九州大学学術情報リポジトリ
Kyushu University Institutional Repository

BiCGSTAB(ℓ)法の有効利用のためのある注意

藤野, 清次
情報基盤センター

三浦, 謙一
情報基盤センター | (株)富士通研究所 : フェロー

https://doi.org/10.15017/1515851

出版情報：九州大学大学院システム情報科学紀要. 8 (2), pp.165-170, 2003-09-26. 九州大学大学院システム情報科学研究院
バージョン：
権利関係：

九州大学大学院
システム情報科学紀要
第8巻　第2号　平成15年9月

Research Reports on Information Science and
Electrical Engineering of Kyushu University
Vol.8, No.2, September 2003

BiCGSTAB(ℓ)法の有効利用のためのある注意

藤野清次*・三浦謙一**

A Remark for Effective Utilization of the BiCGSTAB(ℓ) Method

Seiji FUJINO and Kenichi MIURA

(Received December 13, 2002)

Abstract: A useful remark about utilization of the initial shadow residuals $\boldsymbol{r}_0^*$ which appear in the algorithm of the BiCGSTAB(ℓ) iterative method is described. In general, the initial shadow residuals $\boldsymbol{r}_0^*$ are set as same as the initial residual $\boldsymbol{r}_0$ in the BiCG process. However, sometimes convergence fails, sometimes the approximate solutions degrade in view of its accuracy. Therefore we give the initial shadow residuals $\boldsymbol{r}_0^*$ as uniform random numbers. Through some numerical experiments, it will be made clear that this remedy is effective for gaining high and stable convergence of the BiCGSTAB(ℓ) method.

Keywords: BiCGSTAB(ℓ) method, Initial shadow residual, Initial residual, Uniform random number

1. はじめに

連立1次方程式 $A\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ をBiCGSTAB(ℓ)法[12]で解くことを考える．ここで，Aは大きさ$n\times n$ の正方行列，$\boldsymbol{b}$, $\boldsymbol{x}$ はn次元の右辺ベクトルおよび解ベクトルとする．BiCGSTAB(ℓ)法はBiCG法系統の反復解法の一つで，その他この系統に属する反復解法には，例えば，BiCG法，CGS法，BiCGSTAB法，BiCGSTAB2法，GPBiCG法，など数多くのものがある．一般に，BiCG系統の反復解法では，反復の初期値として初期残差 $\boldsymbol{r}_0$ と初期シャドゥ残差 $\boldsymbol{r}_0^*$ を与えなければいけない．前者の初期残差の値は，与えられた初期推定解 $\boldsymbol{x}_0$ から，式 $\boldsymbol{r}_0=\boldsymbol{b}-A\boldsymbol{x}_0$ で自動的に決定される．しかし，後者の初期シャドゥ残差が満たすべき条件は内積$(\boldsymbol{r}_0^*,\boldsymbol{r}_0)\neq 0$ だけで，その与え方はまだ確定していない．したがって，この条件を満たしかつ簡便であるという理由から，$\boldsymbol{r}_0^*=\boldsymbol{r}_0$と与えることが従来多かった．そして，その条件下で様々な反復法の収束性，頑強性，効率などが今まで論じられてきた．

さらに，BiCGSTAB(ℓ)法では計算を始める前に段数 ℓ を陽的に与える必要がある．そのため，従来の研究[8) 9) 11)]では収束過程における残差の値から停滞(stagnation)や破綻(breakdown)などの現象をまず検出し，次に段数ℓを一時的に増加させることによってこれらの停滞や破綻を回避して通過し，その後元の段数ℓを使うという，いわば適応型のBiCGSTAB(ℓ)法の研究が活発に行なわれてきた．しかし，BiCGSTAB(ℓ)法自体の収束性の改善についてはあまり論じられなかった．

本研究では，初期シャドゥ残差 $\boldsymbol{r}_0^*$ の与え方に任意性が残っていることに着目し，それを適切に与えることによってBiCGSTAB(ℓ)法の収束特性が向上することを数値実験にて示す．具体的には，初期シャドゥ残差 $\boldsymbol{r}_0^*$ に擬似一様乱数を与え，そのときのBiCGSTAB(ℓ)法の収束性を観察しこの与え方の有効性を検証する．さらに，収束したときに得られる近似解の誤差についても検証し，BiCGSTAB(ℓ)法の有効な使い方について論じる[4)]．

