様式Ｃ－１９

科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

平成 25 年 6 月 7 日現在

機関番号：33704
研究種目：基盤研究（C）
研究期間：2010--2012
課題番号：22560067
研究課題名（和文）帰納的次元縮小定理に基づく線形方程式ソルバーの新展開を目指した研究

研究課題名（英文）Developments of new linear solvers based on the induced dimension reduction theorem

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・教授
研究者番号：10311086

研究成果の概要（和文）：
線形方程式の解法である Krylov 空間法は，過去 50 年以上，様々な研究が行なわれノウハウが蓄積されてきた．一方，2007 年，Krylov 空間法とは異なる原理から導出される Induced Dimension Reduction (帰納的次元縮小，IDR と略す)(s) 法と呼ばれる新たな解法が提案され，申請時期はソルバー開発の大きな進展期にあった．そこで，従来の Krylov 空間法が発展してきた中で活用されたアイディアを IDR(s)法に取り込むことにより，新旧の解法の長所を活かした 従来より収束性に優れた解法を開発した．
研究成果の概要（英文）：
Krylov subspace methods, specifically hybrid Bi-CG methods, have been developed in the 1990s, and some advantages with the hybrid BiCG methods are well-known. A new method which is called the Induced Dimension Reduction (abbreviated to IDR) (s) has been proposed in 2007. It has recently reported that the IDR(s) method sometimes converges faster than the hybrid Bi-CG methods. Many researchers have focused on the IDR(s) method. Therefore, by combining the advantage of IDR(s) with that of the hybrid Bi-CG methods, we have proposed new solvers which have better convergence than the hybrid Bi-CG and original IDR(s) methods.

交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合　計
2010 年度	1,500,000	450,000	1,950,000
2011 年度	1,000,000	300,000	1,300,000
2012 年度	900,000	270,000	1,170,000
年度			
年度			
総　計	3,400,000	1,020,000	4,420,000

研究分野：数値計算，応用数学，数理工学
科研費の分科・細目：工学基礎
キーワード：線形方程式，Krylov 空間法，帰納的次元縮小(IDR)定理，IDR(s)法，一般化積型解法（GPBiCG)，IDRstab 法，スムージング技法，ブロック IDR(s)法

１．研究開始当初の背景

非対称行列に対する Krylov 空間法は,「残差の双直交化」(残差がある n 次元の Krylov 部分空間と双直交）と「残差の最小化」（Krylov 空間上で残差を最小）から導出される 2 つの解法群に大別される．「残差の双直交化」条件から導かれる解法の元祖が双共役勾配法（BiCG と略す）である．さらに，BiCG 法の収束性の向上を目指し，(1) BiCG 法に安定化多項式を導入した安定化双共役

勾配法(BiCGSTAB と略す）などの積型解法と，(2) BiCG 法に残差最小化の考え方を加味した擬似残差最小化法（QMR と略す）などの研究が行われてきた．また，「残差の最小化」条件から導かれる解法の代表は一般化最小残差法（GMRES と略す），一般化共役残差法（GCR と略す）である．これらの解法は反復が進むにつれて計算量やメモリ量が増すため，それらを軽減化する(1)リスタート版である GMRES(m)法，GCR(m)法や (2) 切断版である Quasi-GMRES 法などの研究が行われてきた．積型解法や GMRES(m)法は，収束の高速性や頑健性に優れており，現在，多くの応用分野で用いられ，その有効性が実証されている．その後，2007 年，IDR(s) 法 と呼ばれる新たなソルバーが提案され，従来の積型解法より高速，かつロバストであることが報告された．さらに，Sleijpen らによって一部の積型解法と IDR(s)法の関係，すなわち IDR(s)法は係数行列と s 本のあるベクトルで張るブロック Krylov 部分空間上で近似解を作る BiCGSTAB 法（従来の BiCGSTAB 法は係数行列と 1 本のあるベクトルで張る Krylov 部分空間上で近似解を作る）と解釈できることが明らかにされた．そこで，本研究課題では IDR(s)法と積型解法と関連性に着目し，両者の長所を活かした従来よりも高速性，ロバスト性に優れた解法の開発が目標である．

