

科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 4 年 6 月 14 日現在

機関番号：34412

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2018～2021

課題番号：18K11342

研究課題名(和文)大規模線形方程式に対する安定・高精度求解を実現する数値解法の研究

研究課題名(英文)A study on numerical solution methods with stable and high accuracy for large-scale linear systems

研究代表者

伊藤 祥司 (Itoh, Shoji)

大阪電気通信大学・工学部・特任准教授

研究者番号：70333482

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,400,000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ける反復解法の前処理付きアルゴリズムに関する研究を行った。我々が開発した改善版と従来から用いられてきているアルゴリズムに対する数値面からの分析により、線形方程式(線形系)に対する双対系の初期残差ベクトルの構成と設定が線形系の解の構造にも影響を及ぼすことが分かった。また、改善版の演算量や計算時間を増やさず、高精度求解を実現できることを関連する定理と実装手法を提案した。さらに、双対型と残差ノルムを局所的に最小化する演算を組み合わせた“積型反復法”についても本提案手法は適用可能であり、数値実験により効果が確認され、より安定した高精度な数値解の算出を実現できた。

研究成果の学術的意義や社会的意義

自然科学における様々な現象解明・予測や工学問題の解決や新技術開発において、多くの場合、大規模な線形方程式の求解に帰着される。そこでは、如何に安定かつ高精度に求解できるかが非常に重要である。近年、その様な線形方程式はクリロフ部分空間法に基づく反復解法を用いて求解されることが多く、求解性向上が期待される前処理併用による効果も大きい。ところが、前処理方法の設計が悪いと十分な精度で求解できない場合も少なくない。つまり、前処理付き解法の適切な設計が極めて重要である。本研究課題の学術的意義は、前処理付き解法による安定求解の本質的な原理の解明、および、高精度求解に向けた数値面からの追及である。

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. By comparing the logical structures of these algorithms, we show that the direction of the preconditioned system can be switched by the construction and setting of the initial shadow residual vector. And we propose a changing over stopping criterion for the improved PCGS, that results in a higher accuracy than the conventional and the left-PCGS. Further, we proposed improved algorithms for preconditioned bi-Lanczos-type methods with residual norm minimization for the stable solution of systems of linear equations. In particular, preconditioned algorithms pertaining to the bi-conjugate gradient stabilized method (BiCGStab) and the generalized product-type method based on the BiCG (GPBiCG) have been improved. Numerical results showed the improvements with respect to the preconditioned BiCGStab, the preconditioned GPBiCG, and stopping criterion changeover.

研究分野：数値解析学

キーワード：クリロフ部分空間法 双ランチョス 前処理系 積型反復法

1. 研究開始当初の背景

自然科学における様々な現象解明・予測や工学問題の解決や新技術開発において、多くの場合、大規模な線形方程式 $Ax = b$ に対するコンピュータによる求解に帰着される。そこでは、如何に安定かつ高精度に求解できるかが非常に重要である。この様な線形方程式は、CGS 法や BiCGStab 法などクリロフ部分空間(KSP)法に基づく反復解法を用いて求解されることが多い。特に、求解性向上が期待される前処理併用による効果も大きい。ところが、前処理方法の設計が悪いと、様々な前処理演算を用いても十分な精度で求解できない場合も少なくない。つまり、前処理付き解法の適切な設計が極めて重要である。

2. 研究の目的

本研究の目的は多くの前処理付きクリロフ部分空間法(前処理付き KSP 法)に対する安定求解と高精度求解の実現と実装である。収束の振舞い自体は安定な前処理無し解法であっても、求解問題によっては前処理を併用しないと解けない場合も多い。一方、前処理付き解法に伴う新たな問題点として、表面上収束していても数値解の精度は不十分という場合もある。