2. BiCGSTAB(ℓ)法の算法と演算量

以下にBiCGSTAB(ℓ)法の算法を示す．算法の中の初期シャドウ残差$\boldsymbol{r}_0^*$に関する部分(2行目)に下線をつけた．初期シャドウ残差は反復計算を始める前の準備段階でただ1度現れるだけであるが，後述するように，反復法の収束性に大きな影響を与える．

BiCGSTAB(ℓ)法では，$k=m\ell+\ell$ $(m=0,1,2,\cdots)$ に関して残差ベクトル，方向ベクトルそして近似解の更新などが行なわれる．この反復は**外部反復**と呼ばれる．外部反復を1回 (すなわち，$k=m\ell$ から $k=m\ell+\ell$ まで) 進む間にℓ回の**内部反復**の処理が含まれる．後者の反復は2つの処理部分から構成される．1つは新しいBiCG法のベクトルを計算する部分であり，残る1つはℓ次のMR(Minimal Residual)多項式を用いて局所的な最小残差ベクトルを求める部分である．以下では，ℓ を段数と呼ぶ．上述の2つの処理部分の概略を以下述べる．

1. **BiCG法を使う部分：**
   すでに得られている残差ベクトル$\boldsymbol{r}_k$に対して，BiCG法の反復をℓ回繰り返す．この結果得られた残差ベクトルを$\tilde{\boldsymbol{r}}_k$ とすると，計算する途中で副産物として $A^i\tilde{\boldsymbol{r}}_k$ $(i=0,\ldots,\ell)$ が得られる．
2. **ℓ次のMR多項式を用いる部分：**
   ここでは，BiCG法を用いた部分で得られた

平成14年12月13日受付
* 情報基盤センター
** 情報基盤センター，(株) 富士通研究所フェロー

$A^i\tilde{r}_k(i=0,\ldots,\ell)$ を用いて残差ベクトルr_kのL_2ノルムが局所的に最小になるように，すなわち，$||r_k||_2$が局所的に最小になるように，

$$r_k = \tilde{r}_k + \alpha_1 A\tilde{r}_k + \cdots + \alpha_\ell A^\ell \tilde{r}_k$$

の係数 $\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_\ell$ が決められる．すなわち，修正Gram-Schmidtの直交化を利用してℓ本のベクトルの直交化が行なわれる．この演算量は$O(\ell^2)$で見積もられ，上のBiCGの部分の演算量に比べて非常に多い．BiCGSTAB(ℓ)法の平均演算量は，行列ベクトル積の演算量を1としたとき，段数 ℓ を使って $\ell+5$ と表される[12]．したがって，BiCGSTAB(ℓ)法において$\ell=1$と$\ell=2$の演算量の比は$7/6=$約1.17，同様に$\ell=1$と$\ell=8$との同比は$13/6=$約2.17になる．

このように段数 ℓ を増やすと全体の演算量は急に増える．一般に，計算時間を減らす目的で段数を増加させる操作がよく行なわれる．しかし，この操作は計算時間の減少に必ずしも有効とは限らず，段数 ℓ を適切に定めることはBiCGSTAB(ℓ)法を使う上で大変重要である．

[Algorithm of BiCGSTAB(ℓ)]

$k=-\ell$

<u>**choose**</u> x_0, $\underline{r_0^*}$, **compute** $r_0 = b - Ax_0$

take $u_{-1}=0$, $x_0=x_0$, $\rho_0=1$, $\alpha=0$, $\omega=1$

repeat until $||r_{k+\ell}||_2$ **is small enough**

$k=k+\ell$

Put $\hat{u}_0=u_{k-1}$, $\hat{r}_0=r_k$, $\hat{x}_0=x_k$, $\rho_0=-\omega\rho_0$

For $j=0,1,\cdots,\ell-1$　　**[BiCG part]**

$\rho_1=(\hat{r}_j, r_0^*)$, $\beta=\alpha\dfrac{\rho_1}{\rho_0}$, $\rho_0=\rho_1$

