非対称線形方程式に対する BiCGStab 関連の方法

1U−7

野口 雄一郎　　野寺 隆
慶應義塾大学 理工学部

1 はじめに

BiCGStab 法は大型の疎行列を係数とする連立一次方程式

$$Ax = b \tag{1.1}$$

を解くための反復解法である．ただし，行列 A は非対称な正則とする．BiCGStab 法では BCG 法で得られる残差ベクトルと１次の多項式を組合せ，これを各反復で最小化する．これにより BCG 法の残差の収束の不規則性を改善し，収束を滑らかにしている．BiCGStab 法の k 回目の反復における残差は $r_k = (I - \alpha A)q_{k-1}(A)\tilde{r}_k$ という式で表され，$\|r_k\|_2$ が最小になるように αが選ばれる．ただし，$\tilde{r}_k$ は BCG 法の k 回目の反復における残差ベクトルであり，$q_k(x) = (1 - \alpha x)q_{k-1}(x)$ とする．各反復で必要とする行列とベクトルの積の数は BCG 法と同じであり，このアルゴリズムでは A^Tの計算は必要としない．BiCGStab 法は多くの問題に対してよい収束性を示している．しかし、虚数部が大きい固有値を持つ問題にこの方法を適用すると残差の収束が悪くなることがある．もし初期値を実数にすると $\|r_k\|_2$ を最小化するように選ばれる αも実数となり，このため複素固有値に対応できないことがある．このような欠点を解決すべく提案されたのが一連の BiCGStab 法である．

BiCGStab 系のアルゴリズムは行列・ベクトル・スカラ演算の組合せで記述されており，並列処理に適していると考えられる．ここでは分散メモリ型メッセージパッシング方式の並列計算機 AP1000（富士通）を利用し，いろいろな問題に対して数値実験を行ったので，その結果について報告する．

2 BiCGStab 関連の方法

2.1 BiCGStab2

BiCGStab2 法では，BiCGStab 法で用いている１次式に加え２次の多項式の最小化を行うことにより複素固有値を持つような問題に対して残差の収束の安定性を得ている．BiCGStab2 法の k 回目の反復における残差 r_k は

$$\begin{aligned} &(I - \alpha A)q_{k-1}\tilde{r}_k \qquad \text{if} \quad k = 2m, &(2.1)\\ &((1-\beta)q_{k-2} + (\beta + \gamma A)q_{k-1})\tilde{r}_k \\ &\qquad\qquad\qquad\qquad \text{if} \quad k = 2m+1. &(2.2)\end{aligned}$$

という式で表される．ただし，変数 α, β, γ はいずれも実数である．式 (2.2) は次のようにも書くことができる．

$$r_k = (I - \omega A)(I - \bar{\omega} A)q_{k-2}(A)\tilde{r}_k \tag{2.3}$$

ただし，$\omega, \bar{\omega}$は実数，もしくは共役な複素数である．つまり実際の計算は実数でも複素数を扱っていることになるのである．

この BiCGStab2 法の奇数回目の反復では２次式の最小化をしているが，偶数回目の反復では BiCGStab 法と同じ１次式の最小化をすることになる．このため，BiCGStab 法で残差がうまく収束しない場合，この１次式が原因で BiCGStab2 法の残差の収束も悪くなることがある．

2.2 BiCGStab(ℓ)

BiCGStab(ℓ) 法は BCG 法で得られたベクトルと ℓ 次の多項式を組合せ，これを最小化するアルゴリズムである．$k = m\ell + \ell$ とすると BiCGStab(ℓ) 法の k 回目の反復における残差は $r_k = p_m(A)q_{k-\ell}(A)\tilde{r}_k$ である．ただし，$q_{k-\ell}(A) = p_{m-1}p_{m-2}\cdots p_0$ であり，$p_m(0) = 1$ を満たす．なお，ℓ 次の多項式 p_mは $\|r_k\|_2$が最小になるように選ばれる．このアルゴリズムは BiCGStab2 法を一般化し，より高次の多項式を用いているのだが，BiCGStab2 法と同じ方法でこれを最小化するとアルゴリズムが複雑になり必要なメモリの量が増えてしまう．そこで BiCGStab(ℓ) 法では計算方法を工夫することで同じアルゴリズムで何次の最小化でも行えるようにしている．BiCGStab(ℓ) 法では次のようにして反復を進める．

(1) 前反復で得られた残差ベクトル r_kに対し，BCG 法の反復を ℓ 回適用し，得られた残差ベクトルを$\tilde{r}_k$ とする．この計算の途中で $A^i\tilde{r}_k (i = 0, \cdots, \ell)$ が副産物として得られる．

(2) $A^i\tilde{r}_k (i = 0, \cdots, \ell)$ から正規直交なベクトル列を作る．

(3) (2) で得られたベクトルを使って ℓ 次の多項式を最小化する．

(2) と (3) では GMRES(ℓ) 法と同じ計算を行っている．

3 数値実験

実験 3.1 いろいろな BiCGSTAB

矩形領域 $\Omega = [0,1] \times [0,1]$ における２階の楕円型偏微分方程式のディリクレ境界条件問題

$$\begin{aligned} u_{xx} + u_{yy} + au_x + bu_y &= f(x,y), \\ u(x,y)\mid_{\partial\Omega} &= 0. \end{aligned}$$

に対して解を $u(x,y) = (1 - e^x)(1 - x)y(1 - e^{1-y})$ と設定し，右辺を決定する．ただし，$a = 3.0$, $b = 500.0$ とする．これを５点中心差分近似を用いて離散化し，

