BiCGStab 法の前処理付きアルゴリズムに対する改善

伊 藤 祥 司[†1] 片 桐 孝 洋[†1] 櫻 井 隆 雄[†2]
猪 貝 光 祥[†3] 大 島 聡 史[†1]
黒 田 久 泰[†4] 直 野 健[†2]

前処理付き BiCGStab（PBiCGStab）法の改善アルゴリズムを提案する．前処理付き BiCG 法に CGS 法の導出手順を適用すると，CGS 法の合理的な前処理付きアルゴリズムが構成される．この手法を PBiCGStab 法へと拡張するに当たり，BiCGStab 法に現れる MR 演算に対し論理面からの新たな考察を行い，適用できることを示した．本提案アルゴリズムが従来の PBiCGStab よりも合理的であることと，数値実験により本提案の有効性を示す．

An improvement in preconditioned algorithm of BiCGStab method

Shoji Itoh,[†1] Takahiro Katagiri,[†1] Takao Sakurai,[†2]
Mitsuyoshi Igai,[†3] Satoshi Ohshima,[†1] Hisayasu Kuroda[†4]
and Ken Naono[†2]

An improved preconditioned BiCGStab algorithm (improved PBiCGStab) is proposed. Rational preconditioned algorithm of CGS has been constructed, by applying the derivation procedure of the CGS to the preconditioned BiCG. In order to extend this approach to the BiCGStab, minimum residual part of the BiCGStab must be considered logically. This proposed algorithm is also more rational than the conventional typical PBiCGStab mathematically. Numerical results show advantages of this improved PBiCGStab.

1. はじめに

自然現象の解明や工学問題の解決では，数値シミュレーションによる解析が盛んである．ここで数値的に近似解を求めることは，多くの場合，線形方程式の求解に帰着される．大規模で非対称な係数行列を持つ線形方程式

$$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \qquad (1)$$

の求解では，前処理付き BiCGStab 法（PBiCGStab 法，Preconditioned BiCGStab method ）[17] がしばしば用いられる．PBiCGStab 法は，アルゴリズムの演算量や所要メモリ量も少なく，良好な収束性を示す．

多くの反復解法では，求解状況の改善や収束性向上のために前処理付きアルゴリズムが用いられる．クリロフ部分空間法の前処理による収束性への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[8]．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[6]．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，BiCGStab 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，実用の観点からも非常に重要である．

ところが，従来から標準的に用いられてきている前処理付き BiCGStab 法のアルゴリズムでは，不適切な前処理変換がなされている．この問題点は，CGS 法[14] に対する前処理変換に起因しており，以後，双ランチョス系の前処理付きアルゴリズムでは，同様の問題点が継承されてきている．前処理付き CGS（PCGS）法に対しては，前処理付き BiCG（PBiCG）法[2),10] から CGS 法を導出する手順に基づく合理的なアルゴリズムが提案されており[9]，PBiCGStab 法に対してもそ

†1 東京大学 情報基盤センター
Information Technology Center, The University of Tokyo
†2 日立製作所 中央研究所
Central Research Laboratory, Hitachi, Ltd.
†3 日立製作所 超 LSI システムズ
Hitachi ULSI Systems Co., Ltd.
†4 愛媛大学 大学院理工学研究科
Graduate School of Science and Engineering, Ehime University

の方法を適用したい．ところが，BiCG 法，CGS 法とBiCGStab 法との前処理変換の議論では，本質的に異なる点がある．BiCG 法と CGS 法は前処理変換の方向に対して“一致性”（本稿の中では，両側・左・右の異なる方向からの前処理変換に対し，最終的に得られるアルゴリズム記述が一致する特性を指す[5,6]）があるが，BiCGStab 法では，残差ベクトルのノルムを最小化する演算（MR 部分，Minimum Residual part）の係数を伴うため，一致性が無い．本稿では，CGS 法に対して提案した合理的な前処理変換を BiCGStab 法に適用するに当たり，一致性の観点から前処理付きアルゴリズムの構造を分析した上で，右前処理の BiCGStab 法へ拡張して適用できることを示す．

本論文の構成として，2 節では，議論の背景として PBiCG 法と PCGS 法の重要な論点である係数 α，β の導出と特徴について概説し，前処理変換方向に対する一致性について説明する．3 節では，BiCGStab 法の係数の導出と前処理系について概説し，従来から用いられている PBiCGStab 法の問題点を指摘した上で，それを改善するよう PBiCG 法に基づく合理的な改善アルゴリズムを提案する．4 節の数値実験で，従来版 PBiCGStab 法と本提案版との求解状況の違いを確認し，本提案アルゴリズムの有効性を確認する．5 節でまとめる．

2. BiCG 法と CGS 法の導出におけるポイントと前処理付きアルゴリズム

双ランチョス系統のクリロフ部分空間法は，(1) の双対系（シャドウ）として

$$A^T \boldsymbol{x}^\sharp = \boldsymbol{b}^\sharp \qquad (2)$$

を構成する BiCG 法[2,10] から発展した解法であり，BiCG 法から CGS 法[14]，さらに，MR 部分を追加した BiCGSTAB 法[17] をはじめとする様々な解法へと発展してきている（図 1）．これらのアルゴリズムでは，残差ベクトルの定義と，アルゴリズム中で用いる α，β 等の係数の定義が非常に重要である．

本節では，次節における議論の準備として，前処理無しの BiCG 法から CGS 法の導出のポイント（図 1 の「BiCG」から「CGS」への矢印）を概説し，BiCG と CGS とは等価な関係であることを示す．その上で，各々の前処理系における一致性と α，β に対する特徴について述べる（図 1 の「前処理変換 2」および「PBiCG」から「改善版 PCGS」への矢印）．

BiCGStab 法に関する従来手法である，「導出 1」と「前処理変換 1」部分，および，「導出 2」については，

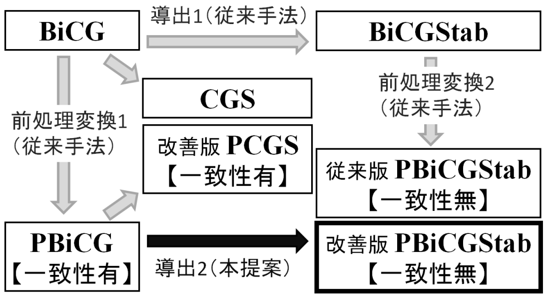

図 1 本稿で議論する双ランチョス系アルゴリズムと各々の前処理付きアルゴリズムの関係

次節にて議論する．

2.1 線形方程式求解アルゴリズムの前処理系

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系を指すこととし，“不完全コレスキー分解”や“不完全 LU”などに基づく，いわゆる，“前処理演算”とは異なる．一例として，前処理系への変換は，元の線形方程式 (1) に対し，

$$A \approx K = K_L K_R$$

の前処理行列を用い，

$$\tilde{A}\tilde{\boldsymbol{x}} = \tilde{\boldsymbol{b}}, \quad \tilde{A} \Rightarrow K_L^{-1} A K_R^{-1},$$
$$\tilde{\boldsymbol{x}} \Rightarrow K_R \boldsymbol{x}, \ \tilde{\boldsymbol{b}} \Rightarrow K_L^{-1} \boldsymbol{b} \qquad (3)$$

と変換することに相当するが，実際には (3) 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，(3) の求解と等価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．本稿では，前処理系の行列やベクトルや係数に対しては $\tilde{A}$ のように“~（チルダ）”を付して表す．特に，(3) は (1) の両側から前処理変換したものであり“両側変換”と呼ばれ，

$$K_L = K, \ K_R = I \qquad (4)$$

としたものは“左変換”（I は単位行列），

$$K_L = I, \ K_R = K \qquad (5)$$

としたものは“右変換”と呼ばれ，各々は，

$$\tilde{A} \Rightarrow K^{-1}A, \ \tilde{\boldsymbol{x}} \Rightarrow \boldsymbol{x}, \ \tilde{\boldsymbol{b}} \Rightarrow K^{-1}\boldsymbol{b},$$
$$\tilde{A} \Rightarrow AK^{-1}, \ \tilde{\boldsymbol{x}} \Rightarrow K\boldsymbol{x}, \ \tilde{\boldsymbol{b}} \Rightarrow \boldsymbol{b}$$