$\hat{u}_i=\hat{r}_i-\beta\hat{u}_i \quad (i=0,1,\cdots,j)$

$\hat{u}_{j+1}=A\hat{u}_j$, $\gamma=(\hat{u}_{j+1}, r_0^*)$, $\alpha=\dfrac{\rho_0}{\gamma}$

$\hat{r}_i=\hat{r}_i-\alpha\hat{u}_{i+1} \quad (i=0,1,\cdots,j)$

$\hat{r}_{j+1}=A\hat{r}_j$, $\hat{x}_0=\hat{x}_0+\alpha\hat{u}_0$

end

For $j=1,2,\cdots,\ell$　　**[MR part]**

$\tau_{ij}=\dfrac{1}{\sigma_i}(\hat{r}_j,\hat{r}_i)$, $\hat{r}_j=\hat{r}_j-\tau_{ij}\hat{r}_i$

$(i=1,2,\cdots,j-1)$

$\sigma_j=(\hat{r}_j,\hat{r}_j)$, $\gamma_j'=\dfrac{1}{\sigma_j}(\hat{r}_0,\hat{r}_j)$

end

$\gamma_\ell=\gamma_\ell'$, $\omega=\gamma_\ell$

$$\gamma_j=\gamma_j'-\sum_{i=j+1}^{\ell}\tau_{ji}\gamma_i \quad (j=\ell-1,\cdots,1)$$

$$\gamma_j''=\gamma_{j+1}+\sum_{i=j+1}^{\ell-1}\tau_{ji}\gamma_{i+1} \quad (j=1,2,\cdots,\ell-1)$$

$\hat{x}_0=\hat{x}_0+\gamma_1\hat{r}_0$, $\hat{r}_0=\hat{r}_0-\gamma_\ell'\hat{r}_\ell$, $\hat{u}_0=\hat{u}_0-\gamma_\ell\hat{u}_\ell$

$\hat{u}_0=\hat{u}_0-\gamma_j\hat{u}_j$, $\hat{x}_0=\hat{x}_0+\gamma_j''\hat{r}_j$, $\hat{r}_0=\hat{r}_0-\gamma_j'\hat{r}_j$

$(j=1,2,\cdots,\ell-1)$

Put $u_{k+\ell-1}=\hat{u}_0$, $r_{k+\ell}=\hat{r}_0$, $x_{k+\ell}=\hat{x}_0$

end.

3. 初期シャドウ残差r_0^*について

BiCG法系統の反復法では，係数行列 A の性質だけでなく初期残差r_0 に含まれる固有ベクトルの個数と反復法の収束性が関係深いことがよく知られている[2) 6)]．たとえば，残差ベクトルr_nは残差多項式 $R_n(A)$と初期残差r_0との積で，同様に，シャドウ残差r_0^*も残差多項式 $R_n(A^T)$と初期シャドウ残差r_0^*との積で以下のように表される．ここで，Tは行列Aの転置を表す．

$$r_k = R_k(A)r_0,$$
$$r_k^* = R_k(A^T)r_0^*$$

この式から，初期残差 r_0と初期シャドウ残差r_0^* はともにBiCG法系統の反復法の収束性に大きく影響する重要な因子の1つであることがわかる．一方，収束までの反復回数の点から，初期残差 r_0 に含まれる固有値に対応する固有ベクトル成分の個数(これをMとおく)は少ない方が好ましい．したがって，従来のように，$x_0=0$, $r_0=b$ かつ $r_0^*=r_0$ とおくのは，固有ベクトル成分の個数をこれ以上増加させないという意味でしかない．しかし，対称問題における数値実験とその考察から，固有ベクトル成分の個数 M が元の行列 A の相異なる固有値の個数(これをKとおく)と比較して極端に数が少ないとき，すなわち，

$$M \ll K$$

のとき，BiCG法の系統の反復法は収束過程において発散したり，収束が不安定になる．さらに，逆に固有ベクトル成分の個数 K が多いとき，収束までの反復回数は若干増加するが確実に安定的に収束することもわかっている[1)]．

