Japan Society for Simulation Technology

論文

実対称行列を係数にもつ線形方程式のための残差2乗型共役残差法†

阿部 邦美*・藤野 清次**・モートゥトゥ***

Squared-Type Method Based on the Conjugate Residual Method for Linear Systems with Real Symmetric Coefficient Matrices

Kuniyoshi Abe*, Seiji Fujino** and Moethuthu***

Abstract The conjugate gradient (CG) and conjugate residual (CR) methods are well known solvers for solving linear systems with real symmetric coefficient matrices. When applying to real symmetric matrices, the conjugate gradient squared (CGS) method is regarded as the squared-type method based on CG. Therefore, we propose a squared-type method based on CR, which has not developed previously, for solving linear systems with real symmetric matrices. We refer to it as sym_CRS. By numerical experiments for linear systems with real symmetric positive definite, real symmetric indefinite and complex symmetric coefficient matrices, we compare the convergence behavior among CG, CR and sym_CRS.

Key words: Linear systems, Conjugate gradient method, Conjugate residual method, Symmetric matrices, Squared-type method

1. はじめに

$n \times n$ の行列 A を係数行列に持ち，n 次ベクトル $\boldsymbol{b}, \boldsymbol{x}$ を右辺項，解に持つ線形方程式

$$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \tag{1.1}$$

をKrylov 空間法によって近似的に解くことを考える．係数行列が実対称正定値の場合，残差がKrylov 部分空間と直交する条件に基づいて導出されるConjugate Gradient method(共役勾配法，CG 法)[7]によって，(破綻することなく)解を求められることが知られている．さらに，CG法を正負の固有値を持つ実対称行列や半正定値実対称行列に適用したとき，多くの場合，CG法は破綻しないことが明らかにされている[8,9,13]．また，CG法と同じ漸化式によって解，残差ベクトルが更新されるが，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Conjugate Residual method(共役残差法，CR法)[5]も実対称な線形方程式に有効であることが知られている．

さらに，非対称な係数行列のための解法の1つとしてBi-Conjugate Gradient method(双共役勾配法，BiCG法)[6]が案出されている．そして，BiCG法のアルゴリズムが A^T を記憶する必要があるという短所を回避するため，また収束性を高めるために，残差ベクトルがBiCG法の残差多項式の2乗で定義されるConjugate Gradient Squared method(CGS法)[10]が積型反復解法[17,18]の第一版として開発された．その後，非対称な線形方程式を解くためにBi-Conjugate Gradient STABilized method(BiCGSTAB 法)[15]，Generalized Product-type method based on BiCG(GPBiCG 法)[17,18]などの積型反復解法が開発された．近年では，非対称行列用CR法に基づく積型反復解法も提案されている[1,12]．

* 岐阜聖徳学園大学経済情報学部
Faculty of Economics and Information, Gifu Shotoku University
** 九州大学情報基盤研究開発センター
Research Institute for Information Technology, Kyushu University
*** 九州大学大学院システム情報科学府
Graduate School of Information Science and Electrical Engineering, Kyushu University
† 2007年7月27日受付　2007年10月12日再受付

NII-Electronic Library Service

Japan Society for Simulation Technology

近年に開発されたこれらの解法は非対称行列のためのものであるが, CGS法を実対称行列に適用した場合, 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)として解釈でき, 実対称行列を係数にもつ線形方程式を解くための積型反復解法と考えることができる. 一方, 非対称行列のために開発された文献1), 12)の解法の残差多項式の係数は実対称行列用CR法から導かれたものではないため, 文献1), 12)の解法は残差2乗型CR法と解釈することはできない. そこで, CR法に基づく実対称な線形方程式のための積型反復解法を改めて考える.

本論文では, 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, Squared-type method based on CR method for solving linear systems with real symmetric coefficient matrices(以下, sym_CRS法と呼ぶ)を提案する. CR法の解, 残差ベクトルを更新する漸化式がCG法と同じであることに着目すれば, sym_CRS法の解, 残差ベクトルを生成する漸化式は, CGS法の漸化式と同じ手順によって導くことができる. また, sym_CRS法の残差多項式の係数は, CR法の残差多項式の係数の決定法を取り入れることによって定める. すなわち, CR法の残差多項式の係数をsym_CRS法のアルゴリズムで現われる補助ベクトルによって書き変えれば, sym_CRS法の残差多項式の係数の計算方法を導くことができる. 数値実験では, 偏微分方程式を離散化したときに得られる正定値実対称行列, およびデータベースに収納されている正定値実対称行列, 定値性のない実対称行列を取り上げ, 提案する解法とCG法, CR法との収束性を比較する. さらに, 複素対称行列を係数に持つ線形方程式にCG法, CR法を適用した場合, これらのアルゴリズムは破綻しないケースがあることが報告されているため, 複素係数の対称な線形方程式に提案する解法とCG法, CR法を適用し, 収束性を検証する.

本論文の第2節では, CR法について記述する. 第3節では, CR法の残差多項式の係数の計算方法をsym_CRS法に取り入れることによって, 実対称行列のための残差2乗型CR法を導出する. 第4節では, いくつかの対称な線形方程式に関する数値実験を取り上げ, 従来から利用されているCG法, CR法と提案するsym_CRS法との収束性を比較し, 有効性を検証する. そして, 最後に第5節でまとめを行なう.

2. 共役残差法

本節では, CR法のアルゴリズムおよびそこで現われるベクトル $\boldsymbol{r}_k^{\mathrm{CR}}, \boldsymbol{p}_k^{\mathrm{CR}}$ を表す多項式について述べる.

まず, 文献5)に沿って, CR法のアルゴリズムを記述する.

CR法のアルゴリズム：

Let $\boldsymbol{x}_0$ be an initial guess, and put $\boldsymbol{r}_0 = \boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_0$.

