, Ar_k)(Ar_k, \mathbf{y}_k)}
\end{aligned}$$

で求められる．ここでは，行列ベクトルの積 Ar_k の計算が必要になるが，この計算は BiCRSafe 法のアルゴリズムには現れない．そこで， Ap_k の計算については，式 (34) の両辺に行列 A を掛けて漸化式 (式 (42) 参照) で求めれば，行列ベクトルの積の計算は， $A \mathbf{u}_k$ と Ar_k の合計 2 回で済む．以下に，BiCRSafe 法のアルゴリズムを示す．

BiCRSafe 法のアルゴリズム

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

Choose \mathbf{r}_0^* , set $\beta_{-1} = 0$, $\mathbf{q}_0 = A\mathbf{r}_0$

For $k = 0, 1, \dots$, until $\|\mathbf{r}_{k+1}\|_2 \leq \varepsilon \|\mathbf{r}_0\|_2$ Do

$$\mathbf{p}_k = \mathbf{r}_k + \beta_{k-1}(\mathbf{p}_{k-1} - \mathbf{u}_{k-1}) \quad (41)$$

$$A\mathbf{p}_k = A\mathbf{r}_k + \beta_{k-1}(A\mathbf{p}_{k-1} - A\mathbf{u}_{k-1}) \quad (42)$$

$$\alpha_k = \frac{(A\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_0^*)}{(A\mathbf{p}_k, A^T \mathbf{r}_0^*)} \quad (43)$$

$$\zeta_k = \frac{(\mathbf{y}_k, \mathbf{y}_k)(\mathbf{q}_k, \mathbf{r}_k) - (\mathbf{y}_k, \mathbf{r}_k)(\mathbf{q}_k, \mathbf{y}_k)}{(\mathbf{q}_k, \mathbf{q}_k)(\mathbf{y}_k, \mathbf{y}_k) - (\mathbf{y}_k, \mathbf{q}_k)(\mathbf{q}_k, \mathbf{y}_k)} \quad (44)$$

$$\eta_k = \frac{(\mathbf{q}_k, \mathbf{q}_k)(\mathbf{y}_k, \mathbf{r}_k) - (\mathbf{y}_k, \mathbf{q}_k)(\mathbf{q}_k, \mathbf{r}_k)}{(\mathbf{q}_k, \mathbf{q}_k)(\mathbf{y}_k, \mathbf{y}_k) - (\mathbf{y}_k, \mathbf{q}_k)(\mathbf{q}_k, \mathbf{y}_k)} \quad (45)$$

$$\text{(if } k = 0, \text{ then } \zeta_0 = \frac{(\mathbf{q}_0, \mathbf{r}_0)}{(\mathbf{q}_0, \mathbf{q}_0), \eta_0 = 0)$$

$$\mathbf{u}_k = \zeta_k A\mathbf{p}_k + \eta_k(\mathbf{y}_k + \beta_{k-1}\mathbf{u}_{k-1}) \quad (46)$$

$$\mathbf{z}_k = \zeta_k \mathbf{r}_k + \eta_k \mathbf{z}_{k-1} - \alpha_k \mathbf{u}_k \quad (47)$$

$$\mathbf{y}_{k+1} = \zeta_k A\mathbf{r}_k + \eta_k \mathbf{y}_k - \alpha_k A\mathbf{u}_k \quad (48)$$

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{p}_k + \mathbf{z}_k \quad (49)$$

$$\mathbf{r}_{k+1} = \mathbf{r}_k - \alpha_k A\mathbf{p}_k - \mathbf{y}_{k+1} \quad (50)$$

$$\mathbf{q}_{k+1} = A\mathbf{r}_{k+1}$$

$$\beta_k = \frac{\alpha_k (\mathbf{q}_{k+1}, \mathbf{r}_0^*)}{\zeta_k (\mathbf{q}_k, \mathbf{r}_0^*)} \quad (51)$$

End Do

なお、元の BiCGSafe 法の算法は、パラメータ α_k と β_k の式 (43), (51) を次の式に各々置き換えたものである⁴⁾。

$$\alpha_k = \frac{(\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_0^*)}{(A\mathbf{p}_k, \mathbf{r}_0^*)}, \quad (52)$$

$$\beta_k = \frac{\alpha_k}{\zeta_k} \cdot \frac{(\mathbf{r}_{k+1}, \mathbf{r}_0^*)}{(\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_0^*)}. \quad (53)$$

4. BiCRSafe 法の前処理について

係数行列を A 、右辺、解ベクトルを各々 \mathbf{b} 、 \mathbf{x} とするとき、連立一次方程式 $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ を解く。さらに、前処理行列を $M = M_1 M_2 \simeq A$ と不完全に分解し、 $M_1^{-1} A M_2^{-1}$ を \tilde{A} 、 $M_2 \mathbf{x}$ を $\tilde{\mathbf{x}}$ 、 $M_1^{-1} \mathbf{b}$ を $\tilde{\mathbf{b}}$ とするとき、元の連立一次方程式は、

$$\tilde{A} \tilde{\mathbf{x}} = \tilde{\mathbf{b}} \quad (54)$$

と同値である。変換後の方程式 (54) に対する BiCRSafe 法の補助ベクトルを、

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{r}}_k &:= M_1^{-1} \mathbf{r}_k, \tilde{\mathbf{x}}_k := M_2 \mathbf{x}_k, \tilde{\mathbf{r}}_0^* := M_1^T \mathbf{r}_0^*, \\ \tilde{\mathbf{y}}_k &:= M_1^{-1} \mathbf{y}_k, \tilde{\mathbf{z}}_k := M_2 \mathbf{z}_k \end{aligned} \quad (55)$$

と定義する。このとき、補助ベクトル $\tilde{\mathbf{p}}_k$ 、 $\tilde{\mathbf{u}}_k$ の定義の仕方により 2 つの場合に分けられる。

4.1 前処理 1

補助ベクトル $\tilde{\mathbf{p}}_k$ 、 $\tilde{\mathbf{u}}_k$ を次のように定義する。

$$\tilde{\mathbf{p}}_k := M_2 \mathbf{p}_k, \tilde{\mathbf{u}}_k := M_2 \mathbf{u}_k \quad (56)$$

このとき、前処理つき BiCRSafe 法のアルゴリズムが導出される。以下では、前処理行列 (= M) の違いという意味で、BiCRSafe(M-a) 法と呼ぶことにする。「compute $A\mathbf{v}$ 」の表記は、その行において行列・ベクトル積の計算を定義どおりに行うことを意味する。