そこで，本研究では，初期残差については今までどおり $r_0=b-Ax_0$ とおき，他方，初期シャドウ残差 r_0^*については擬似一様乱数を与える，という戦略をとる．この理由として，擬似一様乱数にはすべての固有ベクトル成分が含まれる可能性が高いと推測されるからである．この戦略の有効性を次の節で調べることにする．

4. テストで用いた乱数について

テストで用いた乱数には以下の3種類の [0,1] 区間の擬似一様乱数を用いた．

- Mersenne Twister法による乱数 (以下，“MT”と略す)[7)]．一様に分布する32bitの符号なし整数(0 ~ $2^{32}-1$)を$2^{32}-1$で割って生成した乱数である．周期が$2^{19937}-1$となる有限体多項式型の一様乱数生成法で多項式の次数は19937である．
- M系列乱数 (以下，“ms”と略す)．この方法では，演算として合同法の乗算(および加算)に対して，排他的論理和をとる論理演算を用いる[5)]．

- 線形合同(congruence)法による乱数 (以下, "cong." と略す). この方法は漸化式を使った乱数法である.

4.1 初期値：x_0, x_0^* および r_0, r_0^*の組合せ

初期値：x_0, x_0^* および r_0, r_0^* の組合せを**Table 1**に示す. 以下では, 表に示す従来のタイプA(1ケース)および擬似一様乱数を使うタイプB (3ケース) の合計4ケースについてBiCGSTAB(ℓ)法の収束性を調べた.

Table 1 Number of cases of types A and B, two initial solutions x_0, x_0^* and two initial residuals r_0, r_0^*

type	number of cases	initial solutions x_0	initial solutions x_0^*	initial residuals r_0	initial residuals r_0^*
A	1	$x_0=0$	$x_0^*=0$	$r_0=b$	$r_0^*=b$
B	3	$x_0=0$	$x_0^*=$MT	$r_0=b$	$r_0^*=b-A^{\mathrm{T}}x_0^*$
		$x_0=0$	$x_0^*=$ms		
		$x_0=0$	$x_0^*=$cong.		

5. 数 値 実 験

数値実験は九州大学情報基盤センターの富士通:スーパコンピュータVPP5000上で倍精度演算で実行した. 言語はFortran90を使用した. 計算は従来のタイプAおよび乱数を使うタイプBの場合について行った. また, タイプBの結果の数字は3種類の乱数のときの平均値である. nは行列の次元数を表す. 表中の "相対残差" とは第k回目の反復における$\log_{10}(||b-Ax_k||_2/||b||_2)$を表す. 段数$\ell$の最大値は8とした. 収束判定は各反復での相対残差のL_2ノルムが$||r_k||/||r_0|| \le 10^{-12}$ のときとし, 最大反復回数は2000回とした. 行列の前処理は施さなかった. また, 以下に示すσ_kの値が計算機イプシロン ϵ (=約2.2×10^{-16})の平方根, すなわち, およそ1.5×10^{-8}以下のとき "破綻"(breakdown)とみなした.

$$\sigma_k = (r_k, r_0^*)/(||r_k||\cdot||r_0^*||) \le \sqrt{\epsilon} \tag{1}$$

5.1 テスト問題

1. **[問題 1]** 実数Toeplitz行列を取り扱った. γ は実数パラメータである. 右辺項は厳密解がすべて1となるように定めた[10]. 次元数は$n=512^2=262144$である.

$$A := \begin{bmatrix} 2 & 1 & & & & \\ 0 & 2 & 1 & & & \\ \gamma & 0 & 2 & 1 & & \\ & \gamma & 0 & 2 & 1 & \\ & & \gamma & 0 & 2 & \ddots \\ 0 & & & \ddots & \ddots & \ddots \end{bmatrix}$$

Table 2 Numerical results in case of the least time of BiCGSTAB(ℓ) method when parameter γ is varied

γ	type A stage	type A time	type A res.	type B stage	type B time	type B res.	ratio (%)
1.4	3	.165	-12.6	2	.153	-12.3	92.7
1.5	3	.184	-12.2	2	.179	-12.3	97.3
1.6	3	.278	-12.2	2	.227	-12.1	81.6
1.7	5	.445	-12.1	2	.270	-12.1	60.6
1.8	–	–	–	2	.357	-12.3	
2.0	–	–	–	2	.677	-12.1	
2.2	–	–	–	3	1.90	-12.1	
2.3	–	–	–	3	5.94	-12.1	

