様　式　C－19、F－19－1、Z－19　(共通)

科研費
KAKENHI

科学研究費助成事業　　研究成果報告書

平成 ２９ 年　 ６ 月　 １ 日現在

機関番号：３２６５７
研究種目：基盤研究(C)（一般）
研究期間：2013～2016
課題番号：２５３９０１４５

研究課題名（和文）大規模線形方程式の数値解法のための合理的な前処理技法の研究

研究課題名（英文）A study on consistent preconditioners for iterative solutions of large-scale linear systems

研究代表者
伊藤　祥司（Itoh, Shoji）

東京電機大学・理工学部・研究員

研究者番号：７０３３３４８２

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費）　　3,800,000円

研究成果の概要（和文）：本研究では大規模線形方程式の数値求解において重要な前処理（線形方程式が良条件となるような求解アルゴリズムの構築方法であり求解性能改善が期待される）に関する分析を実施した．特に双ランチョス型解法（線形方程式に対する双対系が構成される解法）の基本でもあるCGS法の前処理付きアルゴリズム(PCGS)を取り上げ，その改善版と従来版とを比較分析し，新たな知見として以下の事柄が確認された：我々が提案した改善版PCGSは左前処理系に準じ，従来の典型的な2種類のアルゴリズムの各々の長所を有する．双ランチョス型の前処理付きアルゴリズムでは，前処理系の方向は双対系の初期残差ベクトルの構成と設定により切り替わる．

研究成果の概要（英文）：In this study, we analyzed preconditioned bi-Lanczos iterative algorithms, which assume the existence of a dual system. Various iterative methods are often used in conjunction with preconditioning that improve the properties of linear equations; such typical algorithms are preconditioned CGS (PCGS) or preconditioned BiCG (PBiCG). Especially, we discussed a variety of PCGS algorithms including improved PCGS, by comparing two typical PCGS, and we analyzed the structure of the solution vector for each Krylov subspace. Further, we analyzed the structures on the polynomials of the PBiCG algorithms that correspond to the above PCGS. The improved PCGS has been verified as a coordinative to the left-PCGS, and it has the advantages of both the conventional and the left-PCGS. And, we showed that the direction of the preconditioned system of the bi-Lanczos algorithms can be switched by the construction and setting of the initial residual vector of the dual system.

研究分野：数値解析学

キーワード：大規模行列計算　クリロフ部分空間法　前処理系

１．研究開始当初の背景

近年，自然科学や工学領域における様々な現象解明が益々盛んであり，数値シミュレーションによる予測や検証が不可欠となってきている．それらの現象解明では，多くの場合，大規模な疎行列を係数行列に持つ線形方程式($Ax=b$)の求解に帰着され，如何に高速かつ高精度で安定に求解するかが重要であり，ここでは，アルゴリズムの求解品質が大きな鍵である．

それら線形方程式は，CGS（Conjugate Gradient Squared）法などクリロフ部分空間(KSP: Krylov subSPace）法に基づく反復解法を用いて求解されることが多い．さらに，求解問題の性質を改善し収束性を向上させる前処理技法の適用の効果も大きく，基本の反復解法を前処理変換した前処理付きアルゴリズムの形態で使用される．ここで，前処理変換の設計が悪いと，どの前処理演算を用いても求解には至らないこともあるため，前処理付きアルゴリズムを適切に構築（記述）することは極めて重要である．

ところが，我々のこれまでの研究により，従来から国際的標準として使用されているPCGS（Preconditioned CGS, 前処理付きCGS）の記述と前処理変換には数理的に非合理的な点があることが確認され，その改善版を提案した．

このような前処理付きアルゴリズムの改善は CGS の場合に限らず，数理的原理の異なる他の多くの解法についても我々の改善手法は有効であると考えている．

２．研究の目的

我々の先行研究にて，従来から国際的に標準とされている前処理技法には非合理的な問題が潜在していることを指摘し，それを改善した合理的な適用法を提案した．本研究では，この合理的手法を発展させる．さらに，従来から使用されてきている計算コードに僅か数行の数式記述を追加するだけで簡便に改善できる簡易実装方法の一般化にも取り組む．

