

平成 21 年 6 月 20 日現在

研究種目：基盤研究 (C)
 研究期間：2006—2008
 課題番号：18560064
 研究課題名 (和文) 残差最小化アプローチに基づく新たな大規模線形方程式ソルバーの開発とその応用
 研究課題名 (英文) A new solver derived from a minimal residual approach for solving linear systems and its application
 研究代表者
 阿部 邦美 (Kuniyoshi Abe)
 岐阜聖徳学園大学・経済情報学部・准教授
 研究者番号：10311086

研究成果の概要：計算理工学の広範な分野では、現れた線形方程式の数値解をできるだけ効率よく、しかもできるだけ高速に得ることが、より緻密に大規模な現象を解明するために重要となる。さらに、近年では現象が複雑になったため、従来の解法では時間の長大化や収束しなくなるといった現象が起こり、これまで以上に有効な解法が開発が期待されている。そこで、本研究では、従来の解法では計算時間の長大化を招く問題や収束し難い問題を解くために新たな解法を開発する。そして、開発した解法をいくつかの問題に適用し、有効性を調べる。

交付額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2006年度	1,500,000	0	1,500,000
2007年度	1,100,000	330,000	1,430,000
2008年度	900,000	270,000	1,170,000
年度			
年度			
総計	3,500,000	600,000	4,100,000

研究分野：数値計算

科研費の分科・細目：応用物理学・工学基礎 工学基礎

キーワード：大規模線形方程式, Krylov 空間法 (反復法), 残差最小化アプローチ, 積型解法

1. 研究開始当初の背景

Krylov 空間法は、導出のプロセスの違いによっていくつかに分類される。その一つは、Petrov-Galerkin アプローチと呼ばれる方法で、残差がある n 次元の Krylov 部分空間と直交する条件に基づいて導出するものである。その代表が、非対称行列を解くための双共役勾配法 (Bi-CG 法と略す) である。第二として残差最小化アプローチと呼ばれる、Krylov 部分空間上で残差を最小化することによって導出される方法である。さらに、収束性の向上を目指し、Petrov-Galerkin アプローチに基づく解法の発展版が提案された。

それらの解法は積型反復解法と呼ばれ、Bi-CG 法の残差と、その残差の収束性を高めるように構築された多項式との積で解法の残差が定義されている。一方、残差最小化アプローチに基づく解法の積型版はない。そこで、われわれは残差最小化アプローチに基づく積型反復解法を提案することを目標とする。

2. 研究の目的

(1) 本研究の目的の第一は、従来の残差最小化アプローチに基づく解法よりも優れた収束性をもつアルゴリズムの開発、およびそ

のアルゴリズムの数学的な収束特性の分析を行なうことである。

① アルゴリズム開発：Petrov-Galerkin アプローチに基づく解法が開発された後、その収束性を高めるような積型反復解法が開発された。一方、残差最小化アプローチに基づく解法の積型版はまだ開発されていない。そこで、残差最小化アプローチに基づく積型反復解法を開発する。

② 収束特性の解析：開発した解法が実際の応用問題に使用される前に、その解法の適用範囲、収束の性質、また丸め誤差に対する性質を示すことが重要である。そこで、開発したアルゴリズムの数学的な収束性の分析を行なう。

(2) 研究目的の第二は、開発したアルゴリズムを用いて先に行なった研究結果を改良すること、および実用的な応用問題に適用することによって有効性を示すことである。

① 先行研究（解法を高速化する前処理手法の開発、特異な系に適した残差最小化アプローチに基づく解法の開発）の改良：先に、解法を高速化するための前処理手法の開発、および特異な系に適した残差最小化アプローチに基づく解法を開発を行なった。これらの先行研究で用いた残差最小化アプローチに基づく解法を開発した積型版に置き換え、収束性の向上、および計算時間の短縮を目指す。

② 実用問題へ適用：様々な実用問題に従来の残差最小化アプローチに基づく解法が用いられてきたが、電磁界問題、弾塑性問題、不均一性の高い流れ問題などを解く場合、十分な解の精度が得られないことや多くの計算時間を必要とすることがある。そこで、これらの問題に提案した解法を適用し、収束性、ロバスト性、計算効率が従来よりも向上することを示す。