我々の先行研究では、PCGS (Preconditioned CGS, 前処理付き CGS)を、標準的 PBiCG と等価となるよう設計を改善し、従来版より安定な求解を実現した(改善 I ; 図 1)。本研究では改善 I を PCGS 以外の解法(表 1)にも拡張適用し、さらに高精度求解の実現へと発展させる(改善 II)ことが目的である。

表 1 非対称系線形方程式に対する代表的なクリロフ部分空間法のカテゴリ

双ランチョス型(Bi-Lanczos-type)	アーノルディ型(Arnoldi-type)
残差双直交化(BiCG 演算): BiCG 法, CGS 法, 他	残差最小化 (MR: Minimal Residual 演算):
BiCG 演算&局所 MR 演算: BiCGStab 法, GPBiCG 法, BiCGStab(L)法, 他	GMRES 法, GCR 法, Orthomin(k)法, 他

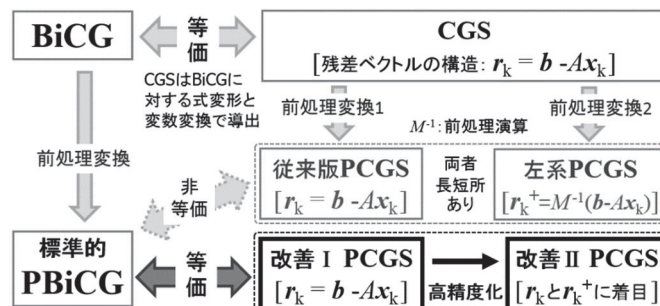


図 1 BiCG と CGS の関係, および改善版 PCGS の関係

KSP 法の前処理付き解法のアルゴリズムには、線形方程式に対し前処理演算を作用させる方向に応じて、主に右前処理系(右系:従来版の多くがこちら)と左前処理系(左系)とがある。本研究で各々の長所を兼ね備えたアルゴリズムを提案する。

3. 研究の方法

本研究では大きく下記の A と B を実施する。

A. 様々な KSP 法への改善 I の適用

様々な KSP 法への改善 I の適用: 様々な KSP 法の中で改善 I の適用可否の範囲(または、適用不可能な解法の分類)に関する研究の実施

本研究では PCGS 以外の解法にも改善 I を拡張し適用する。そのとき、PCGS と同様の効果を期待できるものの、解法の数値特性に応じた実装方法の検討が必要な解法もある。

さらに本研究では、BiCG 法や CGS 法を発展させた解法で、頻繁に用いられる BiCGStab 法や GPBiCG 法の前処理付き解法を改善し、数値実験にて検証する。これらの解法は BiCG 法や CGS 法とは異なる数値特性を有し(主に MR 演算の付随)、そこが新たな論点となる。また、双ランチョス型以外の解法に対する改善 I の適用の可否に関する研究も行う。

B. 改善 I を活用した改善 II により数値解を更に高精度化

改善 I を活用した改善 II により数値解を更に高精度化: 改善 I が適用可能な前処理付き解法の更なる高精度化(改善 II)、および、適用不可な解法の改善の研究の実施

改善 I だけでは精度面で左系に劣る場合でも、改善 II の併用により高精度が実現されると予想される。ここで注意すべきは、左系の残差ベクトルが本来評価すべき情報とは異なるため、求

解問題次第で数値解の精度が悪い場合も多い。これらも本研究の枠内で改めて検証する。

この改善Ⅱは、現状では、改善Ⅰを施した前処理付き解法に対して適用可能であり、左系には適用不可能と思われる。本研究では、どの前処理付き解法に対し改善Ⅰ、Ⅱが適用可能か検証し、それら改善を取り入れた新アルゴリズムを開発し数値実験にて検証する。

4. 研究成果

本研究の中で解く大規模線形方程式を

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

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。

線形方程式(1)の数理的性質の改善が期待される前処理とは、係数行列 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