上述の先行研究を発展させるよう下記を実施し，様々な KSP 法の求解性能を飛躍的に改善できることを明らかにすることが本研究の目的である．

1. 前処理系の数理面に対する考察を行いながら，我々の改善版適用の可能性について検証する．このような解析結果の応用として簡易実装版も開発する．
2. 様々な解法の核である BiCG (Bi-Conjugate Gradient)自体の改造や BiCG 部分を他の解法に置き換えた前処理付きアルゴリズムを導出する．
3. 複数の評価方法を用いて，アルゴリズム求解特性（収束性や求解状況など）の分析・評価を実施する．

３．研究の方法

我々の先行研究では，PCGS や PBiCGStab (Preconditioned Bi-Conjugate Gradient Stabilized)の合理的な改善方法を提案し，すでに良好な結果が得られている．しかし，改善版の求解特性の原理に対する解析や，非合理的であるはずの従来版でも，何故そこそこに前処理の効果があるのかという謎に対する解析は未着手である．これらの解析を行いながら，本研究では「２．研究の目的」に挙げた３点に向けて，様々な KSP 法の求解性能を向上させるよう下記 A)～C)を実施する．

A) 前処理無しの時点での解法の等価性に関する解析：

CGS 法は BiCG 法を基にして導出され, 数理的には両者は等価な関係である．この点に注目して, 様々な PCGS アルゴリズムに対応する PBiCG (Preconditioned BiCG)を導出し解析する．ここでは，左前処理系と呼ばれる PCGS アルゴリズムにも注目し，従来版 PCGS と 2 種類の改善版 PCGS に対し, これら 4 種類の PCGS を体系的に分析する．

B) 残差多項式と初期残差ベクトルの前処理系に対する解析：

様々な KSP 法を特徴付ける要素の一つでもある，アルゴリズム中の残差ベクトルと初期残差ベクトルなどの構造にも注目し，その前処理系の構造について解析した．これにより，従来版の求解特性についても分析する．

C) 様々な数値実験から得られる求解性能データに対する分析と評価（改善効果の検証）：

上述の A)，B)を実施しながら，その検証として当項目を実施する．

４．研究成果

本研究の中で解く大規模線形方程式を，

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

と表す．ここで, A は $n \times n$ 係数行列, x は解, b は右辺項で共に n 次のベクトルである．

(1)の数理的性質を改善が期待される前処理とは，A を近似する前処理行列 M を用い，

$$A \approx M = M_L M_R$$

により，(1)を

$$\left(M_L^{-1} A M_R^{-1}\right)\left(M_R x\right) = M_L^{-1} b \qquad (2)$$

と変換することに相当する．ここで，$M_L=M$, $M_R=I$（I：単位行列）のとき左前処理変換，$M_L=I$, $M_R=M$ のとき右前処理変換と言う．しかし，実際には(2)の求解と等価となるよう解法の方を前処理変換し導出された前処理付きアルゴリズムを用いて(1)を求解する．

(1)に対する反復求解において，第 k 回目 (k=1,2,…)の反復にて算出される数値解を x_k と表し，その時の残差ベクトルを

$$r_k = b - Ax_k$$

と表し，反復前の初期残差ベクトルを

$r_0 = b - Ax_0$

と表す．また，各反復にて拡張される次の部分空間をクリロフ部分空間(KSP)と呼ぶ．

$$\mathcal{K}_k(A;r_0) = \mathrm{span}\left\{r_0, Ar_0, A^2r_0, \cdots, A^{k-1}r_0\right\}$$

CG 法や BiCG 法で算出される解と KSP とは次の関係であり，

$$x_k \in x_0 + \mathcal{K}_k(A;r_0)$$

CGS 法や BiCGStab 法など積型反復法と呼ばれる解法では 1 反復に付き空間が 2 次元拡張されるため，

$$x_k \in x_0 + \mathcal{K}_{2k}(A;r_0)$$

である．

（１）従来版 PCGS と改善版 PCGS に対する様々な前処理演算による比較

CGS 法は BiCG 法に対する式変形と変数変換により導出される．ここで現れる定理や手順等を前処理系に適用したとき，改善版 PCGS (Alg.1)が導出されることを検証し，あらためて前処理系における定理として一般化した．

数値実験により，様々な前処理演算を用いて従来版と改善版との求解性能を比較したところ，従来版では求解不可能な問題であっても，多くの場合，改善版では相対誤差が十分な精度で求解できたことを確認した．