2. **[問題 2]** 正方形領域$[0,1]^2$で定義された偏微分方程式から生じる全周Dirichlet型境界条件つきの境界値問題を取り扱った[6]. Dは実数パラメータである. 次元数は$n=256^2=65536$, 格子幅hは1/257である. 厳密解を$u(x,y)=1+xy$とし, そのようになるように右辺項$G(x,y)$を定めた.

$$-u_{xx}-u_{yy}+Du_x = G(x,y)$$

5.2 実験結果

Table 2および **Table 3** に問題1の実験結果を示す. **Table 2**に, Toeplitz行列に含まれるパラメータγの値を変化させたとき, BiCGSTAB(ℓ)法の計算時間が最も少なかったときの段数 ℓ("stage"), 計算時間, 相対残差("res."), 2つのタイプの時間の比("ratio")を示す. また, **Table 3**に, パラメータγ=1.7のときのToeplitz行列に対するBiCGSTAB(ℓ)法の段数, 反復回数("itr."), 計算時間, 相対残差, 段数 ℓ=1のときに対する各計算時間の比率を示す. **Table 3**の中で下線を付けた数字は収束までの計算時間が最も少なかったものを意味する. 以下の表でも下線は同様の意味とする. また, 表中の"–"印は最大反復回数までBiCGSTAB(ℓ)法が収束しなかったものを表す. また, 以下の表で示す計算時間の単位はすべて秒である.

Table 2と**Table 3**の結果から以下のことがわかる.

1. より大きなγの値に対して, 乱数を使うタイプBの方が従来のタイプAよりも収束性が頑強である.
2. タイプBの方が段数も少なく計算時間も短い.
3. タイプAでは, 段数を大きくしても必ずしも反復回数が減らないときや逆に増えるときがある.
4. タイプBでは反復回数はほぼ一定である.
5. いずれのタイプでも, 近似解は要求精度と同じ12桁の精度が得られている.

Fig. 1にγ=1.7のときのBiCGSTAB(ℓ)法の収束の履歴を示す. 段数はℓ=2とℓ=3の二つの場合であり, いずれもタイプAとタイプBのときの残差ノルム$||r_k||_2$の値をプ

Table 3　Numerical results in case of Toeplitz matrix with γ=1.7

	type A			ratio	type B			
ℓ	itr.	time	res.	(%)	itr.	time	res.	ratio
1	–	–	–		327	.939	-12.1	1.0
2	–	–	–		85	.270	-12.1	1.11
3	break	–	–		81	.279	-12.2	1.20
4	124	.466	-12.1	67.0	83	.312	-12.2	1.31
5	110	.445	-12.1	75.0	82	.334	-12.3	1.42
6	132	.580	-12.6	63.9	84	.371	-12.5	1.54
7	182	.860	-12.3	46.2	84	.397	-12.6	1.65
8	96	.485	-12.0	83.4	80	.405	-12.1	1.76

ロットした．この図から，タイプAでは収束しなかったものが，タイプBでは ℓ=2と ℓ=3 のいずれの場合も収束したことがわかる．タイプAでℓ=3の場合，反復回数が205回を超えたとき残差が急激に(オーダ10^{-5}からオーダ10へ)増加し，(1)式のσ_k に関する“破綻”(表中の“break”)が検出された．ただし，**Fig. 1**は破綻の検出の後も反復計算を続行させたときの図である．

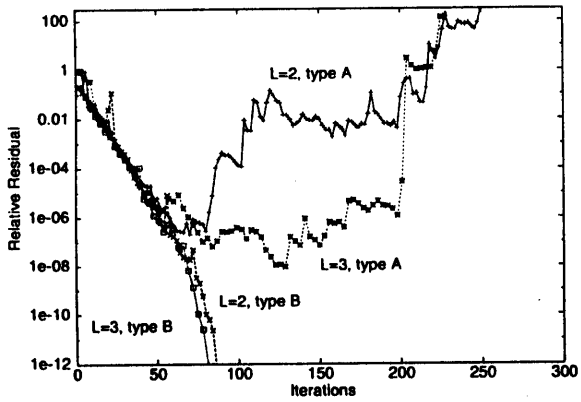

Fig.1　Convergence history of type A and B for Toeplitz matrix with γ=1.7 at stage ℓ = 2 and ℓ = 3.