と，(1) を変換する[1,3,18]．

2.2 BiCG 法における着眼点

BiCG 法[2,10] 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，初期残差ベクトル $\boldsymbol{r}_0 = \boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_0$，初期シャドウ残差ベクトル $\boldsymbol{r}_0^\sharp = \boldsymbol{b}^\sharp - A^T\boldsymbol{x}_0^\sharp$ から，

$$\boldsymbol{r}_k = R_k(A)\boldsymbol{r}_0, \qquad (6)$$
$$\boldsymbol{r}_k^\sharp = R_k(A^T)\boldsymbol{r}_0^\sharp \qquad (7)$$

が双直交系を構成し，探索方向ベクトルを

$$\boldsymbol{p}_k = P_k(A)\boldsymbol{r}_0, \tag{8}$$
$$\boldsymbol{p}^\sharp_k = P_k(A^T)\boldsymbol{r}^\sharp_0 \tag{9}$$

と表して，BiCG 法は

$$\left\langle \boldsymbol{r}^\sharp_i, \boldsymbol{r}_j \right\rangle = 0 \quad (i \neq j) \quad （双直交性）, \tag{10}$$
$$\left\langle \boldsymbol{p}^\sharp_i, A\boldsymbol{p}_j \right\rangle = 0 \quad (i \neq j) \quad （双共役性） \tag{11}$$

を満たす．(6)〜(9) で示した k 次多項式は,

$$R_k(z) = R_{k-1}(z) - \alpha_{k-1} z P_{k-1}(z), \quad R_0(z) = 1,$$
$$P_k(z) = R_k(z) + \beta_{k-1} P_{k-1}(z), \quad P_0(z) = 1$$

の交代漸化式を満たす[3),10),14),15)]．ただし，実際のアルゴリズム中では，これらの多項式は用いず,

$$\boldsymbol{p}_k = \boldsymbol{r}_k + \beta_{k-1}\boldsymbol{p}_{k-1}, \quad \boldsymbol{p}^\sharp_k = \boldsymbol{r}^\sharp_k + \beta_{k-1}\boldsymbol{p}^\sharp_{k-1},$$
$$\boldsymbol{r}_{k+1} = \boldsymbol{r}_k - \alpha_k A\boldsymbol{p}_k, \quad \boldsymbol{r}^\sharp_{k+1} = \boldsymbol{r}^\sharp_k - \alpha_k A^T\boldsymbol{p}^\sharp_k$$

として記述される．(10)(11) にて $\langle \boldsymbol{u}, \boldsymbol{v} \rangle$ はスカラー積であり[4),15)]，本稿では特に，双対関係にあるベクトルどうしの積を指し，必ずしも双対関係に無い場合の内積 $(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v})$ と区別して表記する．

本稿における議論の基となる BiCG 法のアルゴリズムに現れる係数 α_k と β_k の記述を示す．

$$\alpha_k = \frac{\left\langle \boldsymbol{r}^\sharp_k, \boldsymbol{r}_k \right\rangle}{\left\langle \boldsymbol{p}^\sharp_k, A\boldsymbol{p}_k \right\rangle}, \tag{12}$$

$$\beta_k = \frac{\left\langle \boldsymbol{r}^\sharp_{k+1}, \boldsymbol{r}_{k+1} \right\rangle}{\left\langle \boldsymbol{r}^\sharp_k, \boldsymbol{r}_k \right\rangle}. \tag{13}$$

BiCG 法に対する前処理付きアルゴリズムを導出するため，次のように BiCG 法の形式的な導出を行う．まず，(1) と (2) とを一括して表現し,

$$\breve{A}\breve{\boldsymbol{x}} = \breve{\boldsymbol{b}},$$
$$\breve{A} = \begin{bmatrix} A & O \\ O & A^T \end{bmatrix}, \breve{\boldsymbol{x}} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{x} \\ \boldsymbol{x}^\sharp \end{bmatrix}, \breve{\boldsymbol{b}} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{b} \\ \boldsymbol{b}^\sharp \end{bmatrix}$$

を CG 法に適用する[13),18)]．この係数行列から次の前処理行列

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

が得られ，このとき,

$$\widetilde{\breve{A}} \Rightarrow \breve{K}_L^{-1}\breve{A}\breve{K}_R^{-1} = \begin{bmatrix} K_L^{-1}AK_R^{-1} & O \\ O & K_R^{-T}A^T K_L^{-T} \end{bmatrix}$$
$$\equiv \begin{bmatrix} \tilde{A} & O \\ O & \tilde{A}^T \end{bmatrix}, \tag{14}$$

$$\widetilde{\breve{\boldsymbol{x}}} \Rightarrow \breve{K}_R\breve{\boldsymbol{x}}, \quad \widetilde{\breve{\boldsymbol{b}}} \Rightarrow \breve{K}_L^{-1}\breve{\boldsymbol{b}}.$$

これに伴い，$\breve{\boldsymbol{p}}$ と $\breve{\boldsymbol{r}}$ は次のとおり変換される．

$$\widetilde{\breve{\boldsymbol{p}}} \Rightarrow \breve{K}_R\breve{\boldsymbol{p}} = \begin{bmatrix} K_R\boldsymbol{p} \\ K_L^T\boldsymbol{p}^\sharp \end{bmatrix}, \widetilde{\breve{\boldsymbol{r}}} \Rightarrow \breve{K}_L^{-1}\breve{\boldsymbol{r}} = \begin{bmatrix} K_L^{-1}\boldsymbol{r} \\ K_R^{-T}\boldsymbol{r}^\sharp \end{bmatrix}.$$

これらの前処理変換を基にして，線形系 (1) と双対系 (2) の各々の系に対する前処理変換を BiCG 法に適用することで PBiCG のアルゴリズムが得られる．

線形系の残差ベクトルと，双対系の残差ベクトルの前処理変換の記述は,

$$K_L^{-1}\boldsymbol{r} = K_L^{-1}\boldsymbol{b} - \left(K_L^{-1}AK_R^{-1}\right)\left(K_R\boldsymbol{x}\right), \tag{15}$$

$$K_R^{-T}\boldsymbol{r}^\sharp = K_R^{-T}\boldsymbol{b}^\sharp - \left(K_R^{-T}A^TK_L^{-T}\right)\left(K_L^T\boldsymbol{x}^\sharp\right). \tag{16}$$

これらを式変形すると次のとおり，$\boldsymbol{r}$，$\boldsymbol{r}^\sharp$ ともに前処理行列が現れず，本来の残差ベクトルの情報を保持する記述となる[⋆1]．

$$\boldsymbol{r} = \boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}, \tag{17}$$
$$\boldsymbol{r}^\sharp = \boldsymbol{b}^\sharp - A^T\boldsymbol{x}^\sharp. \tag{18}$$

この前処理系における双直交性と双共役性は,

$$\left\langle \tilde{\boldsymbol{r}}^\sharp_i, \tilde{\boldsymbol{r}}_j \right\rangle = \left\langle K_R^{-T}\boldsymbol{r}^\sharp_i, K_L^{-1}\boldsymbol{r}_j \right\rangle$$
$$= \left\langle \boldsymbol{r}^\sharp_i, K^{-1}\boldsymbol{r}_j \right\rangle = 0 \quad (i \neq j), \tag{19}$$
$$\left\langle \tilde{\boldsymbol{p}}^\sharp_i, \tilde{A}\tilde{\boldsymbol{p}}_j \right\rangle = \left\langle K_L^T\boldsymbol{p}^\sharp_i, \left(K_L^{-1}AK_R^{-1}\right)\left(K_R\boldsymbol{p}_j\right) \right\rangle$$
$$= \left\langle \boldsymbol{p}^\sharp_i, A\boldsymbol{p}_j \right\rangle = 0 \quad (i \neq j). \tag{20}$$

これらと同様に (12)(13) を前処理変換すると,

$$\alpha_k^{\mathrm{PBiCG}} = \frac{\left\langle \tilde{\boldsymbol{r}}^\sharp_k, \tilde{\boldsymbol{r}}_k \right\rangle}{\left\langle \tilde{\boldsymbol{p}}^\sharp_k, \tilde{A}\tilde{\boldsymbol{p}}_k \right\rangle} = \frac{\left\langle \boldsymbol{r}^\sharp_k, K^{-1}\boldsymbol{r}_k \right\rangle}{\left\langle \boldsymbol{p}^\sharp_k, A\boldsymbol{p}_k \right\rangle}, \tag{21}$$

$$\beta_k^{\mathrm{PBiCG}} = \frac{\left\langle \tilde{\boldsymbol{r}}^\sharp_{k+1}, \tilde{\boldsymbol{r}}_{k+1} \right\rangle}{\left\langle \tilde{\boldsymbol{r}}^\sharp_k, \tilde{\boldsymbol{r}}_k \right\rangle} = \frac{\left\langle \boldsymbol{r}^\sharp_{k+1}, K^{-1}\boldsymbol{r}_{k+1} \right\rangle}{\left\langle \boldsymbol{r}^\sharp_k, K^{-1}\boldsymbol{r}_k \right\rangle}. \tag{22}$$