1. Let \mathbf{x}_0 be random numbers
2. Put $\mathbf{r}_0 = \mathbf{b} - A\mathbf{x}_0$, compute $AM^{-1}\mathbf{r}_0$
3. Set $\beta_{-1} = 0$, $\mathbf{q}_0 = AM^{-1}\mathbf{r}_0$
4. For $k = 0, 1, \dots$, Do
5. $\mathbf{p}_k = M^{-1}\mathbf{r}_k + \beta_{k-1}(\mathbf{p}_{k-1} - \mathbf{u}_{k-1})$
6. $A\mathbf{p}_k = AM^{-1}\mathbf{r}_k + \beta_{k-1}(A\mathbf{p}_{k-1} - A\mathbf{u}_{k-1})$
7. $\alpha_k = \frac{(\mathbf{q}_k, \mathbf{r}_0^*)}{(M^{-1}A\mathbf{p}_k, A^T \mathbf{r}_0^*)}$
8. $\zeta_k = \frac{(\mathbf{y}_k, \mathbf{y}_k)(\mathbf{q}_k, \mathbf{r}_k) - (\mathbf{y}_k, \mathbf{r}_k)(\mathbf{q}_k, \mathbf{y}_k)}{(\mathbf{q}_k, \mathbf{q}_k)(\mathbf{y}_k, \mathbf{y}_k) - (\mathbf{y}_k, \mathbf{q}_k)(\mathbf{q}_k, \mathbf{y}_k)}$
9. $\eta_k = \frac{(\mathbf{q}_k, \mathbf{q}_k)(\mathbf{y}_k, \mathbf{r}_k) - (\mathbf{y}_k, \mathbf{q}_k)(\mathbf{q}_k, \mathbf{r}_k)}{(\mathbf{q}_k, \mathbf{q}_k)(\mathbf{y}_k, \mathbf{y}_k) - (\mathbf{y}_k, \mathbf{q}_k)(\mathbf{q}_k, \mathbf{y}_k)}$
10. (if $k = 0$ then $\zeta_k = \frac{(\mathbf{q}_k, \mathbf{r}_k)}{(\mathbf{q}_k, \mathbf{q}_k)$, $\eta_k = 0$)
11. $\mathbf{u}_k = \zeta_k M^{-1}A\mathbf{p}_k + \eta_k(M^{-1}\mathbf{y}_k + \beta_{k-1}\mathbf{u}_{k-1})$
12. compute $A\mathbf{u}_k$
13. $\mathbf{z}_k = \zeta_k M^{-1}\mathbf{r}_k + \eta_k \mathbf{z}_{k-1} - \alpha_k \mathbf{u}_k$
14. $\mathbf{y}_{k+1} = \zeta_k \mathbf{q}_k + \eta_k \mathbf{y}_k - \alpha_k A\mathbf{u}_k$
15. $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{p}_k + \mathbf{z}_k$
16. $\mathbf{r}_{k+1} = \mathbf{r}_k - \alpha_k A\mathbf{p}_k - \mathbf{y}_{k+1}$
17. $\mathbf{q}_{k+1} = \text{compute } AM^{-1}\mathbf{r}_{k+1}$
18. $M^{-1}\mathbf{r}_{k+1} = M^{-1}\mathbf{r}_k - \alpha_k M^{-1}A\mathbf{p}_k - M^{-1}\mathbf{y}_{k+1}$
19. $\beta_k = \frac{\alpha_k (\mathbf{q}_{k+1}, \mathbf{r}_0^*)}{\zeta_k (\mathbf{q}_k, \mathbf{r}_0^*)}$
20. End Do

ここで、上のアルゴリズムの 7 行と 19 行目のパラメータ α_k 、 β_k の定義式を

$$\begin{aligned} 7. \quad \alpha_k &= \frac{(\mathbf{r}_k, M^{-T}A^T \mathbf{r}_0^*)}{(A\mathbf{p}_k, M^{-T}A^T \mathbf{r}_0^*)}, \\ 19. \quad \beta_k &= \frac{\alpha_k (\mathbf{r}_{k+1}, M^{-T}A^T \mathbf{r}_0^*)}{\zeta_k (\mathbf{r}_k, M^{-T}A^T \mathbf{r}_0^*)} \end{aligned}$$

と換えた前処理つき BiCRSafe 法のアルゴリズムも導出される。ただし、 $M^{-T}A^T \mathbf{r}_0^*$ の計算は反復ループに入る前に 1 度だけ行えばよい。以下では、これを BiCRSafe(M-b) 法と呼ぶことにする。次に、行列・ベクトル積の計算を、定義どおりに行うもの、漸化式を用いて計算するものを以下に示す。

- 定義どおり計算： $AM^{-1}\mathbf{r}_k, A\mathbf{u}_k$ 。

- 漸化式を用いて計算： Ap_k .

さらに、前進・後退代入計算を、定義どおりに行うものと漸化式を用いて計算するものを以下に示す .

- 定義どおりに計算： $M^{-1}Ap_k, M^{-1}y_k$.
- 漸化式を用いて計算： $M^{-1}r_k$.

4.2 前処理 2

補助ベクトル \tilde{p}_k, \tilde{u}_k を次のように定義する .

$$\tilde{p}_k := M_1^{-1}p_k, \tilde{u}_k := M_1^{-1}u_k \quad (57)$$

このとき、別の前処理つき BiCRSafe 法のアルゴリズムが導出される . 以下では、これを BiCRSafe(M-c) 法と呼ぶことにする .

1. Let x_0 be random numbers
2. Put $r_0 = b - Ax_0$, compute $AM^{-1}r_0$
3. Set $\beta_{-1} = 0, q_0 = AM^{-1}r_0$
4. For $k = 0, 1, \dots$, Do
5. $p_k = r_k + \beta_{k-1}(p_{k-1} - u_{k-1})$
6. $M^{-1}p_k = M^{-1}r_k + \beta_{k-1}(M^{-1}p_{k-1} - M^{-1}u_{k-1})$
7. $AM^{-1}p_k = AM^{-1}r_k + \beta_{k-1}(AM^{-1}p_{k-1} - AM^{-1}u_{k-1})$
8. $\alpha_k = \frac{(r_k, M^{-T}A^T r_0^*)}{(Ap_k, M^{-T}A^T r_0^*)}$
9. $\zeta_k = \frac{(y_k, y_k)(q_k, r_k) - (y_k, r_k)(q_k, y_k)}{(q_k, q_k)(y_k, y_k) - (y_k, q_k)(q_k, y_k)}$
10. $\eta_k = \frac{(q_k, q_k)(y_k, r_k) - (y_k, q_k)(q_k, r_k)}{(q_k, q_k)(y_k, y_k) - (y_k, q_k)(q_k, y_k)}$
11. (if $k = 0$ then $\zeta_k = \frac{(q_k, r_k)}{(q_k, q_k)}, \eta_k = 0$)
12. $u_k = \zeta_k AM^{-1}p_k + \eta_k(y_k + \beta_{k-1}u_{k-1})$
13. compute $AM^{-1}u_k$
14. $z_k = \zeta_k M^{-1}r_k + \eta_k z_{k-1} - \alpha_k M^{-1}u_k$
15. $y_{k+1} = \zeta_k q_k + \eta_k y_k - \alpha_k AM^{-1}u_k$
16. $x_{k+1} = x_k + \alpha_k M^{-1}p_k + z_k$
17. $r_{k+1} = r_k - \alpha_k AM^{-1}p_k - y_{k+1}$
18. $q_{k+1} = \text{compute } AM^{-1}r_{k+1}$
19. $\beta_k = \frac{\alpha_k (r_{k+1}, M^{-T}A^T r_0^*)}{\zeta_k (r_k, M^{-T}A^T r_0^*)}$
20. End Do

ここで、行列・ベクトル積の計算を、定義どおりに行うもの、漸化式を用いて計算するものを以下に示す .

- 定義どおりに計算： $AM^{-1}r_k, AM^{-1}u_k$.
- 漸化式を用いて計算： $AM^{-1}p_k$.

さらに、前進・後退代入計算を、定義どおりに行うものと漸化式を用いて計算するものを以下に示す .

- 定義どおりに計算： $M^{-1}r_k, M^{-1}u_k$.
- 漸化式を用いて計算： $M^{-1}p_k$.