3. 研究の方法

(1) 従来の残差最小化アプローチに基づく解法よりも優れた収束性をもつアルゴリズムの開発を行なうために、次のような手順ですすめる。

① 残差最小化アプローチに基づく解法の一つである一般化共役残差法 (GCR 法と略す)、および積型反復解法のアルゴリズムで現われるベクトルの関連を調べる。

② GCR 法の残差多項式係数を計算するとき使用されるベクトルと関連 (類似) した積型反復解法のベクトルを用いて、提案する解法の残差多項式係数が設計できないかを検討する。さらに、計算量、記憶容量の観点からアルゴリズムを推敲する。

(2) 開発した積型版アルゴリズムの数学的な収束特性の分析を行うために、次のような手順ですすめる。

① 固有値、固有ベクトルを数学的に求める

ことができる対称問題を通じて、アルゴリズムで使用されているベクトルの性質 (例えば、固有ベクトル成分の大きさや強度) を分析する。

② 多倍長ルーチンを用いて高精度計算を行なう。得られた結果は丸め誤差が排除されるため、理論が示す結果に近い。その結果と通常の計算との差異をもとに解析する。

(3) 先行研究 (解法を高速化する前処理手法の開発、および特異な系に適したアルゴリズムの開発) で用いられた残差最小化アプローチに基づく解法を提案する積型版に置き換え、従来より効果的であることを示す。

(4) 開発した残差最小化アプローチに基づく積型反復解法を次のような応用問題に適用し、従来の方法よりも効果的であることを示す。

① 異なる空間のスケールを有する系を取り扱う電磁界問題などに開発した積型版を適用し、従来の方法よりも収束性が優れていることを示す。

② 大変形を伴う弾塑性問題や不均一性の高い流体問題から現れる線形方程式に開発した積型版を適用し、有効性を示す。

4. 研究成果

(1) Krylov 空間法は導出のプロセスの違いによっていくつかに分類される。その中に、残差最小化アプローチと呼ばれる、Krylov 部分空間上で残差を最小化することによって導かれる GCR 法やその切断版である Orthomin(m) 法などがある。また、短い漸化式によって残差、近似解が更新される共役残差法 (CR 法と略す) も残差最小化アプローチに属する解法の一つとして知られている。さらに、近年、CR 法と数学的に同値でアルゴリズムの表現が異なる Minimized Residual Method Based on the Three-Term Recurrence Formula of CG-Type (MRTR 法と略す) が提案され、その有効性が報告されている。一方、Orthomin(m) 法と数学的に同値でアルゴリズムの表現が異なる解法はまだ提案されていない。そこで、従来の Orthomin(m) 法と数学的に同値で、アルゴリズムの表現が異なる新たなアルゴリズムを開発した。そして、特異な場合の数値実験を通して、従来の Orthomin(m) 法の残差が理論と矛盾する収束振舞いであるのに対し、提案するアルゴリズムの残差は理論通りに収束することを示した。

(2) 複素対称行列を係数行列として持つ線形方程式を解く場合、係数行列が正則であれば、その代表的な解法として Conjugate Orthogonal Conjugate Gradient method (COCG 法と略す) が知られている。また、近年では、複素対称行列のため CR 法として COCR 法も提案されており、その有効性が報告されている。

しかし、特異な複素対称行列を係数行列に持つ線形方程式を解く場合、COCG法やCOCR法を適用するとき、(複素対称行列ではない場合の従来研究の結果と同様)最小二乗解を求めることができないことが推測される。そこで、特異な複素対称行列を係数行列に持つ線形方程式を解く解法として、複素対称線形方程式用のMRTR法を新しく開発した。そして、室内音響や電磁界解析の応用問題から得られる正則または特異な複素対称行列を係数にもつ線形方程式に適用し、有効性を示した。

(3) 非対称行列用の高速解法として、自乗共役勾配法(CGS法と略す)などの積型反復解法が提案されている。これらの解法はPetrov-Galerkinアプローチから導かれる解法である。一方、残差最小化アプローチによって導出される方法としてCR法があるが、その積型版はまだ提案されていない。そこで、非対称行列用CRに基づく新しい積型反復解法(残差ベクトルを構成するBi-CG法を非対称行列用CR法に置き換えた解法)を提案し、従来の積型解法よりも有効であることを示した。

(4) CGS法の改良版として、Stabilized CGS method(SCGS法と略す)が提案されている。このSCGS法の残差ベクトルを構成するBi-CG法の残差ベクトルを非対称行列用CR法の残差ベクトルに置き換えたSCRS法を提案した。さらに、SCRS法の1反復当たりの計算量を低減させたModified SCRS method(MCGS法と略す)を導き出し、提案したSCRS法とMSCRS法が従来の方法に比べて、収束が速くかつ収束性が安定していることを示した。さらに、前処理つきMSCRS法のアルゴリズムを提案し、その有用性を明らかにした。