２．研究の目的

本研究課題では，IDR(s)法と積型解法と関連性をもとに，Krylov 空間法の 50 年以上にわたる発展の中で活用された数学的条件，蓄積されたアイディアを IDR(s)法に取り入れることによって，従来よりも優れた収束性をもつ解法を開発する（以下の研究 A）．また，先行研究で用いられた解法を（本申請で）開発した解法に置き換え，先行研究を発展（計算時間短縮，収束性向上）させる（以下の研究 B）．次に，開発した解法を実際の問題に使用する前に，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，開発した解法がどのような収束特性で，丸め誤差によってどのような影響を受けるのか，数学的に分析を行なう（以下の研究 C）．さらに，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．そこで，（本申請で）開発した解法を超大規模で社会的に役立つような実用問題に適用し，従来よりも求解効率が向上すること，緻密な解析が可能となることを示す（以下の研究 D）．

（研究 A）新解法の開発： IDR(s)法と積型解法と関連性に着目し，従来の解法の長所を IDR(s)法に組み込むことによって，従来の解法や IDR(s)法よりも優れた収束性をもつアルゴリズムを開発する．

（研究 B） 先に行われた研究の改良： これまでに行なわれた研究，すなわちシフト方程式向き積型解法の提案，解法を高速化するための前処理手法の開発，積型解法の改良などで用いられた解法を（本申請で）開発した解法に置き換え，先行研究を発展させる．

（研究 C）収束特性の解析： アルゴリズムで使用されているベクトルの性質の分析，多倍長計算した結果と通常の計算結果との差異，アルゴリズムにおける内積や行列ベクトル積の演算から起こる丸め誤差に着目し，収束性を数学的に分析する．

（研究 D）実用問題への適用： 地震，環境調査，資源探査などの社会的に役立つような大規模な実用問題を取り上げる．そして，それらの実用問題に（本申請で）開発した解法を適用し，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．また，近年，一般的になったメニーコア CPU に向けたアルゴリズムについて検討する．

３．研究の方法

われわれは，研究 A～研究 D を次のような手順で進める．

（研究 A）優れた収束性をもつアルゴリズムの設計・開発を行なうために，次のような手順で進める．

① IDR(s)法および従来の Krylov 空間法のアルゴリズムで現われるベクトルの関連を調べる．その結果を踏まえ，BiCG 法に安定化多項式を組み込むことで積型解法を導いたのと同じ手法によって，IDR (s)法に安定化多項式を組み込む．

② BiCG 法に擬似残差最小化の概念を取り込むことで QMR 法を導出したのと同じ手法を用いて，IDR(s)法に擬似残差最小化の概念を組み込む．

③ IDR(s) 法において空間の次元を上げる仕組みに「残差の最小化」条件を取り込む．このとき，GMRES 法と数学的に同値で，アルゴリズムの表現が BiCG 法と似ている GCR 法系統の解法と IDR(s)法との関連性に着目する．

（研究 B）先に行なわれた研究，すなわちシフト方程式向き積型解法の提案，収束性を高める前処理手法の開発，非対称行列用共役残差法（CR と略す）に基づく積型解法の開発で用いられた解法を（本申請で）開発した解法に置き換え，性能向上を示す．

① 以前にシフト方程式向き積型解法が開発された．上記（研究Ａ）（１）－② で述べた安定化多項式を組み込んだ IDR(s)法が開発されたならば，シフト方程式向き IDR(s)法を開発し，従来よりも収束性が向上することを