以上の考察をまとめると、前処理 1 と同 2 における行列・ベクトル積の計算と前進・後退代入の計算で、各反復ごとに、定義どおりの計算が 2 回、漸化式を用いた計算が 1 回と各々見積られる .

5. 数値実験

5.1 計算機環境と計算条件

計算機は九州大学情報基盤研究開発センターに設置された IBM eServer p5 (CPU : POWER5, クロック周波数 : 1.9 GHz, メモリ : 3 GB/CPU, OS : IBM AIX 5L) を用いた . コンパイラは IBM XL Fortran Compiler ver.9.1 を使い、最適化オプションは -O3 -qarch=pwr5 -qtune=pwr5 -qhot を使用した . プログラムは Fortran90 で実装した . 計算はすべて倍精度浮動小数点演算で行った . 時間の計測には Fortran の時間計測関数 mclock を用いた . 収束性を評価した反復法は、CGS 法, CRS 法, BiCGStab 法, BiCRStab 法, GP-BiCG 法, GPBiCR 法, BiCGSafe 法, BiCRSafe(M-a) 法, BiCRSafe(M-b) 法, BiCRSafe(M-c) 法の合計 10 種類である . ただし、表 2-表 4 において、3 つの変形版前処理つき BiCRSafe 法のうち、収束性が最も良かったものの結果だけを掲載した . 行列はあらかじめ対角スケーリングにより対角項をすべて 1.0 に正規化した . 収束判定は相対残差 2 ノルム : $\|r_{k+1}\|_2 / \|r_0\|_2 \leq 10^{-7}$ とした . 初期近似解 x_0 はすべて 0, 最大反復回数は 10,000 にした . 初期シャドウ残差ベクトル r_0^* には、

- 初期残差ベクトル r_0 ,
- 一様乱数 ,
- すべての要素に同じ値 (=1.0)

の 3 通りの場合を調べた . 前処理は、行列の対角要素の 1 よりも大きな値 (=加速係数 γ と呼ぶ⁶⁾) を掛ける ILU(0) 分解 (以下、加速 ILU(0) 分解と呼ぶ) を用いた . また、ILU(0) 分解とは、元の係数行列 A の非零要素と同じ位置に現れたフィルインのみを不完全分解のとき考慮する前処理を指す .

5.2 テスト問題 1

表 1 に、行列の主な特徴を示す . これらの行列は、

表 1 テスト問題 1 の行列の主な特徴

Table 1 Characteristics of test matrices in problem 1.

行列	解析分野	次元数	非零要素数	平均非零要素数
K3plates	構造解析	11,107	378,927	34.12
EX19	流体解析	12,005	259,577	21.62
LI	磁性流体	22,695	1,215,181	53.54
EX10HS	流体解析	2,548	57,308	22.49
Fidapm037	同上	9,152	765,944	83.69

Florida 大学の疎行列データベースから選出した²⁾。

表 2, 表 3, 表 4 に, 5 つの行列 K3plates, EX19, LI, EX10HS, Fidapm037 における加速 ILU(0) 分解つき反復法の収束性を各々示す. 表中の初期シャドウ残差ベクトル r_0^* に関する第 2 欄の「 r_0^* 」において, 「 r_0 」は $r_0^* = r_0$ の場合, 「乱数」は r_0^* に一様乱数を代入した場合, 「同じ値」は r_0^* のすべての要素に同じ値 (=1.0) を代入した場合, の収束結果を各々表す. 各初期シャドウ残差ベクトル r_0^* の中の計算時間最少のものを太字で表示した. 時間の単位はすべて秒とする. 加速係数 γ は, 1.0 から 1.30 まで 0.002 刻みで合計 151 ケースを計算した. さらに, 「成功数」とは収束に成功したケースの数, 「成功率 (%)」はその比率を各々表す. また, 表 2-表 10 の平均値は, 各解法ごとにすべての加速係数 γ のときの結果を集計して求めた相乗平均の値である.

表 2-表 4 に示した結果から以下のことが分かる.

- 行列 K3plates では, CGS 法のわずか 1 例 ($r_0^* =$ 乱数のとき) を除き, どの反復法でもすべての加速係数の場合において収束した. この結果から, BiCG 法系統の反復法よりも, BiCR 法系統の反復法の方が, 収束性が良いことが分かる.
- 行列 EX19 では, BiCG 法系統の反復法の収束が全般的に不安定であることが分かる. 一方, BiCR 法系統の反復法の収束性が安定していることが分かる.
- 行列 LI では, BiCGSafe 法より, BiCRSafe(M-a), BiCRSafe(M-c) 法の収束性が良い.
- 行列 EX10HS では, $r_0^* = r_0$ のときだけ, BiCGSafe 法の収束性が良いが, その他の 2 ケースでは BiCRSafe 法が収束性が良かった.
- 行列 Fidapm037 では, 初期シャドウ残差ベクトル r_0^* を乱数または同じ値にとったときが全般に収束性が安定している. その中で, BiCGSafe 法の収束性が変形版前処理つき BiCRSafe 法よりわずかに収束性が良い.

5.3 テスト問題 2

ここでは, テスト問題 2 として, 積層鉄心の表面層を考慮した磁気軸受の渦電流解析から生じた行列を取り扱った^{7),8),12)}. 一般に, 電気電子機器では, 渦電流損を低減するため, 非常に薄い鋼板を積層した積層鉄心がよく用いられる. そして, 高い設計精度を確保するため, その表面を研磨する必要がある. このとき, 場合によっては, 層間の絶縁が破れ, この部分に渦電流が流れることがある. したがって, 発生する渦電流により被る損失を極力抑えることが設計上非常に重要

表 2 行列 K3plates, EX19 に対する前処理つき反復法の収束性
Table 2 Convergence of preconditioned iterative methods for matrices K3plates and EX19.

(a) 行列: K3plates

r_0^*	解法	成功数	成功率 (%)	平均回数	平均時間
r_0	CGS	151	100	723	4.13
	CRS	151	100	133	0.88
	BiCGStab	151	100	245	1.49
	BiCRStab	151	100	156	1.01
	GPBiCG	151	100	211	1.34
	GPBiCR	151	100	128	0.87
	BiCGSafe	151	100	211	1.33
	BiCRSafe(M-a)	151	100	128	0.86
乱数	CGS	150	99	584	3.37
	CRS	151	100	149	0.97
	BiCGStab	151	100	263	1.59
	BiCRStab	151	100	157	1.02
	GPBiCG	151	100	185	1.19
	GPBiCR	151	100	139	0.93
	BiCGSafe	151	100	188	1.20
	BiCRSafe(M-a)	151	100	139	0.93
同じ値	CGS	151	100	575	3.32
	CRS	151	100	136	0.89
	BiCGStab	151	100	186	1.17
	BiCRStab	151	100	149	0.97
	GPBiCG	151	100	136	0.91
	GPBiCR	151	100	134	0.91
	BiCGSafe	151	100	136	0.91
	BiCRSafe(M-a)	151	100	134	0.89

(b) 行列: EX19

r_0^*	解法	成功数	成功率 (%)	平均回数	平均時間
r_0	CGS	0	0	-	-
	CRS	56	37	3,181	14.89
	BiCGStab	81	54	951	4.73
	BiCRStab	81	54	1,092	5.42
	GPBiCG	94	62	765	3.96
	GPBiCR	95	63	847	4.39
	BiCGSafe	96	64	741	3.79
	BiCRSafe(M-c)	98	65	778	3.95
乱数	CGS	76	50	3,528	16.23
	CRS	94	62	778	3.87
	BiCGStab	66	44	4,262	19.74
	BiCRStab	83	55	1,116	5.52
	GPBiCG	91	60	922	4.75
	GPBiCR	96	64	818	4.21
	BiCGSafe	92	61	814	4.16
	BiCRSafe(M-a)	98	65	755	3.84
同じ値	CGS	35	23	6,415	29.33
	CRS	96	64	937	4.56
	BiCGStab	69	46	3,932	18.21
	BiCRStab	84	56	1,025	5.10
	GPBiCG	88	58	987	5.06
	GPBiCR	96	64	795	4.06
	BiCGSafe	94	62	898	4.55
	BiCRSafe(M-a)	98	65	730	3.73

表3 行列 LI, EX10HS に対する前処理つき反復法の収束性
Table 3 Convergence of preconditioned iterative methods for matrices LI and EX10HS.