(5) 共役勾配法(CG法と略す)、CR法は実対称行列を係数にもつ線形方程式を解くための解法としてよく知られている。また、係数行列が実対称な場合、CGS法はCG法の残差ベクトルの2乗で定義される解法(残差2乗型CG法)として解釈することができる。そこで、CR法の残差の2乗で残差ベクトルが定義される実対称な線形方程式を解くための解法(sym-CRS法)を提案し、その有効性を示した。

(6) Krylov空間法は前処理と共に用いられるのが一般的であり、大幅に収束性が改善されることが多い。

① 一般の非対称行列に対する前処理の代表的な方法として、スケーリング、不完全LU分解があり、これは直接法に基づく前処理である。これに対し、各反復毎に異なる前処理を適用できるFlexible Generalized Minimum RESidual method(Flexible GMRES法と略す)法やGMRESR法が開発されている。それらの解法の前処理の計算には、主にGMRES法が使われる。一方、最近では、逐次過剰緩和法(SOR

法と略す)を用いて前処理する可変的前処理付きGCR法が提案されている。しかし、対角項に零を持つ行列や長方形行列を係数に持つような線形方程式の場合、SOR法を使うことはできない。そこで、対角項に零を持つような行列に対してもSOR法が適用できるように、反復行列を生成する際の行列分離方法を改良し、ある種のGeneralized SOR method(GSOR法と略す)を提案した。そして、GSOR法を用いる可変的前処理付きGCR法の有効性を示した。

② 対角要素の絶対値の積が最大になるように変換する手法が提案されている。この手法は係数行列の対角項を非零に変換することができるため、前処理にSOR法を適用することが可能になる。さらに、対角優位化を図るという性質により、SOR法の収束性も向上すると考えられる。そこで、対角優位化並替え手法を利用した際のSOR法を用いる可変的前処理付きGMRES(m)法の有効性について検証した。

(7) 非対称行列のためのKrylov空間法であるBi-CG法、CGS法の初期シャドウ残差ベクトルを用いた収束性の向上について提案した。すなわち、 A^T のべき乗を用いることによってBi-CG法、CGS法の初期シャドウ残差ベクトルを与えることを提案し、それらの解法の収束改善について検証した。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 17 件)

1. Hiroshi Niki, Toshiyuki Kohno, Kuniyoshi Abe, An extended GS method for dense linear systems, Journal of Computational and Applied Mathematics (to appear), 査読有
2. Kuniyoshi Abe, Gerard Sleijpen, BiCR Variants of Hybrid BiCG Methods for Solving Linear Systems with Nonsymmetric Matrices, Journal of Computational and Applied Mathematics (to appear), 査読有
3. 鬼束崇博, モーツウツウ, 阿部邦美, 尾上勇介, 藤野清次, A^T のべき乗を用いた初期シャドウ残差によるBiCG, CGS法の収束性の向上, 日本応用数学会論文誌, 第19巻 第1号, 2009, 121-142, 査読有
4. Kuniyoshi Abe, Shao-Liang Zhang, A Variant Algorithm of the Orthomin(m) Method for Solving Linear Systems, Applied Mathematics and Computation, Vol. 206, No. 1, 2008, 42-49, 査読有
5. 青戸大介, 石渡恵美子, 阿部邦美, 特異