(21)(22) に，左前処理変換 (4) や右前処理変換 (5) を適用した場合でも，最終的に得られる $\alpha_k^{\mathrm{PBiCG}}$，$\beta_k^{\mathrm{PBiCG}}$ は同一であるので前処理変換の方向に対する一致性がある．

2.3 CGS 法における着眼点

CGS 法は，BiCG 法に現れる A^T を用いぬよう BiCG の中の変数を変換して得られた解法である[14)]．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 (6)(7)，および，探索方向ベクトルの多項式表現 (8)(9) を BiCG の α_k と β_k の演算に代入し,

⋆1 本稿では，線形系 (1) において $\tilde{\boldsymbol{r}} \Rightarrow \boldsymbol{r} = K^{-1}(\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x})$ など，前処理行列により残差ベクトルの情報が異なる系[5)–7)] については議論しない．

$$\left\langle \boldsymbol{r}_k^\sharp, \boldsymbol{r}_k \right\rangle = \left\langle R_k(A^T)\boldsymbol{r}_0^\sharp, R_k(A)\boldsymbol{r}_0 \right\rangle = \left\langle \boldsymbol{r}_0^\sharp, R_k^2(A)\boldsymbol{r}_0 \right\rangle, \quad (23)$$

$$\left\langle \boldsymbol{p}_k^\sharp, A\boldsymbol{p}_k \right\rangle = \left\langle P_k(A^T)\boldsymbol{r}_0^\sharp, AP_k(A)\boldsymbol{r}_0 \right\rangle = \left\langle \boldsymbol{r}_0^\sharp, AP_k^2(A)\boldsymbol{r}_0 \right\rangle. \quad (24)$$

ここで，

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

とおくと，

$$\alpha_k^{\rm BiCG} = \frac{\left\langle \boldsymbol{r}_k^\sharp, \boldsymbol{r}_k \right\rangle}{\left\langle \boldsymbol{p}_k^\sharp, A\boldsymbol{p}_k \right\rangle} \equiv \frac{\left\langle \boldsymbol{r}_0^\sharp, \boldsymbol{r}_k^{\rm CGS} \right\rangle}{\left\langle \boldsymbol{r}_0^\sharp, A\boldsymbol{p}_k^{\rm CGS} \right\rangle} = \alpha_k^{\rm CGS}, \quad (25)$$

$$\beta_k^{\rm BiCG} = \frac{\left\langle \boldsymbol{r}_{k+1}^\sharp, \boldsymbol{r}_{k+1} \right\rangle}{\left\langle \boldsymbol{r}_k^\sharp, \boldsymbol{r}_k \right\rangle} \equiv \frac{\left\langle \boldsymbol{r}_0^\sharp, \boldsymbol{r}_{k+1}^{\rm CGS} \right\rangle}{\left\langle \boldsymbol{r}_0^\sharp, \boldsymbol{r}_k^{\rm CGS} \right\rangle} = \beta_k^{\rm CGS} \quad (26)$$

が得られる．つまり，BiCG と CGS に現れる係数 α_k と β_k は，式変形と変数の置き換えによる等価（≡）な関係である．

CGS に現れるその他のベクトルも，(6)(8) を用いた式変形により導出される．

2.3.1 従来の PCGS における問題点

CGS に対し従来から用いられている前処理変換は，

$$\tilde{A} \Rightarrow K_L^{-1}AK_R^{-1}, \ \tilde{\boldsymbol{x}} \Rightarrow K_R\boldsymbol{x}, \ \tilde{\boldsymbol{b}} \Rightarrow K_L^{-1}\boldsymbol{b}, \ \tilde{\boldsymbol{p}}^{\rm CGS} \Rightarrow K_L^{-1}\boldsymbol{p}^{\rm CGS}, \ \tilde{\boldsymbol{r}}^{\rm CGS} \Rightarrow K_L^{-1}\boldsymbol{r}^{\rm CGS}, \ \tilde{\boldsymbol{r}}_0^\sharp \Rightarrow K_L^T\boldsymbol{r}_0^\sharp \quad (27)$$

であり，CGS 中の係数 α_k の前処理変換は

$$\frac{\left\langle \tilde{\boldsymbol{r}}_0^\sharp, \tilde{\boldsymbol{r}}_k^{\rm CGS} \right\rangle}{\left\langle \tilde{\boldsymbol{r}}_0^\sharp, \tilde{A}\tilde{\boldsymbol{p}}_k^{\rm CGS} \right\rangle} = \frac{\left\langle K_L^T\boldsymbol{r}_0^\sharp, K_L^{-1}\boldsymbol{r}_k^{\rm CGS} \right\rangle}{\left\langle K_L^T\boldsymbol{r}_0^\sharp, \left(K_L^{-1}AK_R^{-1}\right)\left(K_L^{-1}\boldsymbol{p}_k^{\rm CGS}\right) \right\rangle} = \frac{\left\langle \boldsymbol{r}_0^\sharp, \boldsymbol{r}_k^{\rm CGS} \right\rangle}{\left\langle \boldsymbol{r}_0^\sharp, AK^{-1}\boldsymbol{p}_k^{\rm CGS} \right\rangle} \quad (28)$$

である[1),3),17)]．この分子から CGS の β_k も同様に変換できる．(4)(5) を適用し，左・右前処理変換した場合でも最終的に (28) であるので一致性がある．

ところが，(27) による双対系の残差ベクトルとは，

$$K_L^T\boldsymbol{r}^\sharp = K_R^{-T}\boldsymbol{b}^\sharp - \left(K_R^{-T}A^TK_L^{-T}\right)\left(K_L^T\boldsymbol{x}^\sharp\right)$$

である．これを式変形すると，

$$\boldsymbol{r}^\sharp = K^{-T}\left(\boldsymbol{b}^\sharp - A^T\boldsymbol{x}^\sharp\right) \quad (29)$$

となり，双対系の本来の残差ベクトル (18) と比べて，K^{-T} が作用している．この点では，前処理付き BiCG との等価な関係が成り立っていない．

表 1 各前処理付きアルゴリズムに表れる係数の一致性

	α	β	ω
PBiCG	○	○	−
PCGS	○	○	−
PBiCGStab	○	△	×

○：一致性有，×：一致性無，△：広義の一致性有（一致性無の係数 ω を伴う），−：アルゴリズム中に存在しない係数

一方で，(18) となるよう双対系の方程式を前処理変換すると，

$$K_L^T\boldsymbol{r}^\sharp = K_L^T\boldsymbol{b}^\sharp - \left(K_L^TA^TX\right)\left(X^{-1}\boldsymbol{x}^\sharp\right) \quad (30)$$

であり[⋆1]，この係数行列は (14) で示した $\tilde{A}^T$ とは異なる．このとき，前処理系において (23)(24) の式変形が成立しない．したがって，$\alpha_k^{\rm PBiCG} \not\equiv \alpha_k^{\rm PCGS}$, $\beta_k^{\rm PBiCG} \not\equiv \beta_k^{\rm PCGS}$ であるため，前処理無しのときの (25)(26) の性質を有していない[9)]．

2.3.2 PCGS 導出に対する改善

これに対し，PBiCG 自体に CGS 導出の手順を適用するときの前処理変換は，

$$\tilde{A} \Rightarrow K_L^{-1}AK_R^{-1}, \ \tilde{\boldsymbol{x}} \Rightarrow K_R\boldsymbol{x}, \ \tilde{\boldsymbol{b}} \Rightarrow K_L^{-1}\boldsymbol{b}, \ \tilde{\boldsymbol{p}}^{\rm CGS} \Rightarrow K_R\boldsymbol{p}^{\rm CGS}, \ \tilde{\boldsymbol{r}}^{\rm CGS} \Rightarrow K_L^{-1}\boldsymbol{r}^{\rm CGS}, \ \tilde{\boldsymbol{r}}_0^\sharp \Rightarrow K_R^{-T}\boldsymbol{r}_0^\sharp \quad (31)$$

である[9)]．このとき，双対系の残差ベクトルは，

$$K_R^{-T}\boldsymbol{r}^\sharp = K_R^{-T}\boldsymbol{b}^\sharp - \left(K_R^{-T}A^TK_L^{-T}\right)\left(K_L^T\boldsymbol{x}^\sharp\right)$$