(a) 行列: LI					
r_0^*	解法	成功数	成功率 (%)	平均回数	平均時間
r_0	CGS	0	0	-	-
	CRS	8	5	8,103	236.16
	BiCGStab	56	37	4,517	130.79
	BiCRStab	58	38	1,886	59.45
	GPBiCG	56	37	3,610	108.68
	GPBiCR	58	38	1,487	50.31
	BiCGSafe	58	38	3,318	99.69
	BiCRSafe(M-a)	58	38	1,509	48.67
乱数	CGS	49	32	6,691	193.78
	CRS	58	38	1,633	52.67
	BiCGStab	58	38	1,915	60.46
	BiCRStab	58	38	1,408	47.92
	GPBiCG	58	38	1,874	60.62
	GPBiCR	58	38	1,417	48.76
	BiCGSafe	58	38	1,883	60.46
	BiCRSafe(M-c)	58	38	1,445	47.17
同じ値	CGS	37	25	7,581	216.78
	CRS	58	38	1,745	54.38
	BiCGStab	58	38	1,934	60.01
	BiCRStab	58	38	1,465	48.49
	GPBiCG	58	38	1,859	58.58
	GPBiCR	58	38	1,312	45.57
	BiCGSafe	58	38	1,872	59.11
	BiCRSafe(M-a)	58	38	1,316	44.40

(b) 行列: EX10HS

r_0^*	解法	成功数	成功率 (%)	平均回数	平均時間
r_0	CGS	5	3	9,671	8.90
	CRS	72	48	1,857	1.76
	BiCGStab	29	19	5,853	5.46
	BiCRStab	21	14	7,504	7.01
	GPBiCG	83	55	1,232	1.24
	GPBiCR	83	55	1,418	1.42
	BiCGSafe	87	58	1,114	1.11
	BiCRSafe(M-c)	85	56	1,240	1.22
乱数	CGS	64	42	6,541	6.02
	CRS	68	45	1,882	1.82
	BiCGStab	6	4	9,512	8.81
	BiCRStab	20	13	7,743	7.25
	GPBiCG	82	54	1,819	1.78
	GPBiCR	84	56	1,182	1.21
	BiCGSafe	85	56	1,591	1.55
	BiCRSafe(M-a)	85	56	1,066	1.06
同じ値	CGS	51	34	8,040	7.41
	CRS	81	54	1,404	1.35
	BiCGStab	6	4	9,354	8.71
	BiCRStab	46	30	4,598	4.32
	GPBiCG	83	55	1,621	1.61
	GPBiCR	84	56	1,108	1.13
	BiCGSafe	86	57	1,427	1.41
	BiCRSafe(M-b)	85	56	1,068	1.07

表4 行列 Fidapm037 に対する前処理つき反復法の収束性
Table 4 Convergence of preconditioned iterative methods for matrix Fidapm037.

r_0^*	解法	成功数	成功率 (%)	平均回数	平均時間
r_0	CGS	49	32	6,748	69.22
	CRS	22	15	8,124	83.68
	BiCGStab	24	16	7,565	78.30
	BiCRStab	17	11	8,022	82.43
	GPBiCG	68	45	3,458	36.88
	GPBiCR	65	43	3,641	38.63
	BiCGSafe	73	48	3,276	34.94
	BiCRSafe(M-b)	70	46	3,350	35.17
乱数	CGS	76	50	3,768	40.45
	CRS	67	44	3,210	33.87
	BiCGStab	68	45	3,638	38.38
	BiCRStab	57	38	4,437	46.32
	GPBiCG	84	56	2,943	32.20
	GPBiCR	79	52	3,072	32.96
	BiCGSafe	88	58	2,851	30.72
	BiCRSafe(M-a)	84	56	2,975	31.67
同じ値	CGS	76	50	3,839	40.00
	CRS	68	45	3,208	34.09
	BiCGStab	73	48	3,519	38.11
	BiCRStab	64	42	3,973	41.38
	GPBiCG	84	56	2,911	32.37
	GPBiCR	80	53	3,050	33.20
	BiCGSafe	88	58	2,773	29.65
	BiCRSafe(M-a)	83	55	2,953	31.46

になる．この非常に薄い表面層のある問題を有限要素法により離散化すると，要素形状がどうしても扁平になる．このような薄い要素層を用いて解析する場合，係数行列の性質が悪くなり，反復法の収束が極端に遅くなる^{*1}．ここで扱った行列は，次元数 27720，非零要素数約 166 万，1 行あたりの平均非零要素数は約 60 の疎行列である．図 1 に渦電流解析モデル (1/8 モデル) とメッシュ分割図を示す．このモデルは，積層鉄心とコイルから構成される固定子と，軸の周りに渦電流を低減するため積層鉄心を設けた回転子で構成される．本解析における基礎方程式を以下に示す．ここで， A ， ϕ および J_0 は磁気ベクトルポテンシャル，電気スカラーポテンシャルおよび強制電流密度を各々表す．また， ν ， σ は磁気抵抗率，導電率を各々表す．

$$w = -\sigma \left(\frac{\partial A}{\partial t} + \text{grad } \phi \right), \quad (58)$$

$$\text{rot} (\nu \text{rot } A) = J_0 + w, \quad (59)$$

$$\text{div}(w) = 0. \quad (60)$$

表 5 に，行列の主な特徴を示す．

*1 この磁気軸受モデルの解析結果と課題は文献 [12] で公開されている．同様に，同文献には直流場渦電流解析の解析法についても詳細に記述されており，参照に値すると思われる．

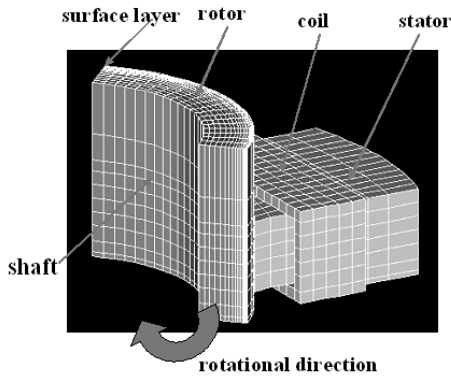


図 1 渦電流解析 1/8 モデル

Fig. 1 Eddy current analytic model (1/8 region).

表 5 テスト問題 2 の行列の主な特徴

Table 5 Characteristics of test matrices in problem 2.