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

と変換することに相当する。式(2)の係数行列 $(M_L^{-1} A M_R^{-1})$ は単位行列に近くなり、求解する問題の性質が改善されることが期待される。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に求解アルゴリズム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により線形方程式(1)を解く。また本研究では前処理系の行列やベクトルにチルダ ($\tilde{\cdot}$) を付して表す。(2)式の場合は、次のとおり表す。

$$\tilde{A} \tilde{x} = \tilde{b}. \quad (3)$$

線形方程式(1)に対する反復求解において、第 k 回目($k = 1, 2, \dots$)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 (x_0 は初期解)。

一方、BiCG法は非対称系の解法であり、(1)に対する双対系(通称: Shadow)の方程式

$$A^T x^\# = b^\#$$

を想定して構成された解法である。ここで A^T は行列 A の転置行列を表し、 $x^\#$ 、 $b^\#$ はいずれも双対系を構成する際に想定するベクトルである。本研究では双対系の初期残差ベクトル $r_0^\# = b^\# - A^T x_0^\#$ を初期シャドウ残差ベクトル (ISRV: Initial Shadow Residual Vector) と呼ぶことにする。

CGS法はBiCG法に対する等価な式変形と変数変換により導出される。CGS法やBiCGStab法はBiCG法の残差ベクトルを構成する多項式に各解法独自の多項式を作用させている。解ベクトルを構成するCGS法の多項式を $\Phi_k(A)r_0 = \alpha_k(u_k + q_k)$ と表すと、 $x_k = x_{k-1} + \Phi_{k-1}(A)r_0$ である。

前処理無しCGS法に関する定理や手順等を前処理系に適用したとき、改善版PCGS (改善Ⅰ PCGS; Alg.1)が導出される。改善ⅠPCGSについては図1を参照。

Algorithm 1: 改善版 PCGS (改善Ⅰ)

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

For $k = 0, 1, 2, \dots$, Do

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

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

$$\alpha_k = \frac{\langle r_0^\#, M^{-1}r_k \rangle}{\langle r_0^\#, M^{-1}Ap_k \rangle},$$

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

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k(u_k + q_k), \quad (4)$$

$$r_{k+1} = r_k - \alpha_k A(u_k + q_k), \quad (5)$$

$$\beta_k = \frac{\langle r_0^\#, M^{-1}r_{k+1} \rangle}{\langle r_0^\#, M^{-1}r_k \rangle},$$

End Do

Alg.1 の $\langle v_k^\#, v_k \rangle$ は線形系のベクトル v_k と双対系のベクトル $v_k^\#$ との内積を表す。

(1) 様々なPCGSアルゴリズムにおける前処理系の構造の分析

本研究では、上述の従来版PCGS、左前処理系PCGS、改善版PCGSについて比較分析した[1]。

ここではまず、各アルゴリズムの「残差ベクトルの数理解造」と「多項式と解の数理解造」の2項目をリストアップする。その後でこれら2項目について概説する。

■ 右前処理系 (右系, 従来版: Conventional PCGS)

多くの数値計算ライブラリや計算アルゴリズムで用いられる記述である。

・アルゴリズム中の残差ベクトルの数理解造:

$$r_k = b - (AM^{-1})(Mx_k) = b - Ax_k$$

本来の残差ベクトルの構造($r_k = b - Ax_k$)を保持している。

- ・多項式と解の数理構造： $M\mathbf{x}_k = M\mathbf{x}_{k-1} + \Phi_{k-1}^R(AM^{-1})\mathbf{r}_0$
解 \mathbf{x}_k 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数理構造：

$$\mathbf{r}_k = M^{-1}\mathbf{b} - M^{-1}A\mathbf{x}_k = M^{-1}(\mathbf{b} - A\mathbf{x}_k)$$

本来の残差ベクトルの構造を保持していない。

- ・多項式と解の数理構造： $\mathbf{x}_k = \mathbf{x}_{k-1} + \Phi_{k-1}^L(M^{-1}A)\mathbf{r}_0^+$ ($\mathbf{r}_0^+ \equiv M^{-1}\mathbf{r}_0$)
解 \mathbf{x}_k に対して前処理行列が作用していない。