この研究項目は,「２．研究の目的」の 1),3)に該当し，「３．研究の方法」の B),C)に基づき実施した．ここでの成果は「５．主な発表論文等」に記載した〔雑誌論文〕③として発表した．

Algorithm 1: 改善版 PCGS

$x_0, r_0 = b - Ax_0, \beta_{-1} = 0, r_0^{\#} = M^{-1}r_0,$

For $k = 0,1,2,\cdots;$ Do

$u_k = M^{-1}r_k + \beta_{k-1}q_{k-1},$

$p_k = u_k + \beta_{k-1}(q_{k-1} + \beta_{k-1}p_{k-1}),$

$\alpha_k = \left(r_0^{\#}, M^{-1}r_k\right) / \left(r_0^{\#}, M^{-1}Ap_k\right),$

$q_k = u_k - \alpha_k M^{-1}Ap_k,$

$x_{k+1} = x_k + \alpha_k(u_k + q_k),$

$r_{k+1} = r_k - \alpha_k A(u_k + q_k),$

$\beta_k = \left(r_0^{\#}, M^{-1}r_{k+1}\right) / \left(r_0^{\#}, M^{-1}r_k\right),$

End Do

（２）４種類の PCGS の数理構造の分析

ここでは，上述の従来版 PCGS に加え，左前処理系 PCGS，および，改善版 PCGS の別版も交え，それら 4 種類の PCGS について比較分析した．4 種類の PCGS の概要は次のとおりである．

■ 右前処理系（右系 : Conventional PCGS）

従来版 PCGS．多くの数値計算ライブラリやアルゴリズムの記述である．

・アルゴリズム中の残差ベクトルの構造 :

$$r_k = b - \left(AM^{-1}\right)\left(Mx_k\right) = b - Ax_k \qquad (3)$$

・生成される KSP と解の構造:

$$Mx_k \in Mx_0 + \mathcal{K}_{2k}\left(AM^{-1}; r_0\right)$$

解に対して前処理行列が作用している．

■ 左前処理系（左系 : Left-PCGS）

数値シミュレーション領域のアルゴリズム記述でよく用いられる．

・アルゴリズム中の残差ベクトルの構造 :

$$r_k = M^{-1}b - M^{-1}Ax_k = M^{-1}\left(b - Ax_k\right) \qquad (4)$$

・生成される KSP と解の構造:

$$x_k \in x_0 + \mathcal{K}_{2k}\left(M^{-1}A; r_0\right)$$

解に対して前処理行列が作用していない．

■ 改善版（Improved1, 2 PCGS）

右系・左系両方の長所を有している（改善版 1 と 2 は等価．Alg.1 は Impr1 PCGS）．

・アルゴリズム中の残差ベクトルの構造 :

$$r_k = b - Ax_k \qquad (5)$$

・生成される KSP と解の構造:

$$x_k \in x_0 + M^{-1}\mathcal{K}_{2k}\left(AM^{-1}; r_0\right)$$

解に対して前処理行列が作用していない．

上記の中でアルゴリズム中の残差ベクトルが本来の構造（$r_k = b - Ax_k$）を保持しているのは右前処理系と両改善版である．一方，左前処理系は本来の残差ベクトルに対し前処理演算が作用しており，本来の構造を保持していない．この点では右前処理系と両改善版の方が良い．

次に，生成される KSP と解の構造に注目すると，左前処理系と両改善版は解 x_k を直接構成している．一方，右前処理系は解に対し前処理行列が作用しており，本来とは異なる形態の解を構成する KSP が生成されている．この点では左前処理系と両改善版の方が良い．

以上から，両改善版は左・右前処理系の長所を兼ね備え，短所が改善されているアルゴリズムであることが数理的に確認できる．

数値実験では厳密解 x_{exact} を用意し，収束時の数値解との誤差を相対誤差ノルムにより評価した．反復回数の上限は 1000 とした．

表 1 はアルゴリズム中の残差ベクトルにより収束した時の相対誤差ノルムである．ここで収束判定は，右前処理系(Conv.)と両改善版(Impr1,2)では，Alg.1 中の残差ベクトル（式(3),(5)の構造に基づく）$\|r_{k+1}\| / \|b\| \le 10^{-12}$ を用い，左前処理系(Left)では，Alg.1 中の残差ベクトル（式(4)の構造に基づく）$\|r_{k+1}\| / \|M^{-1}b\| \le 10^{-12}$ を用いた．