行列	次元数	非零要素	平均非零要素	表面層分割厚み (mm)
SAGA033	27,720	1,665,372	60.08	0.33
SAGA005	27,720	1,665,372	60.08	0.05
SAGA001	27,720	1,664,326	60.04	0.01

5.4 実験結果

表 6, 表 7, 表 8 に, 加速 ILU(0) 分解つき反復法の収束性を示す. 評価した反復法は, 前節と同様に, 全部で 10 種類である. また, 表中の「成功数」とは収束に成功したケースの数, 「成功率 (%)」とはその比率を各々表す. 表中の平均時間の欄で太字の数字は, 各行列で平均時間が最も短いものを表す. ただし, CGS 法や CRS 法のように, 成功率そのものが非常に低いケースは対象から除外して考えた.

表 6-表 8 の結果から以下のことが分かる.

- 行列 SAGA033 に比べて, 行列 SAGA005 や行列 SAGA001 のように, 表面層の分割が細くなると, 行列の性質が悪化し, 反復法の収束までの反復回数が増加する.
- CGS 法は 3 つの行列いずれでも収束しなかった. 一方, CRS 法の収束性は初期シャドウ残差ベクトル r_0^* が r_0 のときおよび乱数を代入したとき, かなりの程度収束性が向上したが, 成功率は BiCGSafe 法に比べてまだ低い.
- BiCGStab 法および BiCRStab 法の成功率は約 10~30% 前後で非常に低い.
- GPBiCG 法は, 初期シャドウ残差ベクトルが $r_0^* = r_0$ の場合は良い性能を示したが, 他の 2 つの場合の収束性は収束が安定せず, 特に r_0^* に同じ値を代入した場合はまったく収束しなかった. 一方, GPBiCR 法は, ほとんどの場合良い収束

表 6 行列 SAGA033 に対する前処理つき反復法の収束性

Table 6 Convergence of preconditioned iterative methods for matrix SAGA033.

r_0^*	解法	成功数	成功率 (%)	平均回数	平均時間
r_0	CGS	0	0	-	-
	CRS	0	0	-	-
	BiCGStab	44	29	7,497	315.50
	BiCRStab	39	26	8,230	340.01
	GPBiCG	108	72	3,865	165.80
	GPBiCR	101	67	4,462	189.60
	BiCGSafe	117	77	3,115	134.49
	BiCRSafe(M-a)	115	76	3,479	146.13
	BiCRSafe(M-b)	112	74	3,618	152.21
	BiCRSafe(M-c)	113	75	3,542	148.14
乱数	CGS	0	0	-	-
	CRS	86	57	4,290	181.78
	BiCGStab	26	17	8,759	367.14
	BiCRStab	8	5	9,660	405.64
	GPBiCG	108	72	3,630	160.20
	GPBiCR	116	77	3,258	144.13
	BiCGSafe	124	82	2,826	114.15
	BiCRSafe(M-a)	124	82	2,787	117.29
	BiCRSafe(M-b)	122	81	2,890	122.23
	BiCRSafe(M-c)	124	82	2,785	116.69
同じ値	CGS	0	0	-	-
	CRS	89	59	4,100	166.13
	BiCGStab	24	16	8,773	355.64
	BiCRStab	11	7	9,458	381.02
	GPBiCG	0	0	-	-
	GPBiCR	120	79	2,801	117.36
	BiCGSafe	123	81	2,689	114.15
	BiCRSafe(M-a)	124	82	2,543	106.71
	BiCRSafe(M-b)	123	81	2,580	109.40
	BiCRSafe(M-c)	124	82	2,529	105.48

性を示した.

- 一方, BiCGSafe 法と BiCRSafe 法の成功率はほぼ 70~80% (加速係数 γ の探索範囲を適切に選ぶと成功率は向上するが, 本研究では γ の探索区間は [1.0, 1.30] と固定して数値実験を行った) の水準を維持し, 初期シャドウ残差ベクトル r_0^* の選び方によらず収束性は安定だった.
- 3 つの変形版前処理つき BiCRSafe 法は, r_0^* に乱数または同じ値を与えたとき, 収束性が良かった. 同じく, BiCGSafe 法でも, r_0^* が同じ値のとき良い収束性を示した.

行列 SAGA033 において, 図 2 は, 加速係数 γ を変化させたときの, 前処理つき BiCGStab 法の反復回数の変動, 図 3 は, 同前処理つき GPBiCG 法, 図 4 は, 同前処理つき同 BiCRSafe(M-a) 法の反復回数の変動を各々示す. 各図で, 実線は, $r_0^* = r_0$ の場合, 薄い灰色の破線は, r_0^* に乱数を代入した場合, 黒い点線は r_0^* のすべての要素に同じ値 (=1.0) を代入し

表 7 行列 SAGA005 に対する前処理つき反復法の収束性

Table 7 Convergence of preconditioned iterative methods for matrix SAGA005.

r_0^*	解法	成功数	成功率 (%)	平均回数	平均時間
r_0	CGS	0	0	-	-
	CRS	45	30	7,244	306.20
	BiCGStab	38	25	8,703	353.20
	BiCRStab	38	25	8,702	357.19
	GPBiCG	109	72	5,475	229.88
	GPBiCR	112	74	5,797	245.97
	BiCGSafe	112	74	4,679	201.77
	BiCRSafe(M-a)	114	75	4,964	206.28
	BiCRSafe(M-b)	113	75	4,954	206.19
BiCRSafe(M-c)	114	75	4,777	199.64	
乱数	CGS	0	0	-	-
	CRS	59	39	6,551	260.31
	BiCGStab	18	12	9,493	381.83
	BiCRStab	5	3	9,911	386.25
	GPBiCG	25	17	8,149	357.80
	GPBiCR	111	74	4,827	208.64
	BiCGSafe	122	81	3,571	148.49
	BiCRSafe(M-a)	122	81	4,314	185.67
	BiCRSafe(M-b)	120	79	4,201	176.51
BiCRSafe(M-c)	123	81	4,164	174.91	
同じ値	CGS	0	0	-	-
	CRS	66	44	6,080	247.97
	BiCGStab	25	17	9,086	374.54
	BiCRStab	6	4	9,782	403.12
	GPBiCG	0	0	-	-
	GPBiCR	119	79	3,641	153.04
	BiCGSafe	121	80	3,606	152.41
	BiCRSafe(M-a)	122	81	3,331	139.90
	BiCRSafe(M-b)	123	81	3,304	139.07
BiCRSafe(M-c)	124	82	3,280	137.89	

表 8 行列 SAGA001 に対する前処理つき反復法の収束性

Table 8 Convergence of preconditioned iterative methods for matrix SAGA001.

