様式Ｃ－１９

科研費 KAKENHI

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　6 日現在

機関番号：12601
研究種目：基盤研究(C)
研究期間：2010～2012
課題番号：22560060
研究課題名（和文）　大規模線形方程式系に対する新数値解法，GBi-CGSTAB 法の研究

研究課題名（英文）　Research on GBi-CGSTAB, a new solver for large scale linear systems

研究代表者
杉原　正顯（SUGIHARA MASAAKI）
東京大学・大学院情報理工系研究科・教授
研究者番号：80154483

研究成果の概要（和文）：
大規模線形方程式系の数値解法，GBi-CGSTAB に関して以下の研究成果を得た：偽収束を防ぐ自動残差修正機構付 GBi-CGSTAB 法の開発，「残差と真の残差の差のノルムは反復初期からほとんど変わらず一定となっている」という新しい事実の発見，GBi-CGSTAB 法と IDRSTAB 法の比較研究， GBi-CGSTAB 法に基づく多数のシフト方程式を効率よく解くため解法の確立，GBiCGSTAB(s,L)法の複雑な導出の簡明化， 新数値解法，BiO-ML(s)BiCG 法等の開発.

研究成果の概要（英文）：
The following results have been obtained on GBi-CGSTAB, a new solver for large scale linear systems: GBi-CGSTAB equipped with auto-correction of residuals to avoid spurious convergence, a new findings ‘the difference between the residual and the true residual remains constant from the early stage on the iteration’, comparison between GBi-CGSTAB and IDRSTAB, GBi-CGSTAB for shifted linear systems, concise derivation of GBi-CGSTAB, BiO-ML(s)BiCG: a new solver related to GBi-CGSTAB.

交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合　計
２０１０年度	1,100,000	330,000	1,430.000
２０１１年度	1,000,000	300,000	1,300,000
２０１２年度	1,300,000	390,000	1,690,000
年度			
年度			
総　計	3,400,000	1,020,000	4,420,000

研究分野：数値解析
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：線形方程式系の数値解法，クリロフ部分空間法，BiCG 法，IDR(s)法，偽収束，シフト方程式，Lanczos 法

１．研究開始当初の背景

大規模線形方程式系の数値解法として，クリロフ部分空間法（共役勾配法系の解法ということもある）が現在主流である．その中で，計算に必要な記憶容量が少なくてすむ BiCG 法系統の方法がよく知られている． オリジナルの BiCG 法は，収束の仕方が不規則で安定性のあまり良くないものであったが，安定化多項式を付加するという工夫により，BiCGSTAB（安定化多項式の次数＝１），BiCGSTAB2（安定化多項式の次数＝２），BiCGSTAB(L)（安定化多項式の次数＝L（一般の自然数））と進化していった． その後，

暫く，この分野は停滞期に入るが，2007 年，今までとは全く異なる原理，IDR 原理により構築された数値解法 IDR(s)法がオランダの研究チームにより提案された．IDR(s)法では，s>1 のとき，丸め誤差がない理想的な状況では，今まで知られていた BiCG 法系統の解法より早く解を与えることが証明され，数値実験においても，数々の例において，BiCG 法系統のアルゴリズムに勝るとも劣らない収束性をもつことが示された．しかしながら，弱点「係数行列が歪対称に近いとき非常に収束性が悪い」も指摘された．

これに対して，研究代表者は，当時院生であった谷尾氏と協力し，IDR 原理を一般化した GIDR 原理を創出し，それに基づいて GIDR(s,L)法を提案し，GIDR(s,L)法は IDR(s)法の良い点を保持しながら，その弱点を克服する数値解法であることを示した．一方，オランダの研究チームは，高次元の shadow residual を持つ Bi-CG 法を導入し(Bi-CG(s)法と呼ばれている)，それに 1 次の安定化多項式を付加したアルゴリズムを提案し，そのアルゴリズム (Bi-CGSTAB(s)法と呼ばれている)が IDR(s)法と等価であることを示した．GIDR(s,L)法のアルゴリズムの導出は何となく「ぎこちない」との感じをもっていた我々は，この路線に乗り換え，オランダチームとは違った高次元の shadow residual を持つ Bi-CG 法を導入し(GBi-CG(s)法と名付けた)，L 次の安定化多項式を付加したアルゴリズム (GBi-CGSTAB(s,L)法と名付けた) を提案し，GIDR(s,L)法とまったく同じアルゴリズムが導かれることを示した．これにより，従来からある BiCG 法系統の解析方法が適用可能になり，アルゴリズムの解析が進んでいた．また，GBi-CGSTAB(s,L)法が，IDR(s)法や Bi-CGSTAB(L)法に優る例も発見され，その解析も望まれていた．オランダチームも，上記の高次元の shadow residual を持つ Bi-CG 法の延長線上で，L 次の安定化多項式を付加することに成功し， Bi-CGSTAB(s,L)法と呼ぶべき数値解法に到達した．ただし，名は IDR(s)STAB(L) としている．また，もとの Bi-CG(s)法に起因する不安定性を抑えるため，再直交化も行うというアルゴリズムとなっている．我々の GBi-CGSTAB(s,L)法においては，このような再直交化は必要ない．