■ 改善版（Improved PCGS）

右系・左系両方の長所を有している（Alg.1 は改善 I PCGS）。

- ・アルゴリズム中の残差ベクトルの数理構造：

$$\mathbf{r}_k = \mathbf{b} - A\mathbf{x}_k$$

本来の残差ベクトルの構造を保持している。

- ・多項式と解の数理構造： $\mathbf{x}_k = \mathbf{x}_{k-1} + M^{-1}\Phi_{k-1}^L(AM^{-1})\mathbf{r}_0$
解(\mathbf{x}_k)に対して前処理行列が作用していない。

上述した「アルゴリズム中の残差ベクトルの数理構造」とは、例えば Alg.1（改善 I）の場合、残差ベクトルは“アルゴリズム記述”としては(5)式だが、数理構造は $\mathbf{r}_k = \mathbf{b} - A\mathbf{x}_k$ と等価である。

また、「多項式と解の数理構造」とは、解の算出は“アルゴリズム記述”としては式(4)だが、解を構成するベクトルの多項式の数理構造に着目すると $\mathbf{x}_k = \mathbf{x}_{k-1} + M^{-1}\Phi_{k-1}^L(AM^{-1})\mathbf{r}_0$ である。改善 I に限らず、右前処理系、左前処理系の PCGS においても同様に“アルゴリズム記述”と“数理構造”の2つの側面を有している。

このような数理構造を分析すると、上記のアルゴリズムで残差ベクトルが本来の構造($\mathbf{r}_k = \mathbf{b} - A\mathbf{x}_k$)を保持しているのは右前処理系と改善版である。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。このことは次式のとおり、アルゴリズム中の残差ベクトル(ARR：Algorithm's Relative Residual)に基づく収束判定にも影響する。

$$\text{本来の残差ベクトルの ARR：} \quad \|\mathbf{r}_{k+1}\| / \|\mathbf{b}\|, \quad (6)$$

$$\text{左前処理系の ARR：} \quad \|\mathbf{r}_{k+1}^+\| / \|M^{-1}\mathbf{b}\| \quad (7)$$

ここで、 $\mathbf{r}_{k+1}^+ \equiv M^{-1}\mathbf{r}_{k+1}$ 、 $\|\mathbf{v}\|$ はベクトル \mathbf{v} のノルムである。

収束判定(7)では“見かけ上の収束”（アルゴリズム中の \mathbf{r}_{k+1}^+ による収束判定では収束しているものの、真の残差ベクトルでは精度が不十分であること）が生じる場合も多く、この点では右前処理系と両改善版の方が良い。ここで、真の残差ベクトルとは ARR で収束したときに算出された数値解($\hat{\mathbf{x}}$)に対する真の残差ベクトル($\hat{\mathbf{r}} = \mathbf{b} - A\hat{\mathbf{x}}$)のことである。一方で、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 \mathbf{x}_k を直接構成している。右前処理系（解を構成する多項式の右上に R を付して $\Phi_{k-1}^R(AM^{-1})\mathbf{r}_0$ と表記している）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 が生成されており、コンピュータによる計算では誤差が混入し易くなる欠点を有する。この点では左前処理系（ $\Phi_{k-1}^L(M^{-1}A)\mathbf{r}_0^+$ ）と両改善版の方が良い。また、改善版が構成するベクトルは左前処理系に準じていることも確認された（ $M^{-1}\Phi_{k-1}^L(AM^{-1})\mathbf{r}_0 = \Phi_{k-1}^L(M^{-1}A)\mathbf{r}_0^+$ ）。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確認できた。