表 1.　4 種類の PCGS の求解性能；上段:相対誤差ノルム(log10)，下段の( )内:アルゴリズム中の残差ベクトルにて収束するまでの所要反復回数

Matrix	Conv.	Left	Impr1	Impr2
bfw782a	-10.44 (93)	-12.33 (84)	-12.22 (84)	-11.71 (75)
olm5000	4.22 (Stag.)	-10.64 (38)	-8.05 (34)	-8.00 (33)
poisson- 3Db	-10.33 (122)	-13.31 (119)	-13.39 (123)	-12.07 (117)
visco- plastic2	-4.68 (812)	-7.54 (775)	-8.69 (844)	-8.84 (886)
watt__1	-5.96 (27)	-12.63 (41)	-9.77 (35)	-9.77 (35)

表 2.　4 種類の PCGS の求解性能；上段:相対誤差ノルム(log10)，下段の( )内:真の残差ベクトルにて収束するまでの所要反復回数

Matrix	Conv.	Left	Impr1	Impr2
bfw782a	-10.44 (Stag.)	-12.23 (84)	-12.22 (84)	-11.71 (75)
olm5000	4.22 (Stag.)	-8.28 (31)	-8.05 (34)	-8.00 (33)
poisson- 3Db	-10.33 (Stag.)	-12.95 (113)	-13.39 (123)	-12.06 (Stag.)
visco- plastic2	-4.68 (Stag.)	-8.01 (Stag.)	-8.95 (Stag.)	-8.93 (Stag.)
watt__1	-5.96 (27)	-9.77 (35)	-9.77 (35)	-9.77 (35)

表 2 は真の残差ベクトルにより収束した時の相対残差ノルムである．ここでの収束判定はいづれのアルゴリズムに対しても $\|\hat{r}_{k+1}\|/\|b\| \le 10^{-12}$ を用いている．ここで，$\hat{r}_{k+1} = b - Ax_{k+1}$ である．

これらの実験をとおして，右前処理系(Conv.)は精度不十分な結果が多いことが確認された．表 1 から，左前処理系が両改善版よりも高精度な結果(olm2000, watt__1)と逆の状況である結果(viscoplastic2)が確認された．しかし，真の残差ベクトルにて全アルゴリズムとも同じ収束判定を用いた場合は，表 2 のとおり，左前処理系と両改善版（特に Impr1）とは大きな差は無い．

これら表 1,2 の結果からは，左前処理系が望ましいようにも思われるが，収束判定が異なるため，左前処理系では「表面上の収束」が生じ易い．アルゴリズム中の残差ベクトル（例えば，Alg.1 中の r_{k+1}）による相対残差ノルム $\|r_{k+1}\|/\|b\|$ では十分な精度で収束しているものの，その時に算出された数値解を用いあらためて真の残差ベクトル(4)により算出した真の相対残差ノルム $\|\hat{r}_{k+1}\|/\|b\|$ では，精度が悪い場合がある．これを「表面上の収束」と表現する．

そのような状況をまとめたものが図 1 であり，ここでは，$\|r_{k+1}\|/\|b\| \le 10^{-12}$ の精度で収束しているが，$\|\hat{r}_{k+1}\|/\|b\| \le 10^{-8}$ の精度も満たしていない場合を表面上の収束とした．