であり，(18) の関係を満たし，かつ，係数行列は $\tilde{A}^T$ である．(31) を (25)(26) の前処理系に代入すると，

$$\alpha_k^{\rm PBiCG} = \frac{\left\langle \tilde{\boldsymbol{r}}_k^\sharp, \tilde{\boldsymbol{r}}_k \right\rangle}{\left\langle \tilde{\boldsymbol{p}}_k^\sharp, \tilde{A}\tilde{\boldsymbol{p}}_k \right\rangle} \equiv \frac{\left\langle \tilde{\boldsymbol{r}}_0^\sharp, \tilde{\boldsymbol{r}}_k^{\rm CGS} \right\rangle}{\left\langle \tilde{\boldsymbol{r}}_0^\sharp, \tilde{A}\tilde{\boldsymbol{p}}_k^{\rm CGS} \right\rangle} = \frac{\left\langle K_R^{-T}\boldsymbol{r}_0^\sharp, K_L^{-1}\boldsymbol{r}_k^{\rm CGS} \right\rangle}{\left\langle K_R^{-T}\boldsymbol{r}_0^\sharp, (K_L^{-1}AK_R^{-1})(K_R\boldsymbol{p}_k^{\rm CGS}) \right\rangle} = \frac{\left\langle \boldsymbol{r}_0^\sharp, K^{-1}\boldsymbol{r}_k^{\rm CGS} \right\rangle}{\left\langle \boldsymbol{r}_0^\sharp, K^{-1}A\boldsymbol{p}_k^{\rm CGS} \right\rangle} = \alpha_k^{\rm PCGS}$$

であり，(21) とも等価の関係であり合理的である．この分子を用いて $\beta_k^{\rm PBiCG} \equiv \beta_k^{\rm PCGS}$ である．これらの前処理変換も一致性を有する．

3. 前処理付き BiCGStab 法の問題点を改善したアルゴリズムの提案

前節にて確認した PBiCG と PCGS，および，本節で議論する PBiCGStab のアルゴリズムに現れる係数の特性をまとめたものが表 1 である．

⋆1 X は $\boldsymbol{r}^\sharp \Rightarrow K_L^T\boldsymbol{r}^\sharp$ を満たすよう導出すると，一例として，$X = K^{-T}K_L^{-T}$ である[9)]．

PBiCG と PCGS は "一致性" ((3)(4)(5) の各前処理変換に対し，最終的に得られる演算の記述が一致する特性[5),6)]）を有することに対し，PBiCGStab に現れる係数では一致性を有していない．また，PBiCG と PCGS の α と β には等価の関係があったが，PBiCGStab には新たに一致性の無い係数 ω が現れる．このようなことに注目し，PBiCGStab を分析の上，改善アルゴリズムを提案する．

3.1 BiCGStab 法における着眼点

BiCGStab 法では，係数 ω を有する多項式

$$S_k(z) = (1-\omega_{k-1}z)(1-\omega_{k-2}z)\cdots(1-\omega_0 z) \tag{32}$$

を用いる．ここで，BiCGStab のシャドウ残差ベクトルでは $S_k(A^T)$ を用いて，$\boldsymbol{s}_k^\sharp = S_k(A^T)\boldsymbol{r}_0^\sharp$ を生成し，BiCG の $\boldsymbol{r}_k^\sharp$ の代わりに用いる．(32) を展開し，$\boldsymbol{s}_k^\sharp$ は，

$$\boldsymbol{s}_k^\sharp = \frac{\mathrm{lc}(S_k)}{\mathrm{lc}(R_k)}\left(\boldsymbol{r}_k^\sharp + d_{k-1}\boldsymbol{r}_{k-1}^\sharp + \cdots + d_1\boldsymbol{r}_1^\sharp + d_0\boldsymbol{r}_0^\sharp\right) \tag{33}$$

と表せる⋆1．記号 lc とは，"leading coefficient，多項式の最高次係数" の略であり，

$$\frac{\mathrm{lc}(R_{k+1})}{\mathrm{lc}(R_k)} = -\alpha_k,\quad \frac{\mathrm{lc}(S_{k+1})}{\mathrm{lc}(S_k)} = -\omega_k$$

の関係である．

BiCG からの導出は，次のとおり，(33) と $\boldsymbol{r}_k$ とのスカラー積に対し，双直交性 (10) を適用すると，

$$\begin{aligned}\left\langle \boldsymbol{s}_k^\sharp, \boldsymbol{r}_k\right\rangle &= \frac{\mathrm{lc}(S_k)}{\mathrm{lc}(R_k)}\left\langle \boldsymbol{r}_k^\sharp + d_{k-1}\boldsymbol{r}_{k-1}^\sharp + \cdots + d_1\boldsymbol{r}_1^\sharp + d_0\boldsymbol{r}_0^\sharp, \boldsymbol{r}_k\right\rangle \\ &= \frac{\mathrm{lc}(S_k)}{\mathrm{lc}(R_k)}\left\langle \boldsymbol{r}_k^\sharp, \boldsymbol{r}_k\right\rangle \equiv \frac{1}{c_k}\left\langle \boldsymbol{r}_k^\sharp, \boldsymbol{r}_k\right\rangle\end{aligned}$$

の関係である．したがって，

$$\begin{aligned}\left\langle \boldsymbol{r}_k^\sharp, \boldsymbol{r}_k\right\rangle &= c_k\left\langle \boldsymbol{s}_k^\sharp, \boldsymbol{r}_k\right\rangle \\ &= c_k\left\langle S_k(A^T)\boldsymbol{r}_0^\sharp, R_k(A)\boldsymbol{r}_0\right\rangle \\ &= c_k\left\langle \boldsymbol{r}_0^\sharp, S_k(A)R_k(A)\boldsymbol{r}_0\right\rangle.\end{aligned} \tag{34}$$

次に，BiCG のアルゴリズム記述 $\boldsymbol{p}_k^\sharp = \boldsymbol{r}_k^\sharp + \beta_{k-1}\boldsymbol{p}_{k-1}^\sharp$ と (11) から，

$$\begin{aligned}\left\langle \boldsymbol{p}_k^\sharp, A\boldsymbol{p}_k\right\rangle &= \left\langle \boldsymbol{r}_k^\sharp, A\boldsymbol{p}_k\right\rangle + \beta_{k-1}\left\langle \boldsymbol{p}_{k-1}^\sharp, A\boldsymbol{p}_k\right\rangle \\ &= \left\langle \boldsymbol{r}_k^\sharp, A\boldsymbol{p}_k\right\rangle\end{aligned} \tag{35}$$

および，$\left\langle \boldsymbol{r}_i^\sharp, A\boldsymbol{p}_j\right\rangle = \left\langle \boldsymbol{p}_i^\sharp - \beta_{i-1}\boldsymbol{p}_{i-1}^\sharp, A\boldsymbol{p}_j\right\rangle = 0\ (i \neq j)$ であるので，$\boldsymbol{s}_k^\sharp$ と $A\boldsymbol{p}_k$ とのスカラー積に対し (33) を適用し式変形すると，最終的に

$$\begin{aligned}\left\langle \boldsymbol{r}_k^\sharp, A\boldsymbol{p}_k\right\rangle &= c_k\left\langle \boldsymbol{s}_k^\sharp, A\boldsymbol{p}_k\right\rangle \\ &= c_k\left\langle S_k(A^T)\boldsymbol{r}_0^\sharp, AP_k(A)\boldsymbol{r}_0\right\rangle \\ &= c_k\left\langle \boldsymbol{r}_0^\sharp, AS_k(A)P_k(A)\boldsymbol{r}_0\right\rangle.\end{aligned} \tag{36}$$

ここで，

$$\boldsymbol{r}_k^{\mathrm{STAB}} \equiv S_k(A)R_k(A)\boldsymbol{r}_0, \tag{37}$$

$$\boldsymbol{p}_k^{\mathrm{STAB}} \equiv S_k(A)P_k(A)\boldsymbol{r}_0 \tag{38}$$