- 行列に対する GSOR 法を用いた可変的前処理付き GCR 法, 日本応用数学会論文誌, 第 18 巻 第 2 号, 2008, 271-284, 査読有
6. 長原里華, 阿部邦美, 石渡恵美子, 藤野清次, 対角項に零を持つ線形方程式に対する SOR 法を用いる可変的前処理付き一般化最小残差法, 本計算工学会論文集, 2008 年号, 論文番号 20080010 (7 ページ), 査読有
 7. 阿部邦美, 藤野清次, モーツウツウ, 対称な線形方程式のための残差 2 乗型共役残差法, シミュレーション (日本シミュレーション学会論文誌), 第 27 巻 1 号, 2008, 63-70, 査読有
 8. 前田祥兵, 阿部邦美, 曾我部知広, 張紹良, AOR 法を用いた可変的前処理付き一般化共役残差法, 日本応用数学会論文誌, 第 18 巻 第 1 号, 2008, 155-170, 査読有
 9. 尾上勇介, 藤野清次, 阿部邦美, BiCR 法の残差をベースにした前処理付き MSCRS 法について, 日本計算工学会論文集, 2007 年号, 論文番号 20070023 (10 ページ), 査読有
 10. 尾上勇介, 藤野清次, 阿部邦美, BiCR 法の残差ベクトルをベースにした Modified S (Stabilized) CRS 法の提案, 日本応用数学会論文誌, 第 17 巻 第 4 号, 2007, 495-509, 査読有
 11. Daisuke Aoto, Emiko Ishiwata, Kuniyoshi Abe, A Variant of SOR Method for Singular Linear Systems and its application to a Variable Preconditioned GCR Method, ICNAAM 2007 proceedings, American Institute of Physics, 54-57, 査読有
 12. 阿部邦美, 曾我部知広, 藤野清次, 張紹良, 非対称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スーパーコンピューティングシステム, 第 48 巻 SIG 8 号 (ACS18), 2007, 11-21, 査読有
 13. 塩出亮, 阿部邦美, 藤野清次, MRTR 法の複素対称線形方程式への拡張, 日本応用数学会論文誌, 第 17 巻 第 1 号, 2007, 24-42, 査読有
 14. 阿部邦美, 張紹良, Orthomin(m) 法の変形とその特異な系への適用, 日本応用数学会論文誌, 第 16 巻 第 4 号, 2006, 385-398, 査読有
 15. 塩出亮, 藤野清次, 阿部邦美, MRTR 法の対称正定値行列用前処理について, 日本計算工学会論文集, 2006 年号, 論文番号 20060007 (7 ページ), 査読有
 16. Akira Shiodeo, Kuniyoshi Abe, Seiji Fujino, Application of MRTR Method for Solving Complex Symmetric Linear

Systems, Systems Modeling and Simulation (eds. by K. Koyamada, S. Tamura and O. Ono), Theory and Applications, Asia Simulation Conference 2006, Springer, 108-112, 査読有

17. Kuniyoshi Abe, Shao-Liang Zhang, A Variant of Orthomin(m) Method for Solving Linear Systems, ICNAAM 2006 proceedings, WILEY-VCH, 2006, 15-18, 査読有

[学会発表] (計 6 件)

1. Kuniyoshi Abe (with Seiji Fujino), CR Variants of Hybrid Bi-CG Methods for Solving Linear Systems with Nonsymmetric Matrices, 13th International Congress on Computational and Applied Mathematics, 2008 年 7 月 7-11 日, Ghent Belgium
 2. 阿部邦美 (共著: 長原里華, 石渡恵美子, 藤野清次), 対角項に 0 を持つ線形方程式に対する SOR 法を用いる可変的前処理付き GMRES 法, クリロフ別府フォーラム, 2008 年 1 月 11-12 日, ビーコンプラザ (大分・別府)
 3. Kuniyoshi Abe (with Daisuke Aoto, Emiko Ishiwata), A variant of SOR method for singular linear systems and its application to a variable preconditioned GCR method, 5th International Conference of Numerical Analysis and Applied Mathematics, 2007 年 9 月 16-20 日, Corfu (Greece)
 4. 阿部邦美 (共著: 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, 2007 年ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム, 2007 年 1 月 17-18 日, つくば国際会議場
 5. 阿部邦美 (共著: 藤野清次), 対称正定値行列を係数にもつ線形方程式のための自乗共役残差法, 第 19 回計算力学講演会, 2006 年 11 月 3-5 日, 名古屋大学
 6. Kuniyoshi Abe (with Shao-Liang Zhang), A variant of the Orthomin(m) method for linear systems, 4th International Conference of Numerical Analysis and Applied Mathematics, 2006 年 9 月 15-19 日, Crete (Greece)
6. 研究組織
 (1) 研究代表者
 阿部 邦美 (Kuniyoshi Abe)
 岐阜聖徳学園大学・経済情報学部・准教授
 研究者番号: 10311086

(2)研究分担者

張 紹良 (Shao-Liang Zhang)

名古屋大学大学院・工学研究科・教授

研究者番号：20252273

中島 研吾 (Kengo Nakajima)

東京大学・情報基盤センター・特任教授

研究者番号：20376528

内田 幸夫 (Yukio Uchida)

岐阜聖徳学園大学・経済情報学部・教授

研究者番号：40107991

(3)連携研究者