–	Data Set			Conventional									Left-PCGS									Improved1								
No.	Solver / Precond.	N	NNZ	03-01	03-02	03-03	03-04	03-05	03-06	03-07	03-08	03-09	03-01	03-02	03-03	03-04	03-05	03-06	03-07	03-08	03-09	03-01	03-02	03-03	03-04	03-05	03-06	03-07	03-08	03-09
1	Chebyshev1	261	2319	.	9	.	.	.	0	.	0	.	.	8	.	.	.	0	*	0	*	.	8	.	.	.	0	.	.	7
2	Chebyshev3	4101	36879	.	10	.	.	.	.		10	.	.	10	.	.	.	.		.	.	.	10	.	.	.	.		9	.
3	add20	2395	13151	8	7	9	10	8	10	10	10	9	8	7	9	10	8	10	10	10	9	8	7	9	10	8	10	10	10	9
4	add32	4960	19848	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10
5	arc130	130	1037	9	10	10	10	9	9	10	10	10	9	10	10	10	9	9	10	9	9	9	10	10	10	9	9	10	9	10
6	bfw782a	782	7514	0	5	4	10	0	2	.	3	3	0	5	3	10	0	4	*	1	5	0	5	3	10	0	4	.	1	3
7	bfw782b	782	5982	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10
8	chem_master1	40401	201201	.	.	.	.	.	.	.	10	10	.	.	.	.	.	.	*	10	10	.	.	.	.	.	.	.	10	10
9	cry10000	10000	49699	.	.	.	.	.	.	.	.	.	.	.	.	.	.	.	.	.	.	.	.	.	.	.	.	.	.	.
10	cry2500	2500	12349	.	.	.	.	.	.	.	.	.	.	*	.	*	.	.	*	.	0	.	*	.	.	.	.	.	0	0
11	ecl32	51993	380415	10	10	10	10	*	10	.	*	*	*	10	10	10	10	10	*	10	10	*	10	10	10	10	10	.	10	10
12	epb0	1794	7764	*	8	8	.	*	9	.	9	8	0	8	8	.	0	9	.	9	9	0	8	7	.	0	8	.	9	8
13	epb1	14734	95053	*	10	10	10	*	10	.	10	10	*	10	*	10	*	10	*	10	10	*	10	*	10	*	10	.	10	10
14	epb2	25228	175027	10	10	10	.	10	10	.	10	10	10	10	10	.	10	10	*	10	10	10	10	10	.	10	10	.	10	10
15	epb3	84617	463625	7	10	10	.	*	10	.	10	10	*	10	10	.	*	10	*	10	10	*	10	10	.	9	10	.	10	10
16	fs_760_1	760	5739	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10
17	fs_760_2	760	5739	0	6	4	.	0	0	.	.	9	0	6	4	.	0	1	*	0	8	0	5	4	.	0	1	.	0	9
18	fs_760_3	760	5816	.	.	.	.	.	.	.	.	0	.	.	.	.	.	.	.	.	0	.	.	.	.	.	.	.	.	0
19	gre_1107	1107	5664	.	.	.	.	.	.	.	.	.	.	*	*	.	.	.	.	.	.	.	.	.	.	.	.	.	.	.
20	gre__115	115	421	.	.	.	.	.	.	.	.	.	.	*	*	.	.	.	*	.	.	.	.	.	.	.	.	.	.	.
21	jpwh_991	991	6027	bd	bd	bd	bd	bd	bd	bd	bd	bd	bd	10	10	*	9	9	10	10	10	bd	10	10	10	9	8	10	10	10
22	mcca	180	2659	*	9	*	.	*	*	.	8	9	*	9	*	*	*	*	.	8	9	*	9	0	.	*	0	.	7	9
23	mcfe	765	24382	*	10	*	.	*	*	.	9	10	*	10	*	.	*	*	*	9	10	.	10	*	.	*	.	.	9	10
24	memplus	17758	99147	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10
25	olm1000	1000	3996	.	.	.	.	bd	.	.	.	10	.	8	.	.	bd	.	.	6	10	.	9	.	.	bd	.	.	8	10
26	olm2000	2000	7996	.	.	.	.	bd	.	.	6	10	.	9	.	.	bd	.	.	*	10	.	9	.	.	.	.	.	7	10
27	olm5000	5000	19996	.	.	.	.	bd	.	.	9	10	.	10	.	.	bd	.	.	9	10	.	10	.	.	bd	.	.	9	10
28	pde2961	2961	14585	7	10	10	10	8	9	.	10	10	*	10	10	10	*	9	.	10	10	*	10	9	10	*	9	.	10	10
29	pde900	900	4380	*	9	9	*	7	8	.	10	10	5	9	9	*	7	8	*	10	10	5	9	9	0	7	8	.	10	10
30	poisson3Da	13514	352762	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10
31	poisson3Db	85623	2374949	*	10	10	10	*	10	10	10	10	*	10	10	10	*	10	10	10	10	*	10	10	10	*	10	10	10	10
32	raefsky1	3242	293409	*	10	10	.	6	9	10	10	10	*	10	10	.	6	9	10	10	10	*	10	10	.	6	9	10	10	10
33	raefsky2	3242	293551	1	10	9	.	4	9	10	10	10	1	10	9	.	*	8	10	10	10	*	10	9	.	*	8	10	10	10
34	raefsky3	21200	1488768	0	10	0	.	.	10	.	.	0	.	10	.	.	0	10	*	.	2	.	10	0	.	.	10	.	.	.
35	raefsky5	6316	167178	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10
36	raefsky6	3402	130371	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10
37	sherman1	1000	3750	0	8	5	10	1	9	7	9	10	0	8	5	10	1	9	7	9	10	0	8	5	10	1	9	7	9	10
38	sherman2	1080	23094	.	10	.	.	.	.	.	0	10	.	10	*	.	.	.	.	*	10	.	10	.	.	.	.	.	0	10
39	sherman3	5005	20033	*	9	8	10	*	*	10	9	10	*	10	9	10	5	6	10	10	10	*	9	8	10	5	4	10	10	10
40	sherman4	1104	3786	6	9	9	10	7	6	10	9	10	7	9	9	10	7	6	10	9	10	6	9	9	10	7	6	10	9	10
41	sherman5	3312	20793	9	10	10	.	9	8	.	10	10	9	10	10	.	9	9	.	10	10	9	10	10	.	9	9	.	10	10
42	sme3Dc	42930	3148656	.	.	9	10	.	.	10	.	.	.	.	9	10	.	.	10	*	.	.	.	8	10	.	.	10	.	.
43	torso2	115967	1033473	10	10	10	.	10	10	10	10	10	10	10	10	.	10	10	10	10	10	10	10	10	.	10	10	10	10	10
44	viscoplastic2	32769	381326	9	.	10	.	.	.	.	.	.	9	9	10	*	0	.	.	.	.	9	9	10	.	0	.	.	.	.
45	watt_1	1856	11360	8	10	10	10	8	10	10	10	10	7	9	9	10	8	10	10	10	10	8	10	9	10	8	10	10	10	10
46	watt_2	1856	11550	6	9	9	.	7	9	9	9	10	5	8	9	*	5	9	9	9	10	6	9	9	.	6	9	9	9	10
47	xenon1	48600	1181120	9	.	10	10	9	9	10	.	.	9	.	10	10	9	9	10	.	*	9	.	10	10	9	9	10	.	.
48	xenon2	157464	3866688	10	.	10	10	10	10	10	.	.	10	.	10	10	10	10	10	.	*	10	.	10	10	10	10	10	.	.