とおくと，(34) 〜(36) により

$$\alpha_k^{\mathrm{BiCG}} = \frac{\left\langle \boldsymbol{r}_k^\sharp, \boldsymbol{r}_k\right\rangle}{\left\langle \boldsymbol{p}_k^\sharp, A\boldsymbol{p}_k\right\rangle} \equiv \frac{\left\langle \boldsymbol{r}_0^\sharp, \boldsymbol{r}_k^{\mathrm{STAB}}\right\rangle}{\left\langle \boldsymbol{r}_0^\sharp, A\boldsymbol{p}_k^{\mathrm{STAB}}\right\rangle} = \alpha_k^{\mathrm{STAB}}, \tag{39}$$

$$\beta_k^{\mathrm{BiCG}} = \frac{\left\langle \boldsymbol{r}_{k+1}^\sharp, \boldsymbol{r}_{k+1}\right\rangle}{\left\langle \boldsymbol{r}_k^\sharp, \boldsymbol{r}_k\right\rangle} \equiv \frac{\alpha_k}{\omega_k} \times \frac{\left\langle \boldsymbol{r}_0^\sharp, \boldsymbol{r}_{k+1}^{\mathrm{STAB}}\right\rangle}{\left\langle \boldsymbol{r}_0^\sharp, \boldsymbol{r}_k^{\mathrm{STAB}}\right\rangle} = \beta_k^{\mathrm{STAB}} \tag{40}$$

であり，BiCG と BiCGStab の係数 α_k と β_k も，式変形と変数の置き換えによる等価な関係である[15)]．

ところが，CGS とは異なり，(40) は

$$\omega_k = \frac{(A\boldsymbol{s}_k, \boldsymbol{s}_k)}{(A\boldsymbol{s}_k, A\boldsymbol{s}_k)} \tag{41}$$

という係数を伴う．ここで $(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v})$ は内積であり，前述のとおり，BiCG と CGS がスカラー積 $\langle \boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}\rangle$ のみで構成されることに対する大きな相違点である．この係数 (41) は BiCGStab の中で $||\boldsymbol{r}_{k+1}^{\mathrm{STAB}}||$ を最小化する演算（MR 演算）を構成する．ここで，

$$\boldsymbol{r}_{k+1}^{\mathrm{STAB}} = \boldsymbol{s}_k - \omega_k A\boldsymbol{s}_k. \tag{42}$$

BiCGStab に現れるその他のベクトルは，(37)(38) を用いた式変形により導出される．

BiCGStab に対して従来から用いられている前処理変換は，

$$\begin{aligned}&\tilde{A} \Rightarrow K_L^{-1}AK_R^{-1},\ \tilde{\boldsymbol{x}} \Rightarrow K_R\boldsymbol{x},\ \tilde{\boldsymbol{b}} \Rightarrow K_L^{-1}\boldsymbol{b}, \\ &\tilde{\boldsymbol{p}}^{\mathrm{STAB}} \Rightarrow K_L^{-1}\boldsymbol{p}^{\mathrm{STAB}},\ \tilde{\boldsymbol{s}} \Rightarrow K_L^{-1}\boldsymbol{s}, \\ &\tilde{\boldsymbol{r}}^{\mathrm{STAB}} \Rightarrow K_L^{-1}\boldsymbol{r}^{\mathrm{STAB}},\ \tilde{\boldsymbol{r}}_0^\sharp \Rightarrow K_L^T\boldsymbol{r}_0^\sharp\end{aligned} \tag{43}$$

であり[3),17)]，このとき α_k の前処理変換は

$$\begin{aligned}\frac{\left\langle \tilde{\boldsymbol{r}}_0^\sharp, \tilde{\boldsymbol{r}}_k^{\mathrm{STAB}}\right\rangle}{\left\langle \tilde{\boldsymbol{r}}_0^\sharp, \tilde{A}\tilde{\boldsymbol{p}}_k^{\mathrm{STAB}}\right\rangle} &= \frac{\left\langle K_L^T\boldsymbol{r}_0^\sharp, K_L^{-1}\boldsymbol{r}_k^{\mathrm{STAB}}\right\rangle}{\left\langle K_L^T\boldsymbol{r}_0^\sharp, \left(K_L^{-1}AK_R^{-1}\right)\left(K_L^{-1}\boldsymbol{p}_k^{\mathrm{STAB}}\right)\right\rangle} \\ &= \frac{\left\langle \boldsymbol{r}_0^\sharp, \boldsymbol{r}_k^{\mathrm{STAB}}\right\rangle}{\left\langle \boldsymbol{r}_0^\sharp, AK^{-1}\boldsymbol{p}_k^{\mathrm{STAB}}\right\rangle} \equiv \alpha_k^{\mathrm{PSTAB}}\end{aligned} \tag{44}$$

であるため，PCGS の場合と同様，一致性がある．

ω_k の前処理変換については，

$$\tilde{\omega}_k = \frac{\left(\tilde{A}\tilde{\boldsymbol{s}}_k, \tilde{\boldsymbol{s}}_k\right)}{\left(\tilde{A}\tilde{\boldsymbol{s}}_k, \tilde{A}\tilde{\boldsymbol{s}}_k\right)} \tag{45}$$

であり，(4)(5) の前処理変換の方向に関して一致性が

⋆1 括弧内の係数 $d_i\ (i = k-1, \cdots, 0)$ は，各 $\boldsymbol{r}_i^\sharp$ の係数を $\mathrm{lc}(S_k)/\mathrm{lc}(R_k)$ で割ったものであるが，$\boldsymbol{r}_k^\sharp$ 以外の項は，双直交性 (10) と双共役性 (11) により考慮する必要は無いため，特に定式化しない．

無い．なぜならば，(42) の前処理系

$$\tilde{\boldsymbol{r}}^{\mathrm{STAB}}_{k+1} = \tilde{\boldsymbol{s}}_k - \tilde{\omega}_k \tilde{A}\tilde{\boldsymbol{s}}_k \tag{46}$$

の両側 (b)・左 (l)・右 (r) 方向の前処理変換は,

$$K_L^{-1}\boldsymbol{r}^{\mathrm{STAB}}_{k+1} = K_L^{-1}\boldsymbol{s}_k - \tilde{\omega}^{\mathrm{b}}_k \left(K_L^{-1}AK_R^{-1}\right)\left(K_L^{-1}\boldsymbol{s}_k\right), \tag{47}$$

$$K^{-1}\boldsymbol{r}^{\mathrm{STAB}}_{k+1} = K^{-1}\boldsymbol{s}_k - \tilde{\omega}^{\mathrm{l}}_k \left(K^{-1}A\right)\left(K^{-1}\boldsymbol{s}_k\right), \tag{48}$$

$$\boldsymbol{r}^{\mathrm{STAB}}_{k+1} = \boldsymbol{s}_k - \tilde{\omega}^{\mathrm{r}}_k \left(AK^{-1}\right)\boldsymbol{s}_k \tag{49}$$

であり，各々に対応する $\tilde{\omega}_k$ を素直に求めると，

$$\tilde{\omega}^{\mathrm{b}}_k = \frac{\left(K_L^{-1}AK^{-1}\boldsymbol{s}_k, K_L^{-1}\boldsymbol{s}_k\right)}{\left(K_L^{-1}AK^{-1}\boldsymbol{s}_k, K_L^{-1}AK^{-1}\boldsymbol{s}_k\right)},$$

$$\tilde{\omega}^{\mathrm{l}}_k = \frac{\left(K^{-1}AK^{-1}\boldsymbol{s}_k, K^{-1}\boldsymbol{s}_k\right)}{\left(K^{-1}AK^{-1}\boldsymbol{s}_k, K^{-1}AK^{-1}\boldsymbol{s}_k\right)},$$

$$\tilde{\omega}^{\mathrm{r}}_k = \frac{\left(AK^{-1}\boldsymbol{s}_k, \boldsymbol{s}_k\right)}{\left(AK^{-1}\boldsymbol{s}_k, AK^{-1}\boldsymbol{s}_k\right)}$$

となるからである．あるいは，(45) に対し，直接，両側・左・右前処理変換を適用しても同じである．

(47)〜(49) は前処理変換にかかる冗長な演算を有しており，式変形によりそれらを消去し，$\tilde{\omega}^{\mathrm{b}}_k$，$\tilde{\omega}^{\mathrm{l}}_k$，$\tilde{\omega}^{\mathrm{r}}_k$ を単に “前処理変換された ω_k” として広義に捉え，$\tilde{\omega}_k$ と記述すると，最終的に (47)〜(49) は，いづれも

$$\boldsymbol{r}^{\mathrm{STAB}}_{k+1} = \boldsymbol{s}_k - \tilde{\omega}_k \left(AK^{-1}\right)\boldsymbol{s}_k \tag{50}$$