r_0^*	解法	成功数	成功率 (%)	平均回数	平均時間
r_0	CGS	0	0	-	-
	CRS	0	0	-	-
	BiCGStab	14	9	9,669	389.85
	BiCRStab	12	8	9,876	402.50
	GPBiCG	86	57	7,310	302.20
	GPBiCR	64	42	7,838	331.73
	BiCGSafe	115	76	5,844	237.01
	BiCRSafe(M-a)	95	63	6,755	261.41
	BiCRSafe(M-b)	95	63	6,764	276.51
BiCRSafe(M-c)	104	69	6,456	271.84	
乱数	CGS	0	0	-	-
	CRS	37	25	8,485	347.81
	BiCGStab	0	0	-	-
	BiCRStab	1	1	9,984	409.57
	GPBiCG	82	54	6,726	276.96
	GPBiCR	101	67	6,332	263.35
	BiCGSafe	117	77	5,533	227.34
	BiCRSafe(M-a)	120	79	5,489	232.91
	BiCRSafe(M-b)	121	80	5,567	232.52
BiCRSafe(M-c)	123	81	5,397	228.36	
同じ値	CGS	0	0	-	-
	CRS	34	23	8,503	343.38
	BiCGStab	2	1	9,961	403.78
	BiCRStab	2	1	9,977	403.14
	GPBiCG	0	0	-	-
	GPBiCR	110	73	5,384	224.76
	BiCGSafe	121	80	5,382	217.49
	BiCRSafe(M-a)	118	78	4,904	201.58
	BiCRSafe(M-b)	122	81	4,780	202.58
BiCRSafe(M-c)	123	81	4,764	201.02	

た場合を各々表す．最大反復回数は 10,000 回である．また，図の横軸は加速係数 γ の値を，同縦軸は反復回数を各々表す．これらの図から，

- 加速係数 γ を変化させたとき，BiCGStab 法ではほとんどの場合で収束せず，GPBiCG 法でも，図 3 のときのように r_0^* に定数を与えたとき収束しないなど，収束が不安定である，
- 一方，BiCRSafe(M-a) 法は， γ が変化しても収束性が安定に推移する，

ことが確認できた．

5.4.1 問題 1 と 2 の解析結果の共通点

表 2 から表 8 に示した初期シャドウ残差ベクトル r_0^* ごとの太字で表示した最少時間の結果から，前処理つき反復法の収束性について以下の知見が得られる．

- r_0^* の 3 つの選び方のうち，最も速いケースが $r_0^* =$ 同じ値，のときが多かった．行列 EX19, LI, EX10HS, Fidapm037, SAGA033, SAGA005, SAGA001 で観察された．

- $r_0^* = r_0$ のときおよび $r_0^* =$ 乱数のときは，同程度の性能であった．

- 3 つの変形版前処理つき BiCRSafe 法の中では，収束性が良かった順番は，BiCRSafe(M-a) 法，BiCRSafe(M-c) 法，BiCRSafe(M-b) 法の順であった．

以上の知見から，提案した前処理つき BiCRSafe(M-a) 法，BiCRSafe(M-b) 法，BiCRSafe(M-c) 法は，

- 初期シャドウ残差ベクトル r_0^* の選択に対する収束特性の劣化の程度が緩やかであること，
- 加速 ILU(0) 分解前処理の加速パラメータ γ の変化に対する収束特性の劣化の程度が緩やかであること，

という性質を持った良い解法であることが分かった．

5.4.2 BiCRSafe 法の収束性と加速係数 γ との関係の考察

ここでは，BiCRSafe 法の収束性と加速係数 γ との関係について考察する．表 9 に，6 種類の反復法

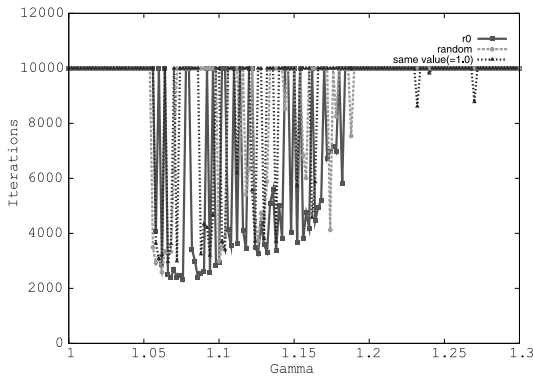


図2 前処理つき BiCGStab 法の加速係数依存性 (行列 SAGA033 のとき)

Fig.2 Variation of iterations of preconditioned BiCGStab method for matrix SAGA033.

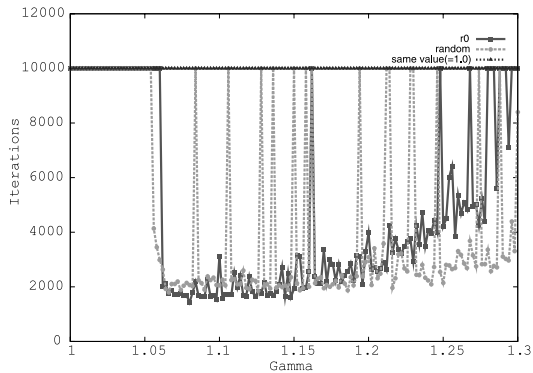


図3 前処理つき GPBiCG 法の加速係数依存性 (行列 SAGA033 のとき)

Fig.3 Variation of iterations of preconditioned GPBiCG method for matrix SAGA033.

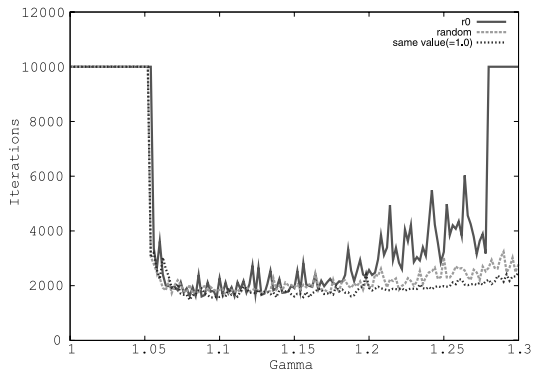


図4 前処理つき BiCRSafe(M-a) 法の加速係数依存性 (行列 SAGA033 のとき)

Fig.4 Variation of iterations of preconditioned BiCRSafe(M-a) method for matrix SAGA033.

(GPBiCG, GPBiCR, BiCGSafe, BiCGSafe(M-a), BiCGSafe(M-b), BiCGSafe(M-c) 法) の収束性と加速係数 γ との関係を示す. 行列は EX19, EX10HS

表9 6種類の前処理つき反復法の収束性と加速係数 γ との関係 (行列 EX19, EX10HS のとき)

Table 9 Relationship between convergence of six preconditioned iterative methods and accelerated parameter γ for matrices EX19 and EX10HS.

(a) 行列: EX19

r_0^*	解法	加速係数 γ との関係	成功数	平均回数	平均時間
乱数	GPBiCG	6 解法で収束	89	177	0.96
		それ以外	2	5,855	28.04
	GPBiCR	6 解法で収束	89	162	0.89
		それ以外	7	2,003	9.73
	BiCGSafe	6 解法で収束	89	148	0.80
		それ以外	3	2,635	12.47
BiCRSafe(M-a)	6 解法で収束	89	146	0.79	
	それ以外	9	2,057	9.82	
BiCRSafe(M-b)	6 解法で収束	89	145	0.79	
	それ以外	6	2,356	11.20	
BiCRSafe(M-c)	6 解法で収束	89	148	0.80	
	それ以外	8	2,103	9.94	
同じ値	GPBiCG	6 解法で収束	85	170	0.92
		それ以外	3	3,431	16.53
	GPBiCR	6 解法で収束	85	136	0.74
		それ以外	11	2,165	10.48
	BiCGSafe	6 解法で収束	85	129	0.70
		それ以外	7	2,702	12.79
	BiCRSafe(M-a)	6 解法で収束	85	133	0.74
		それ以外	13	1,616	7.75
BiCRSafe(M-b)	6 解法で収束	85	134	0.74	
	それ以外	8	1,337	6.43	
BiCRSafe(M-c)	6 解法で収束	85	131	0.72	
	それ以外	11	1,413	6.79	