次に，**Table 4**から**Table 8**までに問題2に対する結果を示す．まず，**Table 4**は，パラメータDh=2のときの，BiCGSTAB(ℓ)法の段数ℓごとの反復回数，計算時間，相対残差そしてタイプBのタイプAに対する比を各々表したものである．また，最下の2つの行は各項目の平均値(“Av.”)およびタイプAの平均値を 1 としたときのタイプBの比を各々表す．**Table 4**の結果から，

1. タイプAの相対残差が要求精度に比べて悪い，
2. 乱数を使うタイプBはほぼ要求精度を満たしている，
3. タイプBの計算時間は21.4% ～ 41.0% ほどタイプAより少ない，
4. タイプBの平均反復回数と平均計算時間はタイプAの67.2%および65.9%に各々大幅に減少した

Table 4　Numerical results for the problem 2 with Dh=2

stage	type A			ratio	type B		
ℓ	itr.	time	res.	(%)	itr.	time	res.
1	547	.491	-5.4	78.6	447	.386	-12.2
2	582	.529	-8.0	71.6	413	.388	-11.9
3	582	.599	-8.5	67.6	401	.405	-12.2
4	604	.688	-7.8	62.9	387	.433	-11.8
5	660	.770	-6.7	59.0	392	.454	-11.7
6	672	.841	-6.0	61.6	398	.518	-11.6
7	623	.853	-6.5	66.4	418	.567	-10.9
8	648	.954	-5.4	65.2	445	.622	-10.6
Av.	615	.716	-6.8	66.6	413	.472	-11.6
ratio	1.0	1.0			.672	.659	

Table 5　Iterations for the problem 2 with both Dh=2 and Dh=4

	Dh=2				Dh=4			
stage	type	type B			type	type B		
ℓ	A	MT	cong.	ms	A	MT	cong.	ms
1	547	448	449	445	–	–	–	919
2	582	414	400	424	558	400	402	406
3	582	396	423	384	576	399	411	402
4	604	384	368	408	524	404	428	384
5	660	390	350	435	530	390	405	380
6	672	426	378	390	576	426	402	396
7	623	427	427	399	588	420	476	469
8	648	440	424	472	656	408	440	448
Av.	615	416	402	420	573	407	423	412
ratio	1.0	.676	.653	.682	1.0	.710	.738	.719

などがわかる．従来のタイプAに比較してタイプBの方が収束性が非常によい．

次に，**Table 5**は，Dh=2とDh=4のときの収束までの反復回数について3種類の乱数による反復回数の違いを表したものである．この結果から，3種類の乱数による差はいずれも小さくDh=2のときは合同(“cong.”)の場合が収束性がよく，Dh=4のときは“MT”とM系列(“ms”)の場合が同程度によいことがわかる．しかし，従来のタイプAに比較して，いずれの乱数の場合も反復回数が大幅に少なくなったことがわかる．ただし，**Table 5**の最下の2行に示した平均値(“Av.”)は段数ℓ=2からℓ=8までの平均値である．比(“ratio”) についても同様である．

次に，**Table 6**は，パラメータDh=4のときの段数ごとの反復回数，計算時間，相対残差および比を各々表したものである．最下行は各平均値を表す．なお，**Table 6**の段数がℓ=1のときのタイプB の欄に示した数字は，3種類の乱数のうち収束したM系列(“ms”)のときの値である．こ

Table 6 Numerical results for the problem 2 with Dh=4

	type A			ratio	type B			
ℓ	itr.	time	res.	(%)	itr.	time	res.	ratio
1	–	–	–	–	919	.767	-11.4	1.00
2	558	.505	-8.1	72.0	403	.364	-12.0	1.08
3	576	.561	-7.3	70.1	404	.393	-12.1	1.17
4	524	.555	-7.8	77.2	405	.429	-11.4	1.27
5	530	.602	-7.8	73.8	392	.444	-11.8	1.36
6	576	.703	-7.4	70.7	408	.497	-11.2	1.46
7	588	.764	-6.8	77.3	455	.591	-11.3	1.56
8	656	.908	-5.9	65.7	432	.597	-10.9	1.66
Av.	573	.657	-7.3	72.4	414	.474	-11.5	1.37