となる（広義の一致性がある）．しかしながら，$\tilde{\omega}^{\mathrm{b}}_k$，$\tilde{\omega}^{\mathrm{l}}_k$，$\tilde{\omega}^{\mathrm{r}}_k$ 自体は，同様の式変形を行っても同一の記述とはならない（一致性が無い）．

β^{PSTAB}_k については，$\tilde{\omega}_k$ を伴うため，狭義には両側・左・右前処理変換に対する一致性は無いものの，広義に捉えると一致性がある（表 1 では△）．

PBiCGStab に現れるその他のベクトルの演算についても，$\tilde{\omega}_k$ を広義に捉えると，前処理変換の方向によらず一致性を有する．つまり，PBiCGStab において広義の一致性の無い演算は，MR 演算の $\tilde{\omega}^{\mathrm{b}}_k$，$\tilde{\omega}^{\mathrm{l}}_k$，$\tilde{\omega}^{\mathrm{r}}_k$ のみである．

3.2 従来の前処理付き BiCGStab 法のアルゴリズム

通常，$\tilde{\omega}_k$ では，前処理変換された残差ベクトル (47)〜(49) の中から，$||\boldsymbol{r}^{\mathrm{STAB}}_{k+1}||$ 自体を最小化して，前処理演算に関する不要な計算が生じ無い右変換 (5) を適用する[18)]．

線形方程式 (1) を右前処理変換すると

$$(AK^{-1})(K\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{b}. \tag{51}$$

これに基づき，従来から用いられている典型的な前処理付き BiCGStab 法[1),3),17),18)] は，(43) に対し，次のとおり右前処理変換が施されたものである．

$$\tilde{\boldsymbol{p}}^{\mathrm{STAB}} \Rightarrow \boldsymbol{p}^{\mathrm{STAB}},\ \tilde{\boldsymbol{s}} \Rightarrow \boldsymbol{s},\ \tilde{\boldsymbol{r}}^{\mathrm{STAB}} \Rightarrow \boldsymbol{r}^{\mathrm{STAB}},\ \tilde{\boldsymbol{r}}^{\sharp}_0 \Rightarrow \boldsymbol{r}^{\sharp}_0. \tag{52}$$

このとき得られる前処理付き BiCGStab 法のアルゴリズム（従来版）は次のとおりである[⋆1]．本稿でのアルゴリズム記述は文献 3) にならった．また，本節の記述では，一つのアルゴリズムに閉じているため，前処理変換の議論にて用いた “˜（チルダ）” や右上の “STAB” 等の記号は表記していない．

Algorithm 1. **前処理付き** BiCGStab **法（従来版）**:
$\boldsymbol{x}_0,\ \boldsymbol{r}_0 = \boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_0,$
$\left\langle \boldsymbol{r}^{\sharp}_0, \boldsymbol{r}_0 \right\rangle \neq 0,\ e.g.,\boldsymbol{r}^{\sharp}_0 = \boldsymbol{r}_0, \beta_{-1} = 0,$
For $k = 0, 1, 2, \cdots$, until convergence, Do:

$$\boldsymbol{p}_k = \boldsymbol{r}_k + \beta_{k-1}(\boldsymbol{p}_{k-1} - \omega_{k-1}AK^{-1}\boldsymbol{p}_{k-1}),$$

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

$$\boldsymbol{s}_k = \boldsymbol{r}_k - \alpha_k AK^{-1}\boldsymbol{p}_k,$$

$$\omega_k = \frac{(AK^{-1}\boldsymbol{s}_k, \boldsymbol{s}_k)}{(AK^{-1}\boldsymbol{s}_k, AK^{-1}\boldsymbol{s}_k)},$$

$$\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{x}_k + \alpha_k K^{-1}\boldsymbol{p}_k + \omega_k K^{-1}\boldsymbol{s}_k,$$

$$\boldsymbol{r}_{k+1} = \boldsymbol{s}_k - \omega_k AK^{-1}\boldsymbol{s}_k,$$

$$\beta_k = \frac{\alpha_k}{\omega_k} \times \frac{\langle \boldsymbol{r}^{\sharp}_0, \boldsymbol{r}_{k+1} \rangle}{\langle \boldsymbol{r}^{\sharp}_0, \boldsymbol{r}_k \rangle},$$

End Do

Alg.1 の反復部分における前処理演算は $K^{-1}\boldsymbol{p}_k$ と $K^{-1}\boldsymbol{s}_k$ の 2 つである．

3.3 従来のアルゴリズムの問題点とそれに対する改善

一方，BiCGStab 法をはじめとする “双ランチョス系統” のアルゴリズムでは，線形方程式 (1) に対する双対系を元にアルゴリズムが構築されている．ここで，双対系の方程式 (2) に対し両側から前処理を施したものは，BiCG の前処理変換 (14) 〜(16) のとおりであり，これらに対応する右変換は，

$$(K^{-T}A^T)\boldsymbol{x}^{\sharp} = K^{-T}\boldsymbol{b}^{\sharp} \tag{53}$$

と表される．ここで，PBiCG は一致性があるため，どの方向から変換しても得られる前処理付きアルゴリズムは同一である．(53) の残差ベクトルは，

⋆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)，7) などがある．特に文献 7) の研究から派生して，文献 5)，6)，9) などは，本稿の議論に至った先行研究でもある．

表 2 BiCGStab の前処理変換

方程式	前処理変換 残差ベクトル	前処理変換 係数行列	残差ベクトルの情報
線形	$\boldsymbol{r}$	○:AK^{-1}	○:$\boldsymbol{r}=\boldsymbol{b}-A\boldsymbol{x}$
双対	$K^{-T}\boldsymbol{r}^\sharp$	○:$K^{-T}A^T$	○:$\boldsymbol{r}^\sharp=\boldsymbol{b}^\sharp-A^T\boldsymbol{x}^\sharp$
	$\boldsymbol{r}^\sharp$	○:$K^{-T}A^T$	×:$\boldsymbol{r}^\sharp=K^{-T}\left(\boldsymbol{b}^\sharp-A^T\boldsymbol{x}^\sharp\right)$
	$\boldsymbol{r}^\sharp$	×:A^TK^{-T}	○:$\boldsymbol{r}^\sharp=\boldsymbol{b}^\sharp-A^T\boldsymbol{x}^\sharp$

「係数行列の前処理変換」欄と「残差ベクトルの情報」欄の記号：
○：適切，×：不適切

$$K^{-T}\boldsymbol{r}^\sharp=K^{-T}\boldsymbol{b}^\sharp-(K^{-T}A^T)\boldsymbol{x}^\sharp \tag{54}$$

である．つまり,（初期）シャドウ残差ベクトルに対する前処理変換が,

$$\tilde{\boldsymbol{r}}^\sharp \Rightarrow K^{-T}\boldsymbol{r}^\sharp \tag{55}$$

であれば，(18) の関係を満たす．ところが，従来の前処理変換 (52) に基づくと,

$$\tilde{\boldsymbol{r}}^\sharp \Rightarrow \boldsymbol{r}^\sharp \tag{56}$$

であり,（初期）シャドウ残差ベクトルは (29) の関係に帰着されてしまう．

(55) の変換と (56) との比較を表 2 としてまとめた．特に双対系の係数行列を A^TK^{-T} と変換した場合（表の最下行）には，前処理系における (34) (36) の $S_k(A^T)$ に関する式変形ができない．つまり，多項式 $S_k(z)$ の係数は ω のみが関与しているにも関わらず，$\alpha_k^{\mathrm{PBiCG}}\neq\alpha_k^{\mathrm{PSTAB}}$，$\beta_k^{\mathrm{PBiCG}}\neq\beta_k^{\mathrm{PSTAB}}$ である．

適切な変換 (55) は，双ランチョス系統の前処理付きアルゴリズム全般に適用でき，これまで，CGS 法の場合を取り上げて議論されてきた[6),9)]．特に CGS 法の議論では，前処理変換の方向に対する“一致性”や α_k，β_k が等価となることが特徴である．そこで提案された前処理変換を (51) のとおり右前処理変換された方程式の下，BiCGStab 法に適用すると,

$$\tilde{\boldsymbol{p}}^{\mathrm{STAB}}\Rightarrow K\boldsymbol{p}^{\mathrm{STAB}},\ \tilde{\boldsymbol{s}}\Rightarrow\boldsymbol{s},\ \tilde{\boldsymbol{r}}^{\mathrm{STAB}}\Rightarrow\boldsymbol{r}^{\mathrm{STAB}},\ \tilde{\boldsymbol{r}}_0^\sharp\Rightarrow K^{-T}\boldsymbol{r}_0^\sharp \tag{57}$$