図 1.　様々な求解問題に対する各 PCGS アルゴリズムの求解状況（青枠にて区別）．各枠内は 9 種類の前処理演算(点ヤコビ, ILU, SSOR, Hybrid, I+S, SAINV, SA-AMG, Crout ILU, ILUT)の性能を表示．グレーは表面上の収束の発生を表す，各々におけるグレーの件数;Conventional PCGS(左枠:24 件)，Left-PCGS(中央枠:52 件)，Improved1 PCGS(右枠:18 件)

本研究では，従来から用いられてきた右前処理系の PCGS アルゴリズムは求解状況が悪く，左前処理系の PCGS アルゴリズムでは表面上の収束が生じることを示した．

改善版 PCGS では，反復部分の前処理演算数を増やさずに 2 タイプの残差ベクトルの情報を持っている．今後の研究課題として，これらの情報を活用して，さらなる求解性能向上にも取り組んでいる．

この研究項目は，「２．研究の目的」の 1),3)に該当し，「３．研究の方法」の A),C)に基づき実施した．ここでの成果は「５．主な発表論文等」に記載した〔雑誌論文〕①として発表した．

（３） ４種類の PBiCG における比較分析，および，前処理系の方向に関する考察

ここでは，（２）で分析した４種類の PCGS に対応する４種類の PBiCG アルゴリズムについて分析した．解法の歴史的には BiCG 法から CGS 法が導出されたが，本研究では，PCGS の特性を分析するために，解法の基本

原理に遡ったという位置付けである．(P)CGS 法では，表面上，双対系（シャドウ）に関する情報は初期シャドウ残差ベクトルのみであるため，数理上の関連をより明確にするよう双対系の残差ベクトルと探索方向ベクトルが明示される(P)BiCG 法に遡った分析を実施した．