Set $\beta_{-1} = 0$, $\boldsymbol{x}_0^{\mathrm{CR}} = \boldsymbol{x}_0$, $\boldsymbol{r}_0^{\mathrm{CR}} = \boldsymbol{r}_0$.

For $k = 0, 1, \ldots$ until $\|\boldsymbol{r}_{k+1}^{\mathrm{CR}}\|_2 / \|\boldsymbol{r}_0^{\mathrm{CR}}\|_2 < \epsilon_{TOL}$ do :

begin

$$\boldsymbol{p}_k^{\mathrm{CR}} = \boldsymbol{r}_k^{\mathrm{CR}} + \beta_{k-1}\boldsymbol{p}_{k-1}^{\mathrm{CR}} \tag{2.1}$$

$$\alpha_k = \frac{(A\boldsymbol{r}_k^{\mathrm{CR}}, \boldsymbol{r}_k^{\mathrm{CR}})}{(A\boldsymbol{p}_k^{\mathrm{CR}}, A\boldsymbol{p}_k^{\mathrm{CR}})} \tag{2.2}$$

$$\boldsymbol{x}_{k+1}^{\mathrm{CR}} = \boldsymbol{x}_k^{\mathrm{CR}} + \alpha_k \boldsymbol{p}_k^{\mathrm{CR}}$$

$$\boldsymbol{r}_{k+1}^{\mathrm{CR}} = \boldsymbol{r}_k^{\mathrm{CR}} - \alpha_k A\boldsymbol{p}_k^{\mathrm{CR}}$$

$$\beta_k = \frac{(A\boldsymbol{r}_{k+1}^{\mathrm{CR}}, \boldsymbol{r}_{k+1}^{\mathrm{CR}})}{(A\boldsymbol{r}_k^{\mathrm{CR}}, \boldsymbol{r}_k^{\mathrm{CR}})} \tag{2.3}$$

end

ただし, 実際にCR法を利用するときには, 式(2.1)に A を掛けて, $A\boldsymbol{p}_k^{\mathrm{CR}} = A\boldsymbol{r}_k^{\mathrm{CR}} + \beta_{k-1}A\boldsymbol{p}_{k-1}^{\mathrm{CR}}$ とし, 新しいベクトル $\boldsymbol{q}_k^{\mathrm{CR}} = A\boldsymbol{p}_k^{\mathrm{CR}}$ を導入して書き変え, 反復一回あたりの行列ベクトル積の演算回数を減らす.

CR法の残差ベクトル $\boldsymbol{r}_k^{\mathrm{CR}}$ は k 次の多項式 $R_k(A)$ によって次のように表すことができる.

$$\boldsymbol{r}_k^{\mathrm{CR}} = R_k(A)\boldsymbol{r}_0. \tag{2.4}$$

ただし, 残差多項式 $R_k(A)$ はLanczos多項式と呼ばれ, 以下の漸化式を満たす[11].

$$R_0(\lambda) = 1, \quad R_1(\lambda) = 1 - \alpha_0\lambda,$$

$$R_{k+1}(\lambda) = \left(1 + \alpha_k\frac{\beta_{k-1}}{\alpha_{k-1}} - \alpha_k\lambda\right)R_k(\lambda) - \alpha_k\frac{\beta_{k-1}}{\alpha_{k-1}}R_{k-1}(\lambda).$$

$$k = 1, 2, \ldots$$

また, ベクトル $\boldsymbol{p}_k^{\mathrm{CR}}$ も多項式 $P_k(A)$ を用いて

$$\boldsymbol{p}_k^{\mathrm{CR}} = P_k(A)\boldsymbol{r}_0 \tag{2.5}$$

と表される. ただし, 多項式 $R_k(A)$ および $P_k(A)$ は次の関係を満たす.

$$R_{k+1}(A) = R_k(A) - \alpha_k AP_k(A),$$

$$P_{k+1}(A) = R_{k+1}(A) + \beta_k P_k(A).$$

3. 残差2乗型共役残差法

本節では, CR法の残差ベクトルの2乗で残差が定義される実対称行列のための解法を導出する.

次のように残差ベクトル $\boldsymbol{r}_k$ がCR法の残差多項式の2乗で定義される解法を考える.

$$\boldsymbol{r}_k := R_k^2(A)\boldsymbol{r}_0. \tag{3.1}$$

NII-Electronic Library Service

Japan Society for Simulation Technology

CR法の解，残差ベクトルを更新する漸化式はCG法と同じであること，およびCGS法はCG法の残差ベクトルの2乗で定義されている解法であることに着目すれば，提案する解法の解，残差ベクトルを更新するための漸化式はCGS法と同じである．すなわち，アルゴリズムを作成するためには残差多項式 $R_k^2(A)$ を更新する必要があるため，多項式 $R_{k+1}^2(A)$，$R_{k+1}(A)P_k(A)$，$P_{k+1}^2(A)$，$R_k(A)P_k(A)$ に関する更新式を導く必要がある[10]．これらの多項式を補助ベクトル $\boldsymbol{q}_k, \boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{u}_k$ によって

$$\boldsymbol{q}_k := R_{k+1}(A)P_k(A)\boldsymbol{r}_0, \tag{3.2}$$

$$\boldsymbol{r}_k := R_k^2(A)\boldsymbol{r}_0, \tag{3.3}$$

$$\boldsymbol{p}_k := R_k^2(A)\boldsymbol{r}_0, \tag{3.4}$$

$$\boldsymbol{u}_k := R_k(A)P_k(A)\boldsymbol{r}_0 \tag{3.5}$$

と定義すると，CGS法同様，ベクトル $\boldsymbol{q}_k, \boldsymbol{x}_k, \boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{u}_k$ の満たす漸化式は