である．これらを (39)(40) の前処理系に代入すると,

$$\begin{aligned}\alpha_k^{\mathrm{PBiCG}}&=\frac{\left\langle\tilde{\boldsymbol{r}}_k^\sharp,\tilde{\boldsymbol{r}}_k\right\rangle}{\left\langle\tilde{\boldsymbol{p}}_k^\sharp,\tilde{A}\tilde{\boldsymbol{p}}_k\right\rangle}\equiv\frac{\left\langle\tilde{\boldsymbol{r}}_0^\sharp,\tilde{\boldsymbol{r}}_k^{\mathrm{STAB}}\right\rangle}{\left\langle\tilde{\boldsymbol{r}}_0^\sharp,\tilde{A}\tilde{\boldsymbol{p}}_k^{\mathrm{STAB}}\right\rangle}\\&=\frac{\left\langle K^{-T}\boldsymbol{r}_0^\sharp,\boldsymbol{r}_k^{\mathrm{STAB}}\right\rangle}{\left\langle K^{-T}\boldsymbol{r}_0^\sharp,(AK^{-1})(K\boldsymbol{p}_k^{\mathrm{STAB}})\right\rangle}\\&=\frac{\left\langle\boldsymbol{r}_0^\sharp,K^{-1}\boldsymbol{r}_k^{\mathrm{STAB}}\right\rangle}{\left\langle\boldsymbol{r}_0^\sharp,K^{-1}A\boldsymbol{p}_k^{\mathrm{STAB}}\right\rangle}\\&=\alpha_k^{\mathrm{PSTAB}},\end{aligned} \tag{58}$$

$$\begin{aligned}\beta_k^{\mathrm{PBiCG}}&=\frac{\left\langle\tilde{\boldsymbol{r}}_{k+1}^\sharp,\tilde{\boldsymbol{r}}_{k+1}\right\rangle}{\left\langle\tilde{\boldsymbol{r}}_k^\sharp,\tilde{\boldsymbol{r}}_k\right\rangle}\equiv\frac{\tilde{\alpha}_k}{\tilde{\omega}_k}\times\frac{\left\langle\tilde{\boldsymbol{r}}_0^\sharp,\tilde{\boldsymbol{r}}_{k+1}^{\mathrm{STAB}}\right\rangle}{\left\langle\tilde{\boldsymbol{r}}_0^\sharp,\tilde{\boldsymbol{r}}_k^{\mathrm{STAB}}\right\rangle}\\&=\frac{\tilde{\alpha}_k}{\tilde{\omega}_k}\times\frac{\left\langle K^{-T}\boldsymbol{r}_0^\sharp,\boldsymbol{r}_{k+1}^{\mathrm{STAB}}\right\rangle}{\left\langle K^{-T}\boldsymbol{r}_0^\sharp,\boldsymbol{r}_k^{\mathrm{STAB}}\right\rangle}\\&=\frac{\tilde{\alpha}_k}{\tilde{\omega}_k}\times\frac{\left\langle\boldsymbol{r}_0^\sharp,K^{-1}\boldsymbol{r}_{k+1}^{\mathrm{STAB}}\right\rangle}{\left\langle\boldsymbol{r}_0^\sharp,K^{-1}\boldsymbol{r}_k^{\mathrm{STAB}}\right\rangle}\\&=\beta_k^{\mathrm{PSTAB}}\end{aligned} \tag{59}$$

であり，前処理付き BiCGStab においても，α_k，β_k が前処理付き BiCG の (21)(22) とも等価の関係であることが分かる．このとき，次に示す前処理付き BiCGStab アルゴリズム（改善版）が得られる．

Algorithm 2. **前処理付き** BiCGStab **法（改善版）**:
$\boldsymbol{x}_0,\ \boldsymbol{r}_0=\boldsymbol{b}-A\boldsymbol{x}_0,$
$\left\langle K^{-T}\boldsymbol{r}_0^\sharp,\boldsymbol{r}_0\right\rangle\neq0,\ e.g.,\boldsymbol{r}_0^\sharp=K^{-1}\boldsymbol{r}_0,\ \beta_{-1}=0,$
For $k=0,1,2,\cdots$, until convergence, Do:

$$\boldsymbol{p}_k=K^{-1}\boldsymbol{r}_k+\beta_{k-1}\left(\boldsymbol{p}_{k-1}-\omega_{k-1}K^{-1}A\boldsymbol{p}_{k-1}\right),$$

$$\alpha_k=\frac{\langle\boldsymbol{r}_0^\sharp,K^{-1}\boldsymbol{r}_k\rangle}{\langle\boldsymbol{r}_0^\sharp,K^{-1}A\boldsymbol{p}_k\rangle}, \tag{60}$$

$$\boldsymbol{s}_k=\boldsymbol{r}_k-\alpha_kA\boldsymbol{p}_k,$$

$$K^{-1}\boldsymbol{s}_k=K^{-1}\boldsymbol{r}_k-\alpha_kK^{-1}A\boldsymbol{p}_k, \tag{61}$$

$$\omega_k=\frac{(AK^{-1}\boldsymbol{s}_k,\boldsymbol{s}_k)}{(AK^{-1}\boldsymbol{s}_k,AK^{-1}\boldsymbol{s}_k)},$$

$$\boldsymbol{x}_{k+1}=\boldsymbol{x}_k+\alpha_k\boldsymbol{p}_k+\omega_kK^{-1}\boldsymbol{s}_k,$$

$$\boldsymbol{r}_{k+1}=\boldsymbol{s}_k-\omega_kAK^{-1}\boldsymbol{s}_k,$$

$$\beta_k=\frac{\alpha_k}{\omega_k}\times\frac{\langle\boldsymbol{r}_0^\sharp,K^{-1}\boldsymbol{r}_{k+1}\rangle}{\langle\boldsymbol{r}_0^\sharp,K^{-1}\boldsymbol{r}_k\rangle}, \tag{62}$$

End Do

Alg.2 の反復部分には 3 つの前処理演算 $K^{-1}\boldsymbol{s}_k$, $K^{-1}\boldsymbol{r}_k$, $K^{-1}A\boldsymbol{p}_k$ が表現されており，一見，前処理に関する演算量が増加したように見えるが，$K^{-1}\boldsymbol{s}_k$ 自体は (61) により計算不要となる．$K^{-1}\boldsymbol{r}_k$ と $K^{-1}A\boldsymbol{p}_k$ の前処理演算は，すでに式 (62)（$k=0$ では反復前に計算）と (60) の部分で計算済みである．

4. 数 値 実 験

前節までの議論で，本提案の改善版 PBiCGStab の方が合理的なアルゴリズムであることが確認された．本節では，従来版と改善版とで，どの程度，求解状況への影響があるのか確認する．

線形方程式のテスト問題として，Tim Davis's collection[16)] と Matrix Market[12)] 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）[11] 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 $\boldsymbol{x}_0 = \boldsymbol{0}$，初期シャドウ残差ベクトルは，前処理系における $\langle \tilde{\boldsymbol{r}}_0^\sharp, \tilde{\boldsymbol{r}}_0 \rangle \neq 0$ の関係を有するよう，各アルゴリズム中に記載したとおり Alg. 1 では $\boldsymbol{r}_0^\sharp = \boldsymbol{r}_0$，Alg. 2 では $\boldsymbol{r}_0^\sharp = K^{-1}\boldsymbol{r}_0$ 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 $||\boldsymbol{r}_k||_2/||\boldsymbol{b}||_2 \leq 1.0 \times 10^{-12}$ を満たすときとした（$\boldsymbol{r}_k$ はアルゴリズム中の残差ベクトル，k は反復回数）．最大反復回数には行列のサイズを用いた．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は，DELL Precision T7400（Intel Xeon E5420, 2.5GHz, MEM:16GB），Cent OS (Kernel 2.6.18) で，コンパイラは Intel icc 10.1 である．

ここでは，前処理演算は ILU(0) のみを用い，BiCGStab で各問題を求解した結果は表 3 のとおりである．N は問題サイズ，NNZ は非零要素数，従来版による結果は「Conventional(Alg.1)」，本提案の改善版による結果は「Improved(Alg.2)」の欄に示し，各々の欄中の項目は，左から「収束までの所要反復回数 (Iter.)」,「数値解を代入したときの相対残差ノルムの log_{10} (TRR)」，参考情報としての「求解時間 [sec] (Time)」である．また，所要反復回数の比較では，少ない方を太字で示している [⋆1]．

jpwh_991 については，Alg.1 のみブレークダウンし，Alg.2 では正常に収束している．この結果については，ILU(0)-BiCGStab に限らず，他の前処理演算や他の双ランチョス系アルゴリズムでも同様となることが，体系的性能評価[8] により確認されている[9]．

cryg10000，olm5000 に対し，Alg.1 では収束せず，Alg.2 では収束した．cryg2500 では，Alg.1 は，Alg.2 と比較して，Iter が多い上に，TRR では劣っている．