(b) 行列: EX10HS

r_0^*	解法	加速係数 γ との関係	成功数	平均回数	平均時間
乱数	GPBiCG	6 解法で収束	81	424	0.42
		それ以外	1	2,636	2.56
	GPBiCR	6 解法で収束	81	201	0.21
		それ以外	3	1,370	1.39
	BiCGSafe	6 解法で収束	81	351	0.35
		それ以外	4	2,157	2.09
BiCRSafe(M-a)	6 解法で収束	81	182	0.19	
	それ以外	4	1,334	1.32	
BiCRSafe(M-b)	6 解法で収束	81	174	0.19	
	それ以外	3	1,238	1.24	
BiCRSafe(M-c)	6 解法で収束	81	186	0.20	
	それ以外	3	863	0.86	
同じ値	GPBiCG	6 解法で収束	82	354	0.36
		それ以外	1	4,328	4.14
	GPBiCR	6 解法で収束	82	178	0.19
		それ以外	2	4,142	4.01
	BiCGSafe	6 解法で収束	82	288	0.29
		それ以外	4	4,552	4.35
	BiCRSafe(M-a)	6 解法で収束	82	170	0.18
		それ以外	3	3,920	3.68
BiCRSafe(M-b)	6 解法で収束	82	166	0.18	
	それ以外	3	5,889	5.51	
BiCRSafe(M-c)	6 解法で収束	82	176	0.18	
	それ以外	2	2,794	2.62	

のときの結果である．同様に，表 10 に，行列が SAGA033 のときの結果を示す．加速係数 γ は，今までの数値実験の場合と同様に，1.0 から 1.30 まで 0.002 刻みで合計 151 ケースとする．また，初期シャドウ残差ベクトル r_0^* が r_0 と等しい場合は他と同様の傾向だったため，紙面の関係で割愛する．

表の中で，「6 解法で収束」とは，調べた 6 種類の反復法のすべてで収束した加速係数 γ のときの相乗平均の値を表す．一方，「それ以外」とは，6 種類の解法のうち，収束しなかった解法が少なくとも 1 つはある加速係数 γ のときの相乗平均の値を表す．これらの表から以下のことが観察される．

- 行列 EX10HS と行列 SAGA033 の場合，3 つの変形版前処理つき BiCRSafe 法は，「6 解法で収束」の場合，GPBiCG, GPBiCR, BiCGSafe 法よりも収束までの反復回数が少なく収束性が良い．
- 行列 EX19 のときでも，「6 解法で収束」の場合，3 つの変形版前処理つき BiCRSafe 法と BiCGSafe 法の収束性が良い．
- 行列 EX19 と行列 SAGA033 の「それ以外」の場合，3 つの変形版前処理つき BiCRSafe 法の「成

功数」が，他の GPBiCG, GPBiCR, BiCGSafe 法のそれよりも多く，収束性が良い．

- 行列 EX10HS の「それ以外」の場合，3 つの変形版前処理つき BiCRSafe 法と BiCGSafe 法の収束性の良さはほぼ同等である．

5.4.3 BiCRSafe 法の収束性の特徴

ここでは，前処理つき BiCRSafe 法の収束性が 3 つのタイプに分類できることを示す．ただし，ここでは BiCRSafe(M-a) 法の結果を示すが，他の BiCRSafe(M-b), BiCRSafe(M-c) 法でも同様の傾向が得られた．初期シャドウ残差ベクトル r_0^* は乱数を代入した．図 5 は，行列 EX10HS の場合の，BiCRSafe(M-a) 法の反復回数を加速係数 γ ごとにプロットしたものである．同様に，図 6 は行列 SAGA033 のとき，図 7 は行列 LI のとき，の各反復回数のプロットである．各図の中で，○印は，表 9 の中の「6 解法で収束」，同様に △印は表 9 の中の「それ以外」，の場合を各々表す．3 つの図から，BiCRSafe(M-a) 法の収束性は以下のように分類できる．

- 収束性のタイプ (I) : (図 5 参照)

表 9 の「6 解法で収束」と「それ以外」の場合で，収束までの反復回数が大きく異なるタイプを指す．図では 2 つの場合 (○印と △印) が分離して見える．いい換えると，タイプ (I) は，他の解法では収束しない加速係数 γ のときでも，BiCRSafe(M-a) 法では反復回数が増えるが収束する，ことを意味する．タイプ (I) に属する行列は，行列 EX10HS のほかに行列 EX19, Fidapm37 がある．

表 10 6 種類の前処理つき反復法の収束性と加速係数 γ との関係 (行列 SAGA033 のとき)

Table 10 Relationship between convergence of six preconditioned iterative methods and accelerated parameter γ for matrix SAGA033.

r_0^*	解法	加速係数 γ との関係	成功数	平均回数	平均時間
乱数	GPBiCG	6 解法で収束	98	2,406	106.34
		それ以外	10	2,609	115.63
	GPBiCR	6 解法で収束	98	2,314	102.84
		それ以外	18	2,371	105.69
	BiCGSafe	6 解法で収束	98	2,114	93.81
		それ以外	26	2,272	100.55
	BiCRSafe(M-a)	6 解法で収束	98	2,093	88.19
		それ以外	26	2,176	91.71
	BiCRSafe(M-b)	6 解法で収束	98	2,136	90.81
		それ以外	24	2,219	93.51
	BiCRSafe(M-c)	6 解法で収束	98	2,092	87.48
		それ以外	26	2,173	91.77
同じ値	GPBiCG	6 解法で収束	0	-	-
		それ以外	0	-	-
	GPBiCR	6 解法で収束	118	2,012	84.51
		それ以外	2	2,251	94.58
	BiCGSafe	6 解法で収束	118	1,969	83.71
		それ以外	5	2,698	114.77
	BiCRSafe(M-a)	6 解法で収束	118	1,867	78.44
		それ以外	6	2,347	99.19
	BiCRSafe(M-b)	6 解法で収束	118	1,877	79.63
		それ以外	5	2,399	101.61
	BiCRSafe(M-c)	6 解法で収束	118	1,855	77.36
		それ以外	6	2,306	97.84

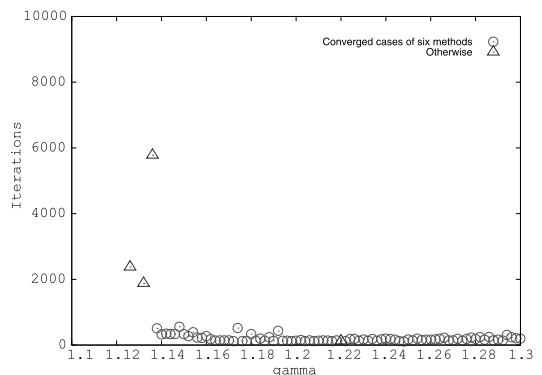


図 5 収束性のタイプ (I) の例 (行列 EX10HS のとき，○印と △印は，表 9 の中の「6 解法で収束」と「それ以外」に各々対応する)

Fig.5 Example of type (I) of convergence tendency of BiCRSafe(M-a) method for matrix EX10HS. Symbol “○” corresponds to “Converged cases of six methods” and symbol △ corresponds to “Otherwise” in Table 9.

