

CGS 法と Bi-CGSTAB 法の残差多項式

計算流体力学研究所 張紹良 (Shaoliang Zhang) 藤野清次 (Seiji Fujino)

1 はじめに

共役勾配システムの解法のアルゴリズム中には、ベクトルとベクトルの内積の演算が数多く使われているため、共役勾配システムの解法は、計算機の有限桁演算による丸め誤差の影響を強く受けることが多い。したがって、実際の数値計算の結果と理論解析の結果の間には、大きなズレがあることが多い。そこで、我々はその丸め誤差に注目し、CGS 法と Bi-CGSTAB 法の収束特性について考察する。

CGS 法と Bi-CGSTAB 法は、どちらも Bi-CG 法を源として考案された解法である [1, 3, 5]。いま Bi-CG 法の k 番目の残差多項式を $R_k(\lambda)$ と表す。Bi-CG 法のスカラー量 α_k, β_k が既知とすると、 $R_k(\lambda)$ は次の三項漸化式によって計算できる [2]。

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

$$(1-2) \quad R_1(\lambda) = 1 - \alpha_0 \lambda,$$

$$(1-3) \quad R_k(\lambda) = \left(1 - \alpha_{k-1} \lambda + \frac{\alpha_{k-1} \beta_{k-2}}{\alpha_{k-2}}\right) R_{k-1}(\lambda) - \frac{\alpha_{k-1} \beta_{k-2}}{\alpha_{k-2}} R_{k-2}(\lambda), \quad k = 2, 3, \dots$$

同じ初期値 x_0 から反復計算を行うとき、Bi-CG 法、CGS 法、Bi-CGSTAB 法の残差ベクトルは以下のよう

$$(1-4) \quad r_k^{\text{Bi-CG}} = R_k(A) r_0,$$

$$(1-5) \quad r_k^{\text{CGS}} = R_k(A) R_k(A) r_0,$$

$$(1-6) \quad r_k^{\text{Bi-CGSTAB}} = Q_k(A) R_k(A) r_0.$$

CGS 法、Bi-CGSTAB 法の残差多項式はともに Bi-CG 法の残差多項式 $R_k(\lambda)$ を持っている。CGS 法、Bi-CGSTAB 法中のその $R_k(\lambda)$ の部分をそれぞれの Bi-CG 部分と呼ぶ。大ざっぱに言うと、CGS 法は二個の Bi-CG 部分からできていて、Bi-CG 法の特徴を拡張する自乗性をもつ。一方、Bi-CGSTAB 法は Bi-CG 部分と、そのほか STAB という部分 (これは式 (1-6) の多項式 $Q_k(\lambda)$ を指すが、本研究では $Q_k(\lambda)$ の性質には直接言及しない) からできている。理論上、CGS 法、Bi-CGSTAB 法はこの Bi-CG 部分で収束性を裏付けられている。しかし、実際には数値計算上の丸め誤差が存在するため、CGS 法、Bi-CGSTAB 法では、Bi-CG 法の $R_k(\lambda)$ と異なるものが得られている。CGS 法、Bi-CGSTAB 法の Bi-CG 部分が受けた丸め誤差の影響は、CGS 法、Bi-CGSTAB 法の収束性に大きく関わってくる。そこで本研究の主たる目的は次の 2 点である。

- Bi-CG 法、CGS 法、Bi-CGSTAB 法の丸め誤差の影響を各解法の反復過程から分離することと、
- その影響を受ける各解法の収束特性を評価することである。

本研究では、Bi-CG 法がよい収束性を持つ数値例を取り上げ、まず、この問題の固有値と固有ベクトルを求める。そして残差多項式によって Bi-CG 法、CGS 法、Bi-CGSTAB 法の残差ノルムを計算し、その結果を各解法の反復過程の残差ノルムと比較する。その比較結果から反復解法の研究手段として、残差多項式が数値的に信頼に足るものであることを確認する。さらに、残差多項式を用いて、CGS 法、Bi-CGSTAB 法の収束特性を追求する。

2 数値実験の丸め誤差

以下のすべての数値実験は、富士通 VP-2600 上で倍精度で行なわれた。

ここでは、 x - y 平面上の正方形領域 $(0, 1) \times (0, 1)$ において、次のポアソン方程式のディレクリ境界値問題を考える。

$$(2-1) \quad \begin{aligned} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} &= -2\pi^2 \sin(\pi(x+y)), & 0 < x, y < 1, \\ u(x, 0) &= \sin(\pi x), & 0 \leq x \leq 1, \\ u(x, 1) &= -\sin(\pi x), & 0 \leq x \leq 1, \\ u(0, y) &= \sin(\pi y), & 0 \leq y \leq 1, \\ u(1, y) &= -\sin(\pi y), & 0 \leq y \leq 1. \end{aligned}$$