これら以外は，収束が速いか遅いかという点で若干の差異が確認される程度であった．両アルゴリズムの求解状況に関する分析は，PBiCG に遡って解析する必要もあると考えており，今後の課題である．

⋆1 本研究での議論は，前処理変換方法の違いによる前処理付き BiCGStab のアルゴリズム構造に対する議論が主であるため，求解時間や収束履歴グラフは参考情報としてである．計算時間への影響が大きい反復部分の演算量については，前述のとおり，Alg.1 と Alg.2 とでほとんど違いは無い

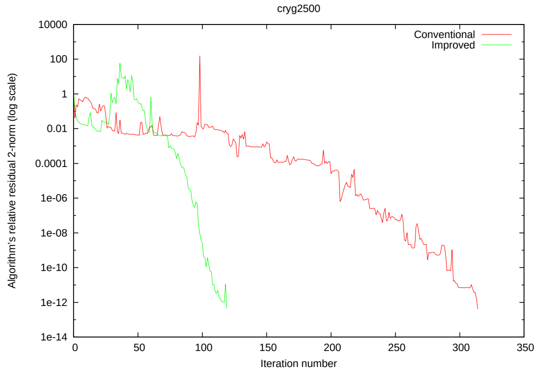

図 2 収束履歴グラフ（cryg2500）

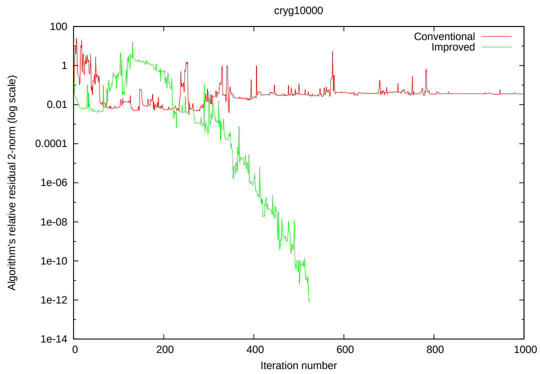

図 3 収束履歴グラフ（cryg10000）

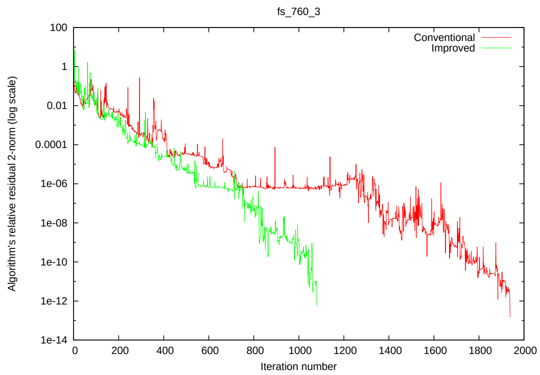

図 4 収束履歴グラフ（fs_760_3）

表 3　各テスト問題に対する計算結果

Matrix	N	NNZ	Conventional(Alg.1)			Improved(Alg.2)		
			Iter.	TRR	Time	Iter.	TRR	Time
cryg2500	2500	12349	314	-7.88	7.46e-2	**119**	-10.62	3.02e-2
cryg10000	10000	49699	No convergence			524	-9.55	5.43e-1
fs_760_2	760	5739	**102**	-12.07	9.60e-3	149	-12.32	1.40e-2
fs_760_3	760	5816	1938	-12.77	1.71e-1	**1080**	-12.23	9.67e-2
jpwh_991	991	6027	Breakdown			18	-13.35	3.04e-3
memplus	17758	99147	376	-12.21	1.00e0	**342**	-12.00	9.10e-1
olm5000	5000	19996	No convergence			27	-12.07	1.21e-2
raefsky3	21200	1488768	120	-12.29	4.83e0	**92**	-12.35	3.83e0
watt_2	1856	11550	144	-12.38	3.05e-2	**139**	-12.01	3.01e-2

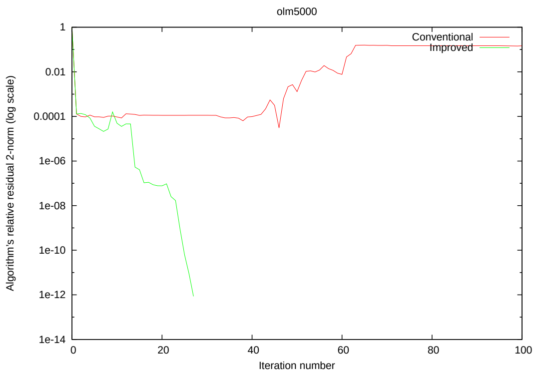

図 5　収束履歴グラフ (olm5000)

5. ま と め

本稿では前処理付き BiCGStab 法の改善アルゴリズムを提案した．従来の研究成果として，PBiCG に CGS 導出の手順を適用し，アルゴリズム構築のロジックと照らし合わせた上で合理的な PCGS が提案されている．ただし，PBiCG，PCGS ともに係数は α_k，β_k のみであり，MR 演算を伴わず，前処理変換方向に関して一致性を有する．それに対し，本稿では，係数 ω_k による MR 演算を有し一致性の無い PBiCGStab に対しても，改善版 PCGS の手法を拡張して適用でき，数理的にも合理的であることを示した．

数値実験からも，本提案の改善版アルゴリズムの求解状況における優位な結果が確認された．改善版の反復部分の演算量は従来版とほぼ同じであるため，求解時間の点でも良好であると期待できる．しかしながら，改善版であっても反復求解中のブレークダウンの可能性は残っている．これは前処理無しの BiCG，CGS，BiCGStab 自体の特性に起因するものである．

本研究による改善手法は，PBiCGStab 以後に提案されてきている，MR 演算を有する多くのアルゴリズム（PGPBiCG，PBiCGStab(ℓ)，他）にも適用できると考えられるため，本稿での議論の影響範囲は大きいと期待できる．前処理付き BiCGStab の Alg.1 と Alg.2 は，Xabclib[19] に実装されている．

謝辞　第 1 著者 (S.I.) は，本研究の PCGS 部分をはじめ，日頃から多岐に亘り議論していただいている東京大学大学院情報理工学系研究科の杉原正顯教授に感謝申し上げます．本研究の一部は文部科学省「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）(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). 邦訳）長谷川里美，他，反復法 Templates，朝倉書店，(1996).
2) 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).
3) 藤野清次，張 紹良，反復法の数理，朝倉書店，(1996).
4) 伊理正夫，岩波講座　応用数学「線形代数 II」，岩波書店，(1997).
5) 伊藤祥司，杉原正顯，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，日本応用数理学会 2009 年度年会講演予稿集，阪大，9 月 (2009).
6) 伊藤祥司，杉原正顯，双ランチョス系統の前処理付きアルゴリズムの改善，計算工学講演会論文集，九大，5 月，Vol.15，pp.171–174，2010.
7) 伊藤祥司，杉原正顯，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.
8) 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.
9) 伊藤祥司, 杉原正顯, 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, 情報研報, Vol.2011-HPC-130, No.46, pp.1–10 (2011).
10) Lanczos, C., Solution of Systems of Linear Equations by Minimized Iterations, *J. of Res. Nat. Bur. of Standards*, 49, pp.33–53 (1952).
11) http://www.ssisc.org/lis/
12) http://math.nist.gov/MatrixMarket/
13) 名取 亮, BCG 法と CGS 法, 数理解析研究所講究録, 613, pp.135–143 (1987).
14) Sonneveld, P., CGS, A fast Lanczos-type solver for nonsymmetric linear systems, SIAM J. Sci. Stat. Comput., 10(1), pp. 36–52 (1989).
15) 杉原正顯, 室田一雄, 線形計算の数理, 岩波書店, (2009).
16) http://www.cise.ufl.edu/research/sparse/matrices/
17) 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.
18) Van der Vorst, Henk A., *Iterative Krylov Methods for Large Linear Systems*, Cambridge University Press, (2003).
19) Xabclib project: http://www.abc-lib.org/Xabclib