４種類の PBiCG は各々異なるアルゴリズム記述であり，等価な関係の Impr1 PCGS に対応する PBiCG（Standard PBiCG）と Impr2 PCGS に対応する PBiCG 以外はアルゴリズム中の残差ベクトルの振舞いも異なる．ところが，アルゴリズム中の各ベクトルの多項式構造を分析すると，これらの PBiCG の反復部分は全て数理的に同じ構造であることが確認された．さらに，Standard PBiCG の反復前の

$$\left(\tilde{r}_0^{\#}, \tilde{r}_0\right) \neq 0, \text{ e.g., } \tilde{r}_0^{\#} = \tilde{r}_0,$$

にて，初期シャドウ残差ベクトル(ISRV)の構成と設定の変更により，下記のとおり，前処理系の方向が切り替わることが理論的にも確認された．

$r_0^{\#} = M^{-1} r_0$　　：左前処理系

$r_0^{\#} = M_R^T M_L^{-1} r_0$　：両側前処理系

$r_0^{\#} = M^T r_0$　　：右前処理系

これは単なる初期値の違いという短絡的な話では無く，簡易実装を実現するための仕組みとなることも分かった．

一方，従来からの典型的なアルゴリズム記述では $r_0^{\#} = r_0$ とされており，この場合，前処理系は上記３種類のいずれにも当てはまらず，良いアルゴリズムとは言い難い．

この研究項目は，「２．研究の目的」の 2) に該当し，「３．研究の方法」の A),B)に基づき実施した．ここでの成果は「５．主な発表論文等」に記載した〔雑誌論文〕②として発表した．

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　3　件）

① Shoji Itoh, Masaaki Sugihara, The structure of the Krylov subspace in various preconditioned CGS algorithms, arXiv:1603.00176 [math.NA], preprint, 21 pages, (2016).

② Shoji Itoh, Masaaki Sugihara, The structure of the polynomials in preconditioned BiCG algorithms and the switching direction of preconditioned systems, arXiv:1603.00175 [math.NA], preprint, 21 pages, (2016).

③ Shoji Itoh, Masaaki Sugihara, Formulation of a preconditioned algorithm for the conjugate gradient squared method in accordance with its logical structure, Applied Mathematics, Vol. 6, No. 8, pp. 1389–1406, (2015).

〔学会発表〕（計　5　件）

① 伊藤祥司，杉原正顯，双ランチョス解法の初期シャドウ残差ベクトルによる前処理系の切り替え，研究会「応用解析研究会～可積分系から計算数学まで～」，天満研修センター（大阪市），2016 年 5 月 20 日．(Poster)

② 伊藤祥司，大規模線形方程式に対する求解アルゴリズムの体系的性能評価手法について，電気通信大学　数値解析・HPC セミナー（第 1 回），電気通信大学（調布市），2015 年 7 月 23 日．

③ 伊藤祥司，杉原正顯，線形方程式向き双ランチョス系統の前処理付きアルゴリズムに対する初期シャドウ残差ベクトルの構成方法について，日本応用数理学会 2014 年度年会，講演番号 50_1，2 Pages，政策研究大学院大学（東京都港区），2014 年 9 月 5 日．

④ 伊藤祥司，杉原正顯，様々な前処理付き CGS に対する分析とそれに基づく新アルゴリズムの提案，2014 年並列／分散／協調処理に関する『新潟』サマー・ワークショップ（SWoPP 新潟 2014），朱鷺メッセ新潟コンベンションセンター（新潟県新潟市），研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング(HPC)，2014-HPC-145(19)，11 Pages，2014 年 7 月 29 日．

⑤ 伊藤祥司，杉原正顯，前処理付き BiCG に対する初期シャドウ残差ベクトルの構成方法と前処理系の切り替えについて，日本応用数理学会 2013 年度年会，講演番号 9012，pp.22–23，アクロス福岡（福岡市），2013 年 9 月 9 日．

〔その他〕

ホームページ等

http://sesna.jp

６．研究組織

(1) 研究代表者

伊藤　祥司（ITOH, Shoji）

東京電機大学・理工学部・研究員

研究者番号：７０３３３４８２

(3) 連携研究者

杉原　正顯（SUGIHARA, Masaaki）

青山学院大学・理工学部・教授

研究者番号：８０１５４４８３