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{q}_k &= \boldsymbol{u}_k - \alpha_k A\boldsymbol{p}_k,\\
\boldsymbol{x}_{k+1} &= \boldsymbol{x}_k + \alpha_k(u_k + q_k),\\
\boldsymbol{r}_{k+1} &= \boldsymbol{r}_k - \alpha_k A(u_k + q_k),\\
\boldsymbol{p}_{k+1} &= \boldsymbol{u}_{k+1} + \beta_k(\boldsymbol{q}_k + \beta_k\boldsymbol{p}_k),\\
\boldsymbol{u}_{k+1} &= \boldsymbol{r}_{k+1} + \beta_k\boldsymbol{q}_k
\end{aligned}$$

となる．

次に，多項式のパラメータ α_k, β_k の計算式を定める．まず，CR法のパラメータ α_k は式(2.2)によって表されるので，式(2.4)，(2.5)の多項式 $R_k(A), P_k(A)$ を用いて

$$\alpha_k = \frac{(AR_k(A)\boldsymbol{r}_0, R_k(A)\boldsymbol{r}_0)}{(AP_k(A)\boldsymbol{r}_0, AP_k(A)\boldsymbol{r}_0)}$$

と書ける．ここで，係数行列 A が対称であることに着目すれば，パラメータ α_k は，次のように書き変えることができる．

$$\alpha_k = \frac{(AR_k^2(A)\boldsymbol{r}_0, \boldsymbol{r}_0)}{(AP_k^2(A)\boldsymbol{r}_0, A\boldsymbol{r}_0)}.$$

したがって，sym_CRS法の α_k の計算方法は式(3.3)，(3.4)で定義したベクトル $\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{p}_k$ を用いて次のように与えられる．

$$\alpha_k = \frac{(A\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{r}_0)}{(A\boldsymbol{p}_k, A\boldsymbol{r}_0)}.$$

さらに，CR法のアルゴリズムで得られるベクトル $\boldsymbol{r}_k^{\mathrm{CR}}$，$\boldsymbol{p}_k^{\mathrm{CR}}$ は次の性質を満たす[14]．

$$(A\boldsymbol{p}_k^{\mathrm{CR}}, A\boldsymbol{p}_k^{\mathrm{CR}}) = (A\boldsymbol{p}_k^{\mathrm{CR}}, A\boldsymbol{r}_k^{\mathrm{CR}}), \tag{3.6}$$

$$(A\boldsymbol{r}_k^{\mathrm{CR}}, \boldsymbol{r}_k^{\mathrm{CR}}) = (A\boldsymbol{r}_k^{\mathrm{CR}}, \boldsymbol{p}_k^{\mathrm{CR}}). \tag{3.7}$$

これらの性質を利用すると，式(2.2)は

$$\begin{aligned}
\alpha_k &= \frac{(A\boldsymbol{r}_k^{\mathrm{CR}}, \boldsymbol{r}_k^{\mathrm{CR}})}{(A\boldsymbol{p}_k^{\mathrm{CR}}, A\boldsymbol{p}_k^{\mathrm{CR}})} = \frac{(A\boldsymbol{r}_k^{\mathrm{CR}}, \boldsymbol{p}_k^{\mathrm{CR}})}{(A\boldsymbol{p}_k^{\mathrm{CR}}, A\boldsymbol{p}_k^{\mathrm{CR}})}\\
&= \frac{(A\boldsymbol{r}_k^{\mathrm{CR}}, \boldsymbol{r}_k^{\mathrm{CR}})}{(A\boldsymbol{r}_k^{\mathrm{CR}}, A\boldsymbol{p}_k^{\mathrm{CR}})} = \frac{(A\boldsymbol{r}_k^{\mathrm{CR}}, \boldsymbol{p}_k^{\mathrm{CR}})}{(A\boldsymbol{r}_k^{\mathrm{CR}}, A\boldsymbol{p}_k^{\mathrm{CR}})}
\end{aligned}$$

と変形できる．したがって，最終的に，sym_CRS法の α_k の計算方法は式(3.3)-(3.5)で定義したベクトル $\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{p}_k$ および $\boldsymbol{u}_k$ を用いて次のような4種類の計算方法が与えられる．

$$\alpha_k = \frac{(A\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{r}_0)}{(A\boldsymbol{p}_k, A\boldsymbol{r}_0)} \tag{3.8}$$

$$= \frac{(A\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{r}_0)}{(A\boldsymbol{u}_k, A\boldsymbol{r}_0)} \tag{3.9}$$

$$= \frac{(A\boldsymbol{u}_k, \boldsymbol{r}_0)}{(A\boldsymbol{p}_k, A\boldsymbol{r}_0)} = \frac{(A\boldsymbol{u}_k, \boldsymbol{r}_0)}{(A\boldsymbol{u}_k, A\boldsymbol{r}_0)}.$$

次に，パラメータ β_k について考える．式(3.6)，(3.7)より，式(2.3)は次のように変形できる．

$$\begin{aligned}
\beta_k &= \frac{(A\boldsymbol{r}_{k+1}^{\mathrm{CR}}, \boldsymbol{r}_{k+1}^{\mathrm{CR}})}{(A\boldsymbol{r}_k^{\mathrm{CR}}, \boldsymbol{r}_k^{\mathrm{CR}})} = \frac{(A\boldsymbol{r}_{k+1}^{\mathrm{CR}}, \boldsymbol{r}_{k+1}^{\mathrm{CR}})}{(A\boldsymbol{r}_k^{\mathrm{CR}}, \boldsymbol{p}_k^{\mathrm{CR}})}\\
&= -\frac{(A\boldsymbol{r}_{k+1}^{\mathrm{CR}}, A\boldsymbol{p}_k^{\mathrm{CR}})}{(A\boldsymbol{p}_k^{\mathrm{CR}}, A\boldsymbol{p}_k^{\mathrm{CR}})} = -\frac{(A\boldsymbol{r}_{k+1}^{\mathrm{CR}}, A\boldsymbol{p}_k^{\mathrm{CR}})}{(A\boldsymbol{p}_k^{\mathrm{CR}}, A\boldsymbol{r}_k^{\mathrm{CR}})}.
\end{aligned}$$