示す.
② 先に非対称行列用 CR 法に基づく積型解法が提案された. その際に用いられた数学原理を活用し, 非対称用 CR 法に基づく IDR(s) 法を開発する.
③ 先に提案した前処理法は, 外部反復と内部反復から構成されており, 外部反復に GMRES 法などの「残差の最小化」条件に基づく解法が使用される. 上記（研究Ａ）（１）－③ で述べた「残差の最小化」条件に基づく IDR(s)法が開発されたならば, その改良版を用いる新たな前処理の実装方法を提案し, 前処理性能が向上することを示す.
（研究 C）開発したアルゴリズムの数学的な収束特性を分析するため, 次のような手順で進める.
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 アルゴリズムにおける内積や行列ベクトル積の演算から起こる丸め誤差が収束性へ与える影響は解析されている. その結果, および従来の解法と IDR(s)法におけるベクトルの関連性から,（本申請で）提案する解法の丸め誤差を分析する.
③ 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.
（研究 D）開発したアルゴリズムを社会的に役立つ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 十分な解の精度が得られないことが予想される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適用する.
② 地震, 環境問題, 鉱物探査などと関連した超大規模, かつ時間の長大化が予想される問題, 例えば大変形を伴う弾塑性問題や不均一性の高い流体問題を扱う.
③ 近年一般的になったメニーコア上でのアルゴリズム評価, およびメニーコア向きアルゴリズムの検討を行なう.
研究代表者である阿部は, アルゴリズムの設計, 収束性の解析, 先行研究の改良, 数値実験, データの分析, 応用問題への適用を行なう. また, 研究分担者の藤野は, アルゴリズム設計への協力, 数値実験, 先行研究（収束性を高める前処理手法の開発, 積型解法の改良など）の改良, 応用問題へ適用を行なう. また, 国内外の IDR 法の研究に関する情報収集を行なう. 連携研究者の中島は, 超大規模な流体問題や構造解析問題に開発した解法を適用する. また, それらの行列を提供する. 連携研究者の石渡は, 先行研究の発展に協力する. 研究協力者の Sleijepn は, 業績（世界的にトップクラス）を生かし, アルゴリズム設計の実現, 収束性の解析に協力する.

４. 研究成果
2007 年, 帰納的次元縮小(s)法 (IDR(s)法) と呼ばれる新たな解法が提案され, その後すぐに IDR(s) 法はブロック BiCGSTAB 法であることが明らかにされた. そこで, Krylov 空間法の歴史的な研究の流れに沿って, 次のような研究を進めた.
（１）IDR(s)法に安定化多項式を取り入れる研究や疑似残差の概念を組み込む研究を進めた.
(a) 従来の解法である一般化積型解法（GPBiCG）で使用されている 2 次の安定化多項式を IDR(s)法に組み込んだ解法を開発した. IDR(s)法や従来の積型解法よりもロバストで収束性に優れていることを数値実験で確認した.
(b) IDR(s)法に L 次の安定化多項式を組み入れた IDRstab 法で生成されるベクトルと Krylov 部分空間の基底との関係を考察することによって, IDRstab 法に疑似最小残差（QMR）スムージングを用いたアルゴリズムを提案した. 数値実験では, 滑らかな収束性と残差ギャップの改善を実現できた.
(c) 同じ係数行列に対して複数本の右辺項をもつ線形方程式に対する IDR(s)法を提案した. 従来の方法を用いた逐次的な計算方法や名古屋大学のグループが提案した同種の手法よりも低コストかつ収束性に優れていた.
（２）IDR(s)法が導出されるときに使用される漸化式を用いて, 従来の積型解法を再導出し, その変形版を提案した. その結果, 従来の方法が停滞するような場合でも変形版は収束する. さらに, 積型解法の安定化多項式係数の新たな計算方法を提案した. その方法を組み込むと丸め誤差の影響を受け難く, 高速かつ安定な収束性が得られた.
（３）IDR 原理に基づく解法群は丸め誤差を受け易く, 計算で求まった近似解が所要精度を満たしていないことがある（偽収束と呼ぶ). そこで, IDR(s)法に L 次の安定化多項式を組み込んだ IDRstab 法の偽収束を改善し, かつ疎行列に対しては従来よりも計算量が少ないアルゴリズムを提案した. 数値実験では, 偽収束が改善され, かつ従来の IDRstab 法よりも時間短縮できた.