Table 7 Numerical results for the case with the least time when parameter Dh is varied

		time		ratio	residual	
Dh	ℓ	type A	type B	(%)	type A	type B
0.5	1	.398	.372	93.5	-10.3	-12.0
1.	1	.455	.386	84.9	-9.1	-11.4
2.	1	.491	.386	78.6	-5.4	-12.2
4.	2	.505	.364	72.0	-8.1	-12.0
8.	2	.463	.357	77.0	-9.1	-12.3
16	2	.415	.364	87.8	-9.1	-12.3
32	2	.460	.386	83.9	-11.1	-12.3
Av.		.455	.374	82.5	-8.9	-12.1

の結果から, **Table 4**と同様に, Dh=4のときも, タイプAの相対残差は極めて悪いこと, 計算時間もタイプBの方が26% ~ 35%ほど少ないことなどがわかる.

次に, **Table 7**は, パラメータDhを0.5から32まで変化させたとき, 最も計算時間が少なかったときの段数, タイプAとタイプBの計算時間とその比, 相対残差を各々表したものである. この結果から, パラメータDhの値を変えたとき,

1. いずれの場合もタイプBの方がタイプAより計算時間(平均82.5%に減少)が少ない,
2. 相対残差の結果から, タイプBでは近似解の精度が要求されたとおりに12桁まで得られている,
3. 一方, タイプAでは近似解の相対残差が非常に悪い,
4. 特に, タイプAのDh=2.0のとき相対残差は最悪で−5.4しか得られていない,
5. また, タイプAではDhが1.0と16の間の途中の値のときも相対残差が最良の場合でも約−9.1しか得られていない

などタイプAのときの近似解の精度が非常に悪いことがわかる.

Table 8 Residual of the case with stage ℓ=8 and that of the case with the least time

	type A				type B			
Dh	ℓ=1	ℓ=2	ℓ=8	dif.	ℓ=1	ℓ=2	ℓ=8	dif.
0.5	-10.3	-10.7	-6.5	-3.8	-12.0	-12.3	-9.6	-2.4
1.	-9.1	-7.9	-5.7	-3.4	-11.4	-11.4	-9.2	-2.2
2.	-5.4	-8.0	-5.4	-0.0	-12.2	-11.9	-10.6	-1.6
4.	–	-8.1	-5.9	-2.2	–	-12.0	-10.9	-1.1
8.	–	-9.1	-8.0	-1.1	–	-12.3	-11.8	-0.5
16	–	-9.1	-8.5	-0.6	–	-12.3	-12.0	-0.3
32	–	-11.1	-10.3	-0.8	–	-12.3	-12.2	-0.1
Av.	-8.3	-9.1	-7.2		-11.9	-12.1	-10.9	

次に, **Table 8**は, 最も計算時間が少なかったときの相対残差および段数=8のときの相対残差およびその差("dif.")を示したものである. パラメータDhが2より小さいときは段数ℓ=1のときが計算時間が最も少なく, Dh=4以上のときは段数ℓ=2のときが計算時間が最も少なかった. この結果から,

1. いずれのタイプでも, 計算時間が最も少なかったときの相対残差と段数が8のときのそれを比較したとき, 後者の相対残差は大幅に悪くなっている,
2. しかし, その度合はタイプAの方がタイプBよりも大きい,

ことなどがわかる. **Fig.** 2に, パラメータDh=4.0, 段数ℓ=2のときのタイプAおよびタイプBのときのBiCGSTAB(ℓ)法の収束履歴を示す. 図からタイプBのときの収束性のよさがわかる.