したがって，sym_CRS法の β_k の計算方法は式(3.2)-(3.5)で定義したベクトル $\boldsymbol{q}_k, \boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{p}_k$ および $\boldsymbol{u}_k$ を用いて次のように与えられる．

$$\beta_k = \frac{(A\boldsymbol{r}_{k+1}, \boldsymbol{r}_0)}{(A\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{r}_0)} \tag{3.10}$$

$$= \frac{(A\boldsymbol{r}_{k+1}, \boldsymbol{r}_0)}{(A\boldsymbol{u}_k, \boldsymbol{r}_0)} = -\frac{(A\boldsymbol{q}_k, A\boldsymbol{r}_0)}{(A\boldsymbol{p}_k, A\boldsymbol{r}_0)} = -\frac{(A\boldsymbol{q}_k, A\boldsymbol{r}_0)}{(A\boldsymbol{u}_k, A\boldsymbol{r}_0)}.$$

以上，α_k, β_k の計算方法の組み合わせは合計16通り考えられる．

しかし，α_k, β_k を計算する組み合わせを考察するとき，内積の演算量が2回である場合が最も少なく，それに該当するのは式(3.8)-(3.10)を用いた場合である．ただし，式(3.8)-(3.10)を計算する場合，次の変形を行うことによって，新たに行列ベクトル積を計算することを避け，演算量の増加を抑えるようにした．

$$(A\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{r}_0) = (\boldsymbol{r}_k, A\boldsymbol{r}_0), \quad (A\boldsymbol{u}_k, A\boldsymbol{r}_0) = (\boldsymbol{u}_k, A^2\boldsymbol{r}_0).$$

以上，パラメータの計算方法および演算量を考慮すると，提案するsym_CRS法のアルゴリズムは次のようにまとめられる．ここで，sym_CRS法(version 1)のアルゴリズムは，文献1)で提案されたCRS法を実対称行列に適用し，かつ初期シャドゥ残差ベクトルを $\boldsymbol{r}_0^* = \boldsymbol{r}_0$

NII-Electronic Library Service

Japan Society for Simulation Technology

表1　反復一回あたりの演算量

method	matrix-vector	inner product	add or scaling
CG	1	2	6
CR	1	2	8
sym_CRS	2	2	13

と設定した場合と一致する．

sym_CRS法のアルゴリズム：

Let $\boldsymbol{x}_0$ be an initial guess, and put $\boldsymbol{r}_0 = \boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_0$.

Set $\boldsymbol{u}_0 = \boldsymbol{p}_0 = \boldsymbol{r}_0$, $A\boldsymbol{p}_0 = A\boldsymbol{r}_0$.

For $k = 0, 1, \ldots$ until $\|\boldsymbol{r}_{k+1}\|_2 / \|\boldsymbol{r}_0\|_2 < \epsilon_{TOL}$ do :

begin

$$\alpha_k = \frac{(\boldsymbol{r}_k, A\boldsymbol{r}_0)}{(A\boldsymbol{p}_k, A\boldsymbol{r}_0)} \text{ (version 1) or } \frac{(\boldsymbol{r}_k, A\boldsymbol{r}_0)}{(\boldsymbol{u}_k, A^2\boldsymbol{r}_0)} \text{ (version 2)}$$

$$\boldsymbol{q}_k = \boldsymbol{u}_k - \alpha_k A\boldsymbol{p}_k$$

$$\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{x}_k + \alpha_k(\boldsymbol{u}_k + \boldsymbol{q}_k)$$

$$\boldsymbol{r}_{k+1} = \boldsymbol{r}_k + \alpha_k A(\boldsymbol{u}_k + \boldsymbol{q}_k)$$

$$\beta_k = \frac{(\boldsymbol{r}_{k+1}, A\boldsymbol{r}_0)}{(\boldsymbol{r}_k, A\boldsymbol{r}_0)}$$

$$\boldsymbol{u}_{k+1} = \boldsymbol{r}_{k+1} + \beta_k \boldsymbol{q}_k$$

$$\boldsymbol{p}_{k+1} = \boldsymbol{u}_{k+1} + \beta_k(\boldsymbol{q}_k + \beta_k \boldsymbol{p}_k)$$

end

CG法，CR法，sym_CRS法の反復一回あたりの行列ベクトル積(matrix-vector)，内積(inner product)，ベクトルどうしの和，またはベクトルのスカラー倍(add or scaling)を**表1**にまとめる．

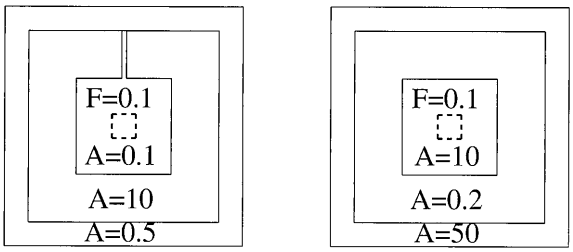
4.　数値実験

本節では，偏微分方程式を離散化したときに得られる正定値実対称行列，およびデータベースに収納されている正定値実対称行列，定値性のない実対称行列を取り上げ，CG法，CR法，sym_CRS法の収束性を比較する．さらに，複素対称行列を取り上げ，sym_CRS法の収束性を検証する．