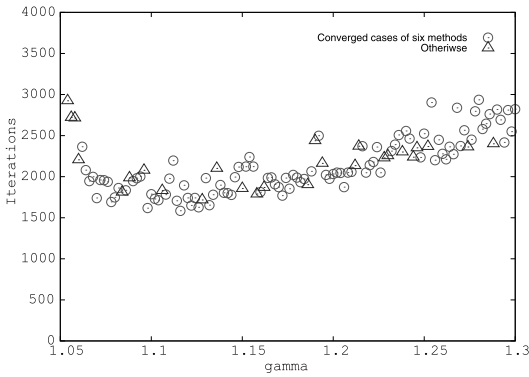


図6 収束性のタイプ (II) の例 (行列 SAGA033 のとき, \circ 印と Δ 印は, 表 10 の中の「6 解法で収束」と「それ以外」に各々対応する)

Fig.6 Example of type (II) of convergence tendency of BiCRSafe(M-a) method for matrix SAGA033. Symbol “o” corresponds to “Converged cases of six methods” and symbol Δ corresponds to “Otherwise” in Table 10.

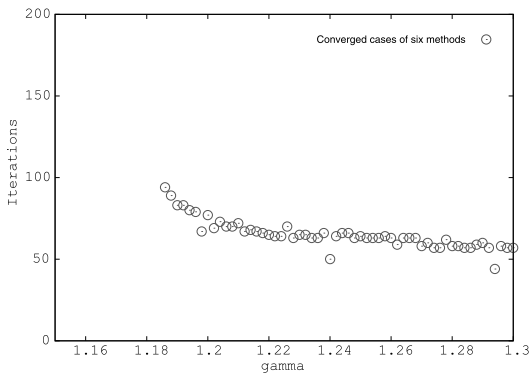


図7 収束性のタイプ (III) の例 (行列 LI のとき)

Fig.7 Example of type (III) of convergence tendency of BiCRSafe(M-a) method for matrix LI.

- 収束性のタイプ (II) : (図 6 参照)
同様に, 表 9 の「6 解法で収束」と「それ以外」の場合で, 収束までの反復回数がほとんど差がないタイプを指す. 図では 2 つの場合 (\circ 印と Δ 印) が同じ付近で混じって見える. すなわち, タイプ (II) は, Δ 印に対応する加速係数 γ のとき, 他の解法では収束しないことが多くても, BiCRSafe(M-a) 法では他の加速係数 γ のときと同程度の少ない反復回数で収束することを意味している. タイプ (II) に属する行列は, 行列 SAGA033 のほかに行列 SAGA005, SAGA001 がある.
- 収束性のタイプ (III) : (図 7 参照)
表 9 の「6 解法で収束」のときだけが収束し, 「それ以外」の場合ではまったく収束しなかったタ

イプを指す. すなわち, タイプ (III) のときは, BiCRSafe(M-a) 法も他の解法と同程度の収束性しかないことを表す. タイプ (III) に属する行列は, 行列 LI のほかに行列 K3plates がある.

以上をまとめると, 上記のタイプ (I) とタイプ (II) は, BiCRSafe 法の優れた収束性を表すものである, ということができる.

6. まとめ

BiCR 法の残差ベクトルをベースにした BiCRSafe 法の算法を構築し, 数値実験によってその有用性を検証した. さらに, BiCRSafe 法では, 中間ベクトルの変換式の違いおよびパラメータ α_k, β_k の定義式の違いにより 3 つの変形版を持つ前処理が導けることを示した. 数値実験は, 疎行列データベースの問題および実際の渦電流解析の問題で行い, 合計 10 種類の解法を評価比較を行った. その結果, 従来の解法と比較して, 前処理つき BiCRSafe 法は非常に良い収束性を有することが分かった.

謝辞 磁気軸受周りの直流場渦電流解析について, ご指導と多くのご助言をいただいた佐賀大学工学部村松和弘准教授, 同志社大学大学院藤原耕二教授, SSIL 社亀有照久氏に深く感謝の意を表す. また, 数値実験のまとめ方について有益な案を示してくれた研究室の鬼束崇博君に感謝する. 最後に, 適切なご助言と問題解決案のヒントをいただいた匿名の査読者に心より謝意を表す.

参考文献

- 1) 阿部邦美, 曾我部知広, 藤野清次, 張 紹良: 非対称行列用共役残差法に基づく積型反復解法, 情報処理学会論文誌: コンピューティングシステム, Vol.48, No.SIG8, pp.11–21 (2007).
- 2) Davis, T.: University of Florida Sparse Matrix Collection. <http://www.cise.ufl.edu/research/sparse/matrices/>
- 3) Fletcher, R.: Conjugate Gradient Methods for Indefinite Systems, Lecture Notes in Mathematics, No.506, pp.73–89 (1976).
- 4) 藤野清次, 藤原 牧, 吉田正浩: 準残差の最小化に基づく BiCGSafe 法の収束性について, Transactions of JSCES, Paper No.20050028 (2005).
- 5) 藤原 牧, 吉田正浩, 藤野清次: 収束の 3 重の安全鍵を与える Crout 版 ILU 分解つき BiCGSafe 法, 情報処理学会論文誌: コンピューティングシステム, Vol.47, No.SIG7, pp.52–60 (2006).
- 6) Manteuffel, T.A.: An incomplete factorization technique for positive definite linear systems, *Math. Comp.*, Vol.31, pp.473–497 (1980).

- 7) Muramatsu, K., Takahashi, N., et al.: Three-dimensional steady-state eddy-current analysis of moving conductor using edge elements and moving-coordinate system, *IEEE Trans. Magnetics*, Vol.38, pp.597-600 (2002).
- 8) 清水露規, 村松和弘ほか: 箔要素を用いて積層鉄心の表面層を考慮した磁気軸受の渦電流解析, 電気学会研究会資料 SA-05-18, pp.105-110 (2005).
- 9) Saad, Y.: *Iterative methods for sparse linear systems, 2nd edition*, SIAM Philadelphia (2003).
- 10) 曾我部知広, 杉原正顯, 張 紹良: 共役残差法の非対称行列用への拡張, 日本応用数学会論文誌, Vol.15, No.3, pp.445-459 (2005).
- 11) Sonneveld, P.: A Fast Lanczos-type Solver for Nonsymmetric Linear Systems, *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, Vol.10, pp.36-52 (1989).
- 12) SSIL 社の HP, EMSolution 直流場渦電流解析: <http://www.ssil.com/em/EMSolution/ja.bak/Information/SteadyCurrent/SteadyCurrent.PDF>
- 13) 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, pp.631-644 (1992).
- 14) van der Vorst, H.A.: *Iterative Krylov preconditionings for large linear systems*, Cambridge University Press, Cambridge (2003).

- 15) Zhang, S.-L.: GPBi-CG: Generalized product-type preconditionings based on Bi-CG for solving nonsymmetric linear systems, *SIAM J. Sci. Comput.*, Vol.18, pp.537-551 (1997).

(平成 19 年 7 月 23 日受付)

(平成 19 年 12 月 13 日採録)



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教授。2007 年同情報基盤研究開発センター教授。日本応用数学会, 計算工学会, 日本シミュレーション学会各会員。



尾上 勇介

2007 年 3 月九州大学工学部電気情報工学科卒業。現在九州大学大学院システム情報科学府修士課程在学中。非対称行列用の前処理と反復法に興味を持つ。