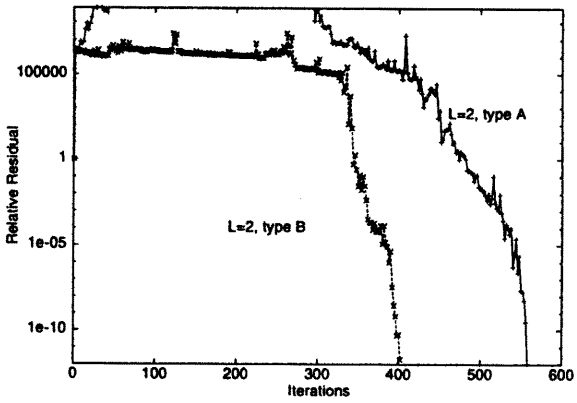

Fig.2 Convergence history of type A and B for problem 2 with Dh=4.0 at stage ℓ = 2.

以上の数値実験結果から, 従来のタイプAの初期値にしたときのBiCGSTAB(ℓ)法と初期シャドウ残差 $\boldsymbol{r}_0^*$ に擬似一様乱数を与えるタイプBのBiCGSTAB(ℓ)法の収束性に関して得られた知見が次のようにまとめられる.

1. BiCGSTAB(ℓ)法では, 段数ℓを大きくすると, 収束して得られた近似解の相対残差はだんだんと悪くなる傾向がある. そのため, 段数をむやみに大きな値にするのは近似解の精度を保つ上で危険である.
2. 従来のタイプAよりもタイプBがBiCGSTAB(ℓ)法の収束性が頑強である.
3. タイプBのときの近似解の相対残差は要求精度と同じオーダ10^{-12}が保持されており信頼性が高い.
4. 一方, タイプAのとき, 近似解の相対残差は平均でオーダ$10^{-8.9}$程度で非常に悪く信頼性が低い.
5. 計算時間もタイプBが従来のタイプAよりも大幅に少ない.

6. ま　と　め

タイプBのBiCGSTAB(ℓ)法, すなわち, 初期シャドウ残差$\boldsymbol{r}_0^*$に擬似一様乱数を使用するBiCG-STAB(ℓ)法を使えば, 計算時間および得られた近似解の相対残差の観点から, 最少の計算時間で信頼度の高い近似解が得られる可能性が高い. また, 段数ℓの上限も$\ell = 3$程度の少ない段数で十分である.

参　考　文　献

1) Abe, K.; Fujino, S.; Himeno, R.: Effect of Initial Residual in Variants of Bi-CG Method, *Trans. of Journal Information*, **5**(2002)17.
2) Freund, R.: Conjugate gradient-type methods for linear systems with complex symmetric coefficient matrices, *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, **13**(1992)425.
3) 藤野清次; 阿部邦美: BiCG系統の反復解法に対する効果的な収束改善法について, ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム HPCS2002 講演集, (2002)51.
4) Fujino, S.: On Enhancement of Convergence of BiCGSTAB(L) Method, The Proc. of LATSIS 2002 – Iterative Solvers for Large Linear Systems–, *LATSIS 2002*, ETH Zurich, (2002)19.
5) 伏見正則: –UP応用数学選書– 乱数, 東京大学出版会, 2000.
6) Joubert, W.: Lanczos methods for the solution of nonsymmetric systems of linear equations, *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, **13**(1992)926.
7) Matsumoto, M.; Nishimura, T.: Mersenne Twister, *ACM Trans. on Model. Comput. Simul.*, **8**(1998)3.
8) 宮内努; 伊藤祥司; 張紹良; 名取亮: BiCGSTAB(L)法におけるLの動的選択について, **日本応用数理学会論文誌**, **11**(2001)49.
9) 森屋健太郎; 野寺隆: 適応的にℓを変化させるBiCGStab(ℓ)法, **情報処理学会論文誌**, **40**(1999)2669.
10) Reichel, L.; Trefethen, L.N.: Eigenvalues and Pseudo-eigenvalues of Toeplitz Matrices, *Lin. Alg. Appl.*, **162-164**(1992)153.
11) Sleijpen, G.; van der Vorst, H.A.: An overview of approaches for the stable computation of hybrid BiCG methods, *Appl. Numer. Math.*, **19**(1995)235.
12) Sleijpen, G.; Fokkema, D.R.: BiCGStab(ℓ) for linear equations involving unsymmetric matrices with complex spectrum, *Electronic Trans. on Numer. Anal.*, **1**(1993)11.