4.1，4.3小節の数値実験はPC-AT互換機(Pentium Xeon 3.06GHz)において富士通Fortranコンパイラ version 4(コンパイルオプションは-Kfast)，また4.2小節の数値実験はPC-AT互換機(Pentium 4 3.2GHz)においてIntel Fortranコンパイラversion 7.1(コンパイルオプションは-O3)の倍精度浮動小数点演算によって実行された．初期解ベクトル $\boldsymbol{x}_0$ には一様乱数，収束判定条件は $\epsilon_{TOL} = 10^{-8}$ を採用した．

4.1　数値例1

正方形領域 $\Omega = (0, 1) \times (0, 1)$ において次の偏微分方程式の離散近似解を求める[15]．



ケースA (case A)　　ケースB (case B)

図1　関数 A と $F(x, y)$ の値の分布

表2　各解法の所要反復回数，計算時間(比率)，真の相対残差ノルム

		CG	CR	sym_CRS
case A	Iterations	1387	1246	829
	Time	1.299 (0.81)	1.671 (1.04)	1.604 (1.00)
	True res.	-8.0	-8.0	-8.0
case B	Iterations	2377	1958	930
	Time	2.161 (1.18)	2.609 (1.42)	1.828 (1.00)
	True res.	-8.0	-8.0	-8.0

$$-(Au_x)_x - (Au_y)_y = F(x, y). \qquad (4.1)$$

境界条件は，Dirichlet条件

$$u|_{x=0} = 1,\ u|_{x=1} = 1,\ u|_{y=0} = 1,\ u|_{y=1} = 0$$

を課す．式(4.1)の関数 $A(x, y)$，$F(x, y)$ の値を**図1**に示すような2種類の分布(ケースA, B(case A, B))に変化させた．また，関数 $F(x, y)$ は点線で囲まれた領域の外では0とする．

式(4.1)の境界値問題に対して領域全体を x, y 両方向に $129 (= M + 1)$ 等分して，両方向ともに等間隔で離散近似して得られた大きさ $M^2 \times M^2$ の正定値実対称行列を係数に持つ線形方程式をCG法，CR法および提案するsym_CRS法によって解く．

収束するまでに各解法が要した反復回数(Iterations)，計算時間(Time(second))，および収束した時点の真の相対残差ノルム(True res.: $\log_{10}(\|\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_k\|_2 / \|\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_0\|_2)$)を**表2**に示す．ここで，表2に示されたsym_CRS法の計算結果は，2つのパラメータ α_k の計算方法のうちで，計算時間の短い方(ケースAではversion 1，ケースBではversion 2を使用)の結果を載せている．さらに，CG法，CR法，sym_CRS法を比較した収束履歴を**図2**に示す．ただし，グラフの縦軸は相対残差ノルム($\log_{10}(\|\boldsymbol{r}_k\|_2 / \|\boldsymbol{r}_0\|_2)$)，横軸は反復回数である．

NII-Electronic Library Service

Japan Society for Simulation Technology

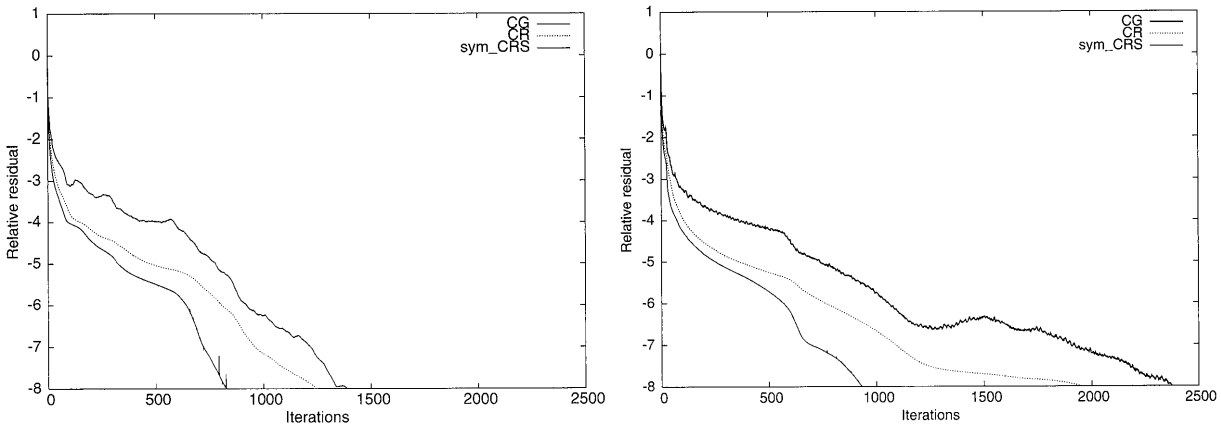


図2　関数 A の分布がケースAの場合(左図)，ケースBの場合(右図)の収束履歴

[結果]

表2および図2から次のことを述べることができる．sym_CRS法の所要反復回数は，CG法，CR法のおよそ40-60%程度で，CG法，CR法より少ない反復回数で収束する．また，sym_CRS法の計算時間はCR法と同程度か，短縮された．さらに，CG法の計算時間と比較するとき，20%程度長くかかる場合と短縮される場合があった．以上，sym_CRS法の残差多項式の係数がCR法に基づいて計算されていることを考慮すると，CR法の収束性を改善していると言える．また，計算時間の点でもCG法，CR法よりも有効である場合があると言える．

ここで参考のため，残差がCG法の残差ベクトルの2乗で定義されるCGS法の計算結果を掲載する．所要反復回数，および計算時間は，ケースAの場合に801回，1.559 sec.，ケースBの場合に1279回，2.486 sec.であった．

4.2　数値例2

Matrix Market，Tim Davis' collection [3,4]に収納されている正定値実対称行列BCSSTK08，BCSSTK18，BCSSTK25，および定値性のない実対称行列t3dh_eを取り上げる．それらの問題の係数行列は**表3**に示された特徴を持つ．ただし，表3におけるnは係数行列の次元数，nnzは非零要素数，spdは対称正定値であるか否かを示す．表3に示された行列を係数に持つ線形方程式をCG法，CR法，sym_CRS法によって解く．