本研究では、前処理無しの系における様々な議論をあらためて前処理系における定理として一般化した[1]。(2)式に基づく前処理変換では、PCGS アルゴリズムの反復演算部分は、右前処理変換、左前処理変換（および両側前処理変換）は全て同じアルゴリズム記述に帰着される（一貫性）。しかし、初期シャドウ残差ベクトル(ISRV)の構成と設定に応じて左右方向の前処理系が異なる。また、右前処理系と左前処理系の違いはアルゴリズム中で算出されるスカラー α_k や β_k の違いとしても現れる。

(2) 収束判定の切り替えによる計算精度の向上（改善 II の提案）

左前処理系は見かけ上の収束が生じるものの、真の残差 (TRR：True Relative Residual；真の残差ベクトルによる相対残差ノルムのこと) が十分な精度であるときは、上述の前処理付きアルゴリズム間で比較すると高精度であることも少なくない。このことに着目して改善版の収束判定方法を見直し、収束判定を(6)から(7)へ切り替える方法(Change over stopping criterion)を提案した(図 2) [2]。この切り替えは、改善版 PCGS であれば余計な演算を増やすことなく実現できるが、従来の右前処理系や左前処理系では Change over のためだけの余計な演算コストが増加する。

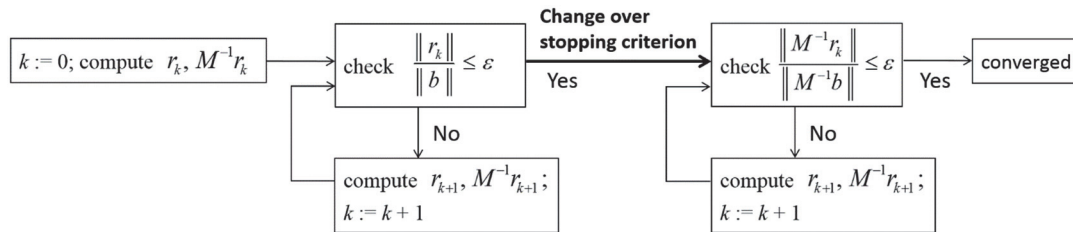


図 2 収束判定の切り替え(Change over stopping criterion)

(3) 4 種類の PBiCGStab の求解性能の比較と Change over による高精度化

PCGS の改善を局所 MR 演算を伴う PBiCGStab と PGPBiCG に適用した. さらに, 従来版アルゴリズムに僅かな変更を施すだけで改善 I と数学的に等価となり同様の効果を期待できる簡易実装版も提案した[3].

ここではテスト問題として 6 種類の線形方程式を用意し, PBiCGStab の従来版でもある右前処理系(Right), 左前処理系(Left)と右前処理系の収束判定の切り替え(RtL), および改善版の就職判定の切り替え(C1tL)の 4 種類のアルゴリズムを比較した (表 2). 収束判定ではアルゴリズム中の残差ベクトルと右辺項による相対残差ノルムに対し, $\|r_{k+1}\|_2 / \|b\|_2 \leq 10^{-12}$, 左前処理系では $\|r_{k+1}^+\|_2 / \|M^{-1}b\|_2 \leq 10^{-12}$ を満たせば収束と判定した (ARR; ベクトル v に対する $\|v\|_2$ は 2-ノルムを表す). 真の残差ベクトルによる相対残差ノルム(TRR)を $\|\hat{r}\|_2 / \|b\|_2$ とし, 予め用意した厳密解 x_{exact} との相対誤差ノルム TRE (True Relative Error) を $\|\hat{x} - x_{exact}\|_2 / \|x_{exact}\|_2$ とする. ARR と比べて TRR や TRE は厳しい条件のため, 本研究では TRR と TRE は 10^{-8} 以下であれば十分な精度であると見做す. ここで, TRE が高精度であることが重要である. 反復回数の上限值(Max; 上限値の変数を mx と表す)は 1000 回とし, 収束しにくい問題に対して viscoplastic2 では mx=2000, young3c では mx=2500 とした.