２．研究の目的

上記のような研究背景の下，つぎの研究を行うことを目標とした：

(1) GBi-CGSTAB 法をより良いものにするための研究
① 偽収束を改善するための手法の GBi-CGSTAB 法への組込み (IDR(s)法の偽収束を改善するために提案された櫻井等による手法の組込み)
② 適切な前処理法の確立

(2) GBi-CGSTAB 法と IDRSTAB 法の比較研究

(3) GBi-CGSTAB 法に基づく，多数のシフト方程式

$$(A-\lambda_k I)x = b \ (k=1,..,K)$$

を効率よく解くための方法の確立．

３．研究の方法

適宜，数値実験を行って，アルゴリズムの振る舞いを確かめ，改良するという極めて標準的な方法を用いた．

４．研究成果

(1) GBi-CGSTAB 法をより良いものにするための研究
① 偽収束を改善するための手法の GBi-CGSTAB 法への組込み

IDR(s)法においては，しばしば，偽収束という現象 (アルゴリズム中で計算された残差が真の残差に必ずしも一致しない現象，収束判定を誤らせる) が起こることが指摘されていた．これに対して，櫻井等は，計算が簡単なある量をモニターして，必要なときには残差を定義にもどって計算するという算法を提案し，偽収束が起こらなくすることが可能であることを示した．GBi-CGSTAB 法においても，稀にではあるが，偽収束が起こる．これを改善するために，IDR(s) 法の場合に倣って，自動的に残差を修正する算法を開発し，数値実験を通してその有効性を調べた．その結果，数値的不安定性 (偽収束が起こること) が克服でき，計算時間も 10% 程度の増加に抑えることが出来ることが明らかとなった．

この研究を進める中で，「残差と真の残差の差のノルムは反復初期からほとんど変わらず一定となっている」という新しい事実を発見した．そこでこれを利用した偽収束を改善する自動残差修正機構を構築し，GBi-CGSTAB 法に組込んだ．そして，先に開発した自動残差修正機構の場合と比較し，同等以上の有効性をもつことを示した．

② 適切な前処理法の確立

いくつかの前処理を数値実験によって比較したが，決定的結果は得られなかった．

(2) GBi-CGSTAB 法と IDRSTAB 法の比較研究

研究の背景にも述べたように，van Gijzen と Sleijpen は，IDR(s)法の弱点を克服する数値解法として，我々とは独立に，IDRSTAB 法を提案した．この IDRSTAB 法と GBi-CGSTAB

法と比較を素朴な実装レベルで行った．その結果，GBi-CGSTAB 法の方が安定性に優れていることが判明した．

(3) GBi-CGSTAB 法に基づく多数のシフト方程式を効率よく解くため解法の確立

多数のシフト方程式効率よく解くためのクリロフ部分空間法として，Shifted GMRES 法，Shifted BiCGstab(L)法，Shifted IDR(s) 法など，様々なものが提案されている．ここではまず手法の基礎になる残差の共線性を GBiCG(s) 法の場合に確立し，GBiCG(s) 法によるシフト線形方程式の解法を与えた．そして，これに shifted BiCGSTAB(L) 法に倣いながら，安定化多項式を付加し，GBiCGSTAB(s,L) 法を基にしたシフト線形方程式の解法を構築した．数値実験により，既存手法と比較し，同等以上の性能を持つことを確かめた．特に，歪対称に近い係数行列を持つ，IDR(s) 法をベースとした手法では解けなかった問題に対して，有効であることを確かめた．