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 8 件）
１. K. Abe, G. Sleijpen, Solving linear equations with a stabilized GPBiCG method, Applied Numerical Mathematics, 67 (2013) 4-16【査読

有】
２．K. Abe, G. Sleijpen, Hybrid Bi-CG methods with a Bi-CG formulation closer to the IDR approach, 208 (2012) 10889-10899【査読有】
３．K. Abe, G. Sleijpen, A BiCGStab2 variant of IDR(s) for solving linear equations, AIP Conference Proceedings, 1479 (2012) 741-744【査読有】
４．相原研輔，阿部邦美，石渡恵美子, IDRstab 法へのスムージングの適用とその収束性，数理解析研究所講究録，1791 (2012) 11-22［査読無］
５．K. Aihara, K. Abe, E. Ishiwata, An alter native implementation of the IDRstab metho d saving vector updates, JSIAM Letters, 3 (2011) 69-72【査読有】
６．K. Abe, G. Sleijpen, BiCR Variants of hybrid BiCG methods for solving linear systems with nonsymmetric matrices, J. of Comput. And Appl. Math., 234 (2010) 985-994【査読有】
７．D. Aoto, E. Ishiwata, K. Abe, A variable preconditioned GCR method using the GSOR method for singular linear systems, J. of Comput. And Appl. Math., 234 (2010) 703-712【査読有】
８．K. Aihara, E. Ishiwata, K. Abe, A strategy for reducing the inner iteration counts for the variable preconditioning GCR(m) method, JSIAM Letters, 2 (2010) 77-80【査読有】

〔学会発表〕（計 7 件）
１．K. Abe, IDR(s) for linear equations with multiple right hand sides, International Conference of Applied and Computational Math., 2012, 10.05, Ankara, Turkey
２．K. Abe, A BiCGStab2 variant of IDR(s) for solving linear equations, International Conference of Numerical Analysis and Applied Math., 2012.09.20, Kos, Greece
３．阿部邦美，GPBiCG 法の改良，大規模計算コロキウム，2011 年 9 月 9 日，岐阜じゅうろくプラザ
４．K. Abe, Alternative implementations of the hybrid Bi-CG methods for linear equations, 10th IMACS International Conference on Iterative Methods in Scientific Computing, 2011.05.20, Marrakech, Morocco
５．K. Abe, Solving linear equations with a stabilized GPBiCG method, 湖南商学院 情報学科, 2011. 04. 14, 中国湖南省湖南商学院【招待講演】
６．K. Abe, Solving linear equations with a stabilized GPBiCG method, 第 14 回 環瀬戸内応用数理研究部会シンポジウム, 2011 年 1 月 22 日, 岡山理科大学
７．K. Abe, A stabilized GPBiCG method with a strategy to remedy accuracy of Bi-CG coefficients for solving linear systems, Conference In Numerical Analysis 2010, 2010.09.18, Creta, Greece

〔図書〕（計 ０ 件），

〔産業財産権〕
○出願状況（計 ０ 件）
名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
出願年月日：
国内外の別：

○取得状況（計 ０ 件）
名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
取得年月日：
国内外の別：

〔その他〕
ホームページ等

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・教授
研究者番号：10311086

(2) 研究分担者
藤野 清次 (Seiji Fujino)
九州大学・情報基盤センター・教授
研究者番号：40264965

(3) 連携研究者
石渡恵美子 (Emiko Ishiwata)
東京理科大学・理学部・教授
研究者番号：30287958

中島研吾 (Kengo Nakajima)
東京大学・情報基盤センター・教授
研究者番号：20376528

(4) 協力研究者
Gerard L. G. Sleijpen
Utrecht University ・ Department of Math. ・Associate Professor