表 2 PBiCGStab に対する数値実験の結果

Matrix	Right	Left	RtL (Right to L)	C1tL (Case1 to L)
olm2000	3.26 (739)	-13.07 (39)	3.26 (739)	-13.51 (37)
	7.04 BD	-9.00	7.04 BD	-11.38
olm5000	56.35 (Max)	-13.17 (38)	56.35 (Max)	-13.18 (30)
	60.75	-10.02	60.75	-9.36
raefsky3	-12.17 (118)	-14.97 (172)	-15.09 (204)	-15.11 (180)
	-4.50	-11.30	-11.08	-10.84
viscoplastic1	-12.43 (682)	-9.94 (518)	-12.43 (682)	-12.23 (666)
	-8.88	-6.32	-8.88	-8.64
(mx=2000)	-12.07 (966)	-10.06 (761)	-12.07 (966)	-12.57 (1027)
viscoplastic2	-8.64	-6.62	-8.64	-9.14
(mx=2500)	-12.07 (1583)	-9.16 (1132)	-12.07 (1583)	-12.14 (1155)
young3c	-10.49	-8.04	-10.49	-10.54

表中の “BD” は breakdown を表し, アルゴリズム中の除算にて分母が 0 となった場合である. **太字**は精度不十分や **BD**, 反復回数が上限値 (Max = mx) に達したなどの問題点を伴う結果であることを示している.

この結果から Change over 自体の効果が確認された. 次に, 改善版であり左前処理系に基づく C1tL の結果は右前処理系に基づく RtL の結果と比べて, 太字の項目が 1 つもなく安定した求解状況であることが確認された.

本研究課題の成果は以下の論文[1]~[3]として発表した (本文中でも参考文献として参照している).

参考文献:

- [1] Itoh, S., Sugihara, M., Structure of the preconditioned system in various preconditioned conjugate gradient squared algorithms, RINAM., 3, 100008, 20 pages (2019).
- [2] Itoh, S., Sugihara, M., Changing over stopping criterion for stable solving nonsymmetric linear equations by preconditioned conjugate gradient squared method, AML, 102 (2020) 106088, 9 pages.
- [3] Itoh, S., Improvement of preconditioned bi-Lanczos-type algorithms with residual norm minimization for the stable solution of systems of linear equations, JJIAM, 39 (2022) pp.19-74.

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計3件（うち査読付論文 3件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 3件）

1. 著者名 Itoh Shoji, Sugihara Masaaki	4. 巻 102
2. 論文標題 Changing over stopping criterion for stable solving nonsymmetric linear equations by preconditioned conjugate gradient squared method	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Applied Mathematics Letters	6. 最初と最後の頁 1-9
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1016/j.aml.2019.106088	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -

1. 著者名 Itoh Shoji, Sugihara Masaaki	4. 巻 3
2. 論文標題 Structure of the preconditioned system in various preconditioned conjugate gradient squared algorithms	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Results in Applied Mathematics	6. 最初と最後の頁 1-20
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1016/j.rinam.2019.100008	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -

1. 著者名 Itoh Shoji	4. 巻 39
2. 論文標題 Improvement of preconditioned bi-Lanczos-type algorithms with residual norm minimization for the stable solution of systems of linear equations	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics	6. 最初と最後の頁 19-74
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1007/s13160-021-00480-0	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -

〔学会発表〕 計2件（うち招待講演 2件/うち国際学会 0件）

1. 発表者名 伊藤祥司, 杉原正顯
2. 発表標題 双ランチョス型の前処理付きアルゴリズムにおける安定な求解方法の提案
3. 学会等名 京都大学数理解析研究所研究集会「次世代の科学技術を支える数値解析学の基盤整備と応用展開」（招待講演）
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 伊藤祥司
2. 発表標題 線形方程式の数値計算アルゴリズムに対する体系的性能評価
3. 学会等名 京都大学応用数学セミナー（第59回）（招待講演）
4. 発表年 2019年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

SESNA http://sesna.jp
--

6. 研究組織		
氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------