以下は，当初の研究目的にはないが，研究の進展に従って得られた成果である．

(4) GBiCGSTAB(s,L)法の複雑な導出の簡明化

GBiCGSTAB(s,L) 法の従来ある導出法は，Bi-CG 法から議論を始めるもので，かなり複雑であった．本研究では，理論上重要な Petrov-Galerkin 方式の Krylov 部分空間法をアルゴリズムとして与え，それを出発点とすることによって，算法導出の全体の流れを簡明なものとした．その際，Petrov-Galerkin 方式の Krylov 部分空間法のアルゴリズムが如何にも天下り的になるが，その背景に，多重 Lanczos 過程があることを示し，アルゴリズムが決して天下り的ではないことも示した．

(5) 新数値解法，BiO-ML(s)BiCG 法等の開発

(4)に述べた GBiCGSTAB(s,L)法の新しい導出により，次のことが明らかとなった：Petrov-Galerkin 方式の Krylov 部分空間法の安定化から BiCGstab(L)法が，BiCG(s)法，GBiCG(s)法，ML(s)BiCG 法の安定化からそれぞれ IDR(s)stab(L)法，GBiCGSTAB(s,L)法，ML(s)BiCG(L) 法が得られる．そして，Petrov-Galerkin 方式の Krylov 部分空間法において，残差とシャドウ残差が双直交するようにした解法が BiCG 法であり，BiCG(s)法，GBiCG(s)法，ML(s)BiCG 法においては残差とシャドウ残差が双直交するようにした解法は未開発である．これを受けて，本研究では BiCG(s)法，ML(s)BiCG 法において残差とシャドウ残差が双直交するようにした BiO-ML(s)BiCG 法，BiO-BiCG(s) 法を開発した(下図)．

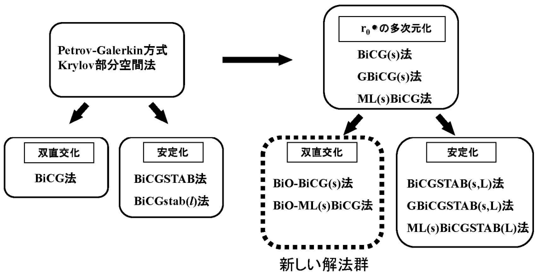

図１　新数値解法，BiO-ML(s)BiCG 法等

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１件）

① 塚田健，深堀康紀，谷尾真明，杉原正顕，自動残差修正機能付き GBi-CGSTAB(s,L) 法，数理解析研究所講究禄 1733 「科学技術計算アルゴリズムの数理的基盤と展開」，pp. 149-159，2011（査読無）．

〔学会発表〕（計４件）

① 小橋 昌明，松尾 宇泰，杉原 正顕，多重 Lanczos 過程に基づく連立１次方程式の数値解法，日本応用数理学会 2013 年研究部会連合発表会，2013 年３月 14 日，東洋大学，東京．

② 深堀康紀，杉原正顕，シフト方程式に対する GBi-CGSTAB(s,L)法，日本応用数理学会 2012 年研究部会連合発表会，2012 年３月８日，九州大学，福岡．

③ 深堀康紀，杉原正顕，GBi-CGSTAB(s,L)法の偽収束性，日本応用数理学会 2011 年度年会，2011 年９月 14 日，同志社大学，京都．

④ 塚田健，深堀康紀，谷尾真明，杉原正顕，自動残差修正機能付き GBi-CGSTAB(s,L) 法，ＲＩＭＳ研究集会「科学技術計算アルゴリズムの数理的基盤と展開」，2010 年 10 月 20 日，京都大学数理解析研究所，京都．

〔図書〕（計１件）

① 藤野清次，阿部邦美，杉原正顕，中嶋徳正，線形方程式の反復解法（計算力学レクチャーコース），第２章「GBi-CGSTAB(s,L)法」，pp.55―79，丸善，2013（印刷中）．

〔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
杉原　正顯（SUGIHARA MASAAKI）
東京大学・大学院情報理工学系研究科・教授
研究者番号：80154483

(2)研究分担者
　　　　　　　(　　)

　研究者番号：

(3)連携研究者
　　　　　　　(　　)

　研究者番号：