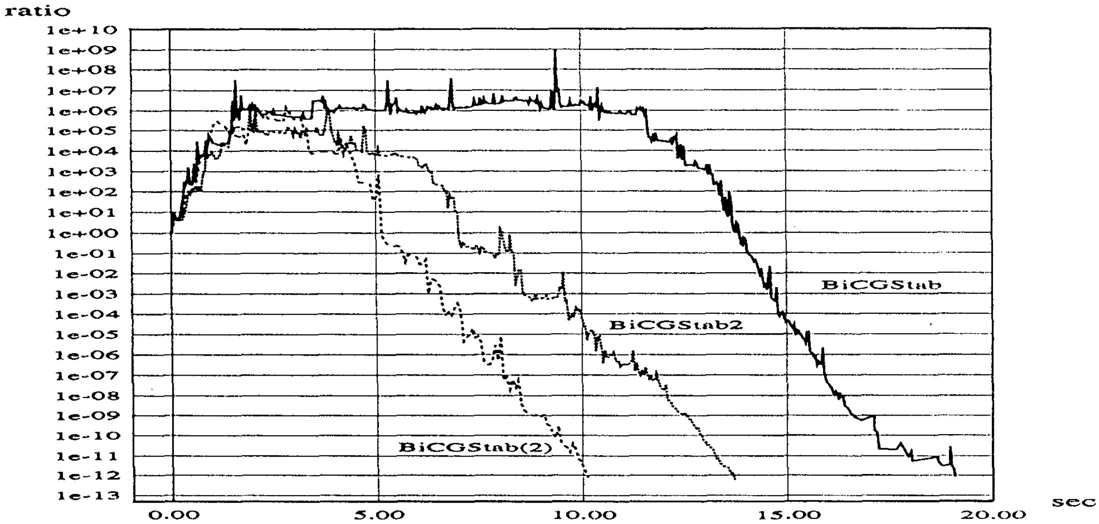

図 1　いろいろな BiCGStab における残差の収束性

BiCGStab, BiCGStab2, BiCGStab(2) に対して数値実験を行った. メッシュは 128×128, 各アルゴリズムの初期近似解は零ベクトル, 収束条件は $\|r_k\|_2/\|r_0\|_2 \leq 1.0 \times 10^{-12}$ とした. また計算には, 富士通の並列計算機 AP1000 (最大 64 プロセッサ) を使用した. 各アルゴリズムにおける残差の収束性の違いを図 1 に示す.

BiCGStab2 法の一回の反復で必要とする内積計算は BiCGStab(2) 法の 2 倍以上で、これは計算の並列化には不利となる。また、BiCGStab2 法の 1 回の反復に要する計算時間は BiCGStab(2) 法の約 1.2 倍 (実測値) であり、図 1 はこれが結果にそのまま反映されたものと思われる。

実験 3.2 BiCGSTAB(2) の並列化効果

実験 3.1 と同じ偏微分方程式において $a = 3.0$, $b = 50.0$ としてメッシュが 64×64, 128×128 の場合の BiCGSTAB(2) 法 の並列化効果 (台数効果) を調べた. 結果は図 2 の通りである。

今回は領域を同じ大きさの重複しない正方形または長方形で区切り、それぞれの領域をセルに分担させて計算を並列化している。メッシュを $m \times m$ 、セルの大きさを $x \times y$ とするとそれぞれのセルに割り当てられる領域の大きさは $\frac{m}{x} \times \frac{m}{y}$ であり、$x = y$ のとき正方形となる。1 セル当りの通信量は $2(\frac{m}{x} + \frac{m}{y})$ である。特に $x = y$ の場合を考えるとベクトルの大きさに対する通信量の比は $\frac{4x}{m}$ となり、セルの数が大きくなるほど通信量の比率が増えている。

4　おわりに

BiCGStab 関連のアルゴリズムを並列化したが BiCGStab(2) が最もよい結果を示した。また、セル間の通信の問題から線形な台数効果は得られなかったがメッシュ $m \times m$ を細かくする場合、通信の割合が減り並列化の効果は高くなる。

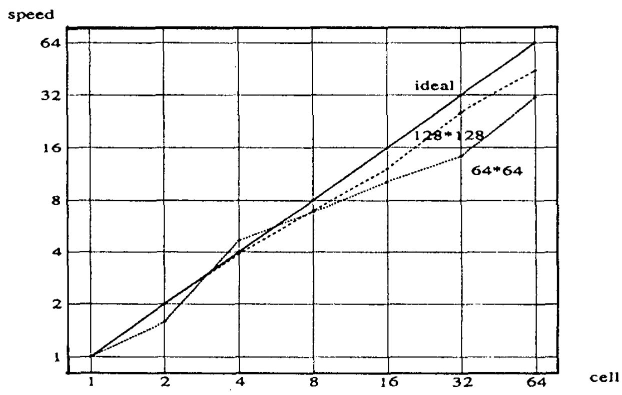

図 2　BiCGStab(2) の並列化効果

よって BiCGStab 関連のアルゴリズムの並列化は計算時間の短縮に効果的である.

参考文献

[1] H. A. VAN DER VORST, *Bi-CGSTAB: A fast and smoothly converging variant of Bi-CG for the solution of nonsymmetric linear systems*, SIAM J. Sci. Stat. Comput., 13(1992), pp.631-644.

[2] M. H. GUTKNECHT, *Variants of BiCGSTAB for matrices with complex spectrum*, SIAM J. Sci. Comput., 14(1993), pp.1020-1033.

[3] G. L. G. SLEIJPEN and D. R. FOKKEMA, *BiCG-STAB(l) for linear equations involving unsymmetric matrices with complex spectrum*, ETNA 1(1993), pp.11-32.