収束するまでに各解法が要した反復回数(Iterations)，計算時間(Time(second))，および収束した時点の真の相対残差ノルム $\log_{10}(\|\boldsymbol{b}-A\boldsymbol{x}_k\|_2 / \|\boldsymbol{b}-A\boldsymbol{x}_0\|_2)$ (True res.)を**表4**に示す．ここで，表4に示されたsym_CRS法の計算結果は，2つのパラメータ α_k の計算方法のうちで，計算時間の短い方(version 1を使用)の結果を載せている．

表3　係数行列の特徴

Matrix	n	nnz	spd
BCSSTK08	1,074	12,960	yes
BCSSTK18	11,948	149,090	yes
BCSSTK25	15,439	252,241	yes
t3dh_e	79,171	4,352,105	no

表4　各解法の所要反復回数，計算時間(比率)，真の相対残差ノルム

		CG	CR	sym_CRS
BCSSTK08	Iterations	145	140	122
	Time	0.02 (2.00)	0.01 (1.00)	0.01 (1.00)
	True res.	-8.0	-8.0	-8.0
BCSSTK18	Iterations	1007	823	582
	Time	0.80 (0.78)	0.72 (0.70)	1.02 (1.00)
	True res.	-8.0	-8.0	-8.0
BCSSTK25	Iterations	9297	2958	2028
	Time	11.22 (2.14)	3.92 (0.75)	5.23 (1.00)
	True res.	-8.0	-8.0	-8.0
t3dh_e	Iterations	1523	842	629
	Time	14.86 (1.00)	10.37 (0.70)	14.80 (1.00)
	True res.	-8.0	-8.0	-8.0

[結果]

表4から次のことを述べることができる．sym_CRS法の所要反復回数は，CG法，CR法より少ない反復回数で収束する．したがって，sym_CRS法の残差多項式の係数がCR法に基づいて計算されていることを考慮すると，CR法の収束性を改善していると言える．また，sym_CRS法の計算時間は，行列BCSSTK08, BCSSTK25,

NII-Electronic Library Service

Japan Society for Simulation Technology

t3dh_e においてCG法と同程度か，または短縮された．一方，CR法の計算時間と比較すると，sym_CRS法の計算時間はCR法と同程度か，または長くかかった．すなわち，データベースに収納されている行列を取り上げた場合の計算時間については，CR法がもっとも有効であり，次いでsym_CRS法であった．

参考のため，CGS法の計算結果を掲載する．所要反復回数，および計算時間は，BCSSTK08の場合に119回，0.01 sec.，BCSSTK18の場合に900回，1.75 sec.，BCSSTK25の場合に12306回，35.0 sec.，t3dh_eの場合に975回，36.3 sec.であった．

4.3 数値例3

正方形領域 $\Omega=(0,\pi)\times(0,\pi)$ において，次のHelmholtz方程式の離散近似解を求める[2]．ただし，波数 σ は0.5，1.5とする．

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}+\sigma^2 u=0,\quad 0<x,y<\pi. \qquad (4.2)$$

境界条件は次のような条件を課す[2]．

$$u_x|_{x=0}=i\sqrt{\sigma^2-\frac{1}{4}}\cos\frac{y}{2},\quad \text{Neumann条件},$$

$$u_x-i\sqrt{\sigma^2-\frac{1}{4}}\,u|_{x=\pi}=0,\quad \text{放射条件},$$

$$u_y|_{y=0}=0,\quad \text{Neumann条件},$$

$$u|_{y=\pi}=0,\quad \text{Dirichlet条件}.$$

ただし，$i^2=-1$ である．また，線形方程式(1.1)の右辺項は式(4.2)の厳密解 $u(x,y)=\exp(i\sqrt{\sigma^2-1/4}\,x)\cos y/2$ を与えて計算する．

式(4.2)の境界値問題に対して領域全体を x,y 両方向に100(=M)等分して，両方向ともに等間隔で5点中心差分で離散近似して得られた大きさ $(M+1)^2\times M^2$ の複素対称行列($A=A^{\mathrm{T}}, A\neq A^{\mathrm{H}}$)を持つ線形方程式をCG法，CR法，sym_CRS法によって解く．

収束するまでに各解法が要した反復回数(Iterations)，計算時間(Time(second))，および収束した時点の真の相対残差ノルム(True res.: $\log_{10}(\|\boldsymbol{b}-A\boldsymbol{x}_k\|_2/\|\boldsymbol{b}-A\boldsymbol{x}_0\|_2)$)を**表5**に示す．ここで，表5に示されたsym_CRS法の計算結果は，2つのパラメータ α_k の計算方法のうちで，計算時間の短い方(version 1を使用)の結果を載せている．さらに，CG法，CR法，sym_CRS法を比較した収束履歴を**図3**に示す．ただし，グラフの縦軸は相対残差ノルム($\log_{10}(\|\boldsymbol{r}_k\|_2/\|\boldsymbol{r}_0\|_2)$)，横軸は反復回数である．また，最大反復回数を3000回と設定し，3000回で収束しない場合は反復を強制的に終了した．

[結果]

複素対称行列を取り上げた．その結果，表5，および図3から次のことを述べることができる．波数が0.5の場合，すべての解法が収束し，CR法の計算時間がもっとも短かった．また，波数が1.5の場合，CG法，CR法は収束しなかった．一方，sym_CRS法の残差多項式の係数はCR法に基づいて計算されているにも拘わらず，収束した．以上，CG法，CR法，sym_CRS法は複素対称行列を係数に持つ線形方程式に有効な場合があることがわかった．

表5 各解法の所要反復回数，計算時間(比率)，真の相対残差ノルム

		CG	CR	sym_CRS
$\sigma=0.5$	Iterations	610	380	280
	Time	0.744 (1.05)	0.518 (0.73)	0.705 (1.00)
	True res.	-8.0	-8.0	-8.0
$\sigma=1.5$	Iterations	No convergence	No convergence	497
	Time	—	—	1.226
	True res.	1.9	-3.0	-8.3

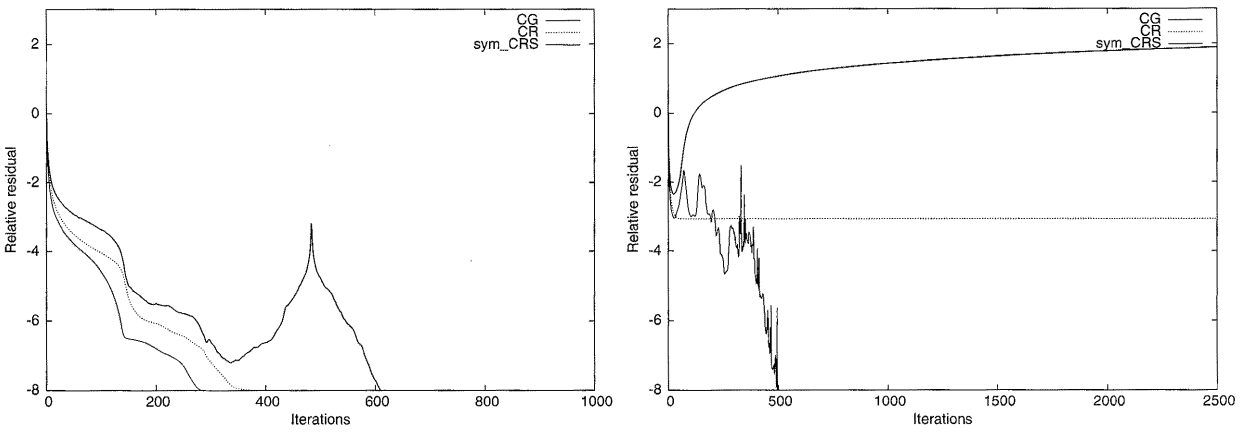


図3 波数0.5の場合(左図)，1.5の場合(右図)の各解法の収束履歴

NII-Electronic Library Service

Japan Society for Simulation Technology

sym_CRS法とCR法のパラメータは，共に数学的に同値な条件から導き出されているが，実際の計算方法は異なる．それゆえ，sym_CRS法が収束する一方でCR法が収束しない場合が起こるのだと推測できる．付録に，sym_CRS法，CR法の1回目から100回目の反復で得られた$\|\alpha_k\|_2$, $\|\beta_k\|_2$の値を示す．CR法，sym_CRS法がともに収束する場合には，2つの解法の$\|\alpha_k\|_2$, $\|\beta_k\|_2$の値が近いのに対して，sym_CRS法が収束する一方でCR法が収束しない場合には，2つの解法の$\|\alpha_k\|_2$, $\|\beta_k\|_2$の値が大きく異なることがわかる．

参考のため，CGS法の計算結果を掲載する．所要反復回数，および計算時間は，波数が0.5の場合に270回，0.684 sec.，波数が1.5の場合に492回，1.226 sec.であった．

最後に，複素対称行列を係数に持つ線形方程式に対して有効なConjugate Orthogonal CG method（COCG法）[16]が開発されていることを付記する．

5. まとめ

CR法に基づく実対称な線形方程式のための積型反復解法，すなわちCR法の残差ベクトルの2乗で残差が定義されるsym_CRS法を提案した．数値実験では，偏微分方程式を離散化したときに得られる正定値実対称行列，複素対称行列，さらにデータベースに収納されている正定値実対称行列，定値性のない実対称行列を取り上げ，収束性を検証した．その結果，sym_CRS法はCG法，CR法より少ない反復回数で収束する，またはCG法，CR法が収束しない問題に対して収束することから，sym_CRS法は収束性の点でCG法，CR法より優れていると言える．さらに，取り上げた8つの数値例のうち4つにおいて，sym_CRS法の計算時間はCR法より短いか，同程度であった．また，取り上げた8つの数値例のうち6つにおいて，sym_CRS法の計算時間はCG法より短いか，または同程度であった．したがって，計算時間の点でもCG法，CR法よりも有効である場合があると言える．

謝 辞

本論文を作成するにあたり有益な御助言を頂いた査読者の方々に心より御礼申し上げる．また，数値実験の補足に協力いただいた九州大学大学院修士課程2年土持秀之氏に感謝する．

参 考 文 献

1) 阿部邦美，曽我部知広，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，情報処理学会論文誌コンピューティングシステム，**48**-SIG8(ACS18)，11/21 (2007)
2) Bayliss, A., Goldstein, C. and Turkel, E.: An Iterative Method for the Helmholtz Equations, J. of Computational Physics, **49**, 443/457 (1983)
3) Boisvert, R., Pozo, R., Remington, K., Miller, B. and Lipman, R.: Matrix Market: http://math.nist.gov/MatrixMarket/
4) Davis, T.: Sparse Matrix Collection: http://www.cise.ufl.edu/research/sparse/matrices/
5) Eisenstat, S. C., Elman, H. C. and Schultz, M. H.: Variational Iterative Methods for Nonsymmetric Systems of Linear Equations, SIAM J. Numer. Anal., **20**-2, 345/357 (1983)
6) Fletcher, R.: Conjugate Gradient Methods for Indefinite Systems, Lecture Notes in Mathematics, 506, 73/89 (1976)
7) Hestenes, M. R. and Stiefel, E.: Methods of Conjugate Gradients for Solving Linear Systems, J. Res. Nat. Bur. Standards, 49, 409/435 (1952)
8) Joubert, W. D.: Lanczos Methods for the Solution of Nonsymmetric Systems of Linear Equations, SIAM J. Matrix Anal. Appl., **13**-3, 926/943 (1992)
9) Kaasschieter, E. F.: Preconditioned Conjugate Gradients for Solving Singular Systems, J. of Comput. Appl. Math., **24**-1,2, 265/275 (1988)
10) Sonneveld, P.: CGS, A Fast Lanczos-type Solver for Nonsymmetric Linear Systems, SIAM J. Sci. Comput., **10**-1, 36/52 (1989)
11) Stiefel, E. L.: Kernel Polynomial in Linear Algebra and their Numerical Applications, in: Further contributions to the determination of eigenvalues, NBS Applied Math. Ser., 49, 1/22 (1958)
12) Suetomi, E. and Sekimoto H.: Conjugate Gradient Like Methods and their Application to Fixed Source Neutron Diffusion Problems, J. of Nuclear Science and Technology, **26**-10, 899/912 (1989)
13) 鈴木厚，田端正久：不定値対称行列に対する共役勾配法の収束について，京都大学数理解析研究所講究録，1265, 39/44 (2002)
14) 後保範：対称用改訂CR法の収束性，京都大学数理解析研究所講究録，746, 37/46 (1991)
15) van der Vorst, H. A.: Bi-CGSTAB: A Fast and Smoothly Converging Variant of Bi-CG for the Solution of Nonsymmetric Linear Systems, SIAM J. Sci. Stat. Comput., **13**-2, 631/644 (1992)
16) van der Vorst, H. A. and Melissen J. B. M.: A Petrov-Gelerkin Type Method for Solving $Ax = b$, Where A Is Symmetric Complex, IEEE Trans. Mag., **26**-2, 706/708 (1990)
17) Zhang, S.- L.: GPBi-CG:Generalized Product-type Methods Based on Bi-CG for Solving Nonsymmetric Linear Systems, SIAM J. Sci. Comp., **18**-2, 537/551 (1997)
18) 張紹良，藤野清次：ランチョス・プロセスに基づく積型反復解法，日本応用数理学会論文誌，**4**-4, 343/360 (1995)

付録： 数値例3におけるCR法，sym_CRS法で計算された$\|\alpha_k\|_2$, $\|\beta_k\|_2$の値を**図4, 5**に示す．

NII-Electronic Library Service

Japan Society for Simulation Technology

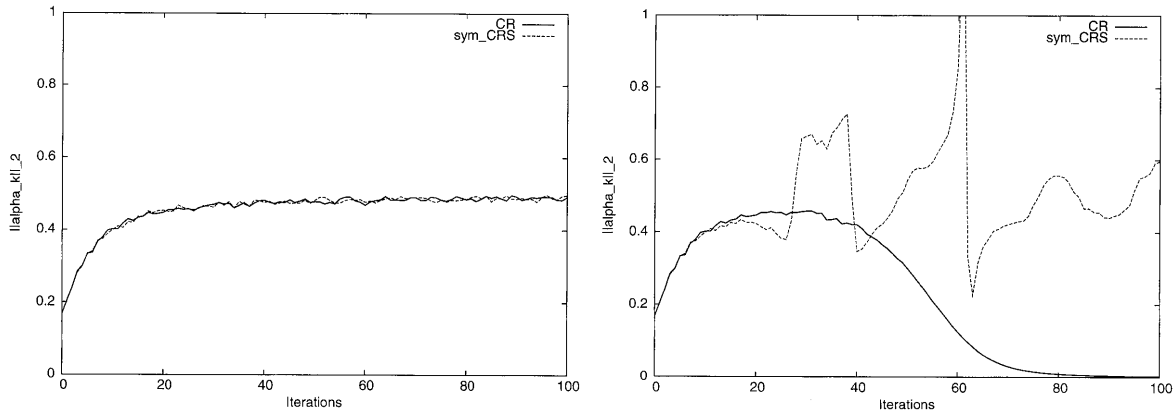


図4　数値例3の波数0.5(左図)，1.5(右図)の場合における $\|\alpha_k\|_2$

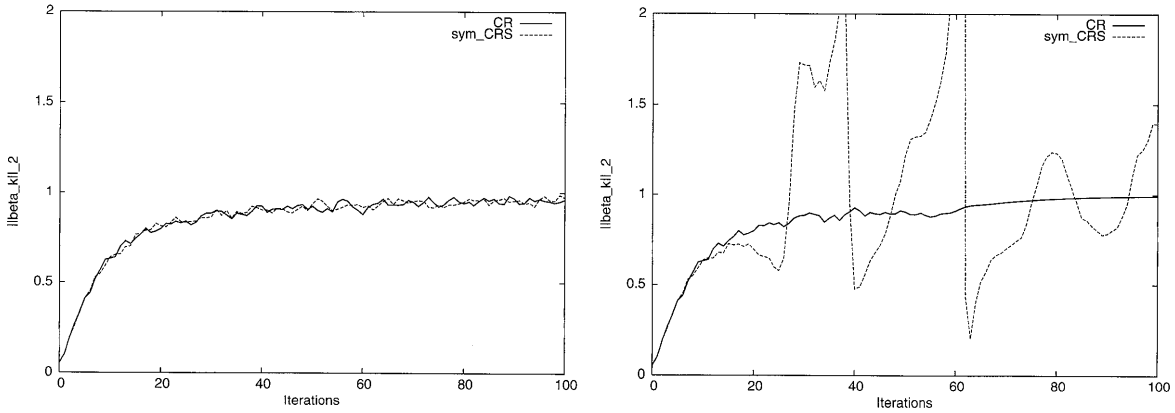


図5　数値例3の波数0.5(左図)，1.5(右図)の場合における $\|\beta_k\|_2$

NII-Electronic Library Service