$(0, 1) \times (0, 1)$ を x - y 両方向ともに 26 等分割し、式 (2-1) を 5 点中心差分で離散化すると、連立 1 次方程式

$$(2-2) \quad Ax = b$$

が得られる。ただし、 625×625 行列 A は対称正定値である。

2.1 α_k, β_k の計算値

Bi-CG 法, CGS 法, Bi-CGSTAB 法の中の $R_k(\lambda)$ の性質を強く決定づける α_k と β_k は、数学的にはそれぞれ同値であるが、各解法のアルゴリズムの中では見かけ上異なった計算式で表されている。すなわち、Bi-CG 法*では、

$$(2-3) \quad \alpha_k^{\text{Bi-CG}} = \frac{(r_k^{\text{Bi-CG}}, r_k^{\text{Bi-CG}})}{(p_k^{\text{Bi-CG}}, Ap_k^{\text{Bi-CG}})},$$

$$(2-4) \quad \beta_k^{\text{Bi-CG}} = \frac{(r_{k+1}^{\text{Bi-CG}}, r_{k+1}^{\text{Bi-CG}})}{(r_k^{\text{Bi-CG}}, r_k^{\text{Bi-CG}})},$$

CGS 法では、

$$(2-5) \quad \alpha_k^{\text{CGS}} = \frac{(r_0, r_k^{\text{CGS}})}{(r_0, Ap_k^{\text{CGS}})},$$

$$(2-6) \quad \beta_k^{\text{CGS}} = \frac{(r_0, r_{k+1}^{\text{CGS}})}{(r_0, r_k^{\text{CGS}})},$$

そして、Bi-CGSTAB 法では、

$$(2-7) \quad \alpha_k^{\text{Bi-CGSTAB}} = \frac{(r_0, r_k^{\text{Bi-CGSTAB}})}{(r_0, Ap_k^{\text{Bi-CGSTAB}})},$$

$$(2-8) \quad \beta_k^{\text{Bi-CGSTAB}} = \frac{\alpha_k^{\text{Bi-CGSTAB}} (r_0, r_{k+1}^{\text{Bi-CGSTAB}})}{\omega_k (r_0, r_k^{\text{Bi-CGSTAB}})} \left(= \frac{1}{\omega_k} \frac{(r_0, r_{k+1}^{\text{Bi-CGSTAB}})}{(r_0, Ap_k^{\text{Bi-CGSTAB}})} \right)$$

となる。

ここで、初期値 $x_0 = 0$ とし、式 (2-2) を Bi-CG 法, CGS 法そして Bi-CGSTAB 法で解くことにする。反復計算は 40 回まで繰り返した。反復のときに、各解法の 3 種類の α_k と β_k の履歴を記憶しておく。図 1 にそのうち 20 回までの α_k と β_k の値を示す。

*ここで、行列 A は対称正定値だから、これは本質的に CG 法そのものになる。

反復回数	Bi-CG 法			CGS 法			Bi-CGSTAB 法		
	α_k	β_k	$\log_{10}(\frac{\ r_k\ }{\ b\ })$	α_k	β_k	$\log_{10}(\frac{\ r_k\ }{\ b\ })$	α_k	β_k	$\log_{10}(\frac{\ r_k\ }{\ b\ })$
0	.512168	.277872	0.00	.512168	.277872	0.00	.512168	.277872	0.00
1	.704144	.517553	-0.28	.704144	.517553	-0.41	.704144	.517553	-0.50
2	.802852	.660594	-0.42	.802852	.660594	-0.61	.802852	.660594	-0.73
3	.850576	.729661	-0.51	.850576	.729661	-0.75	.850576	.729661	-0.88
4	.866079	.747695	-0.58	.866079	.747695	-0.85	.866079	.747695	-0.99
5	.862954	.736461	-0.64	.862954	.736461	-0.96	.862954	.736461	-1.10
6	.850941	.712209	-0.71	.850941	.712209	-1.11	.850941	.712209	-1.21
7	.835908	.684325	-0.78	.835908	.684325	-1.28	.835908	.684325	-1.33
8	.820550	.656632	-0.87	.820550	.656632	-1.48	.820550	.656632	-1.48
9	.805391	.629320	-0.96	.805391	.629320	-1.70	.805391	.629320	-1.68
10	.789562	.600309	-1.06	.789562	.600309	-1.98	.789562	.600309	-1.96
11	.771098	.846111E-16	-1.17	.771098	.839335E-16	-2.30	.771098	-.331541E-12	-2.39
12	.130246	.890470E-03	-9.20	.289420E-01	-.169620	-1.52	.189208	-.387949	-6.49
13	.136836	.409983E-02	-10.73	-.954688E-02	-.159701E+01	-1.74	.125652E+01	.670531	-8.34
14	.143403	.575111E-02	-11.92	.148547	.841121E+01	-1.69	.100679	-.248458	-8.37
15	.149196	.964115E-02	-13.04	.815374E-01	.354444E+01	-1.52	.742414	-.430804	-9.98
16	.153668	.168319E-01	-14.05	.523612E-01	.185172E+01	-1.40	.258954	-.317278E-01	-11.19
17	.207861	.324893	-14.94	.472228E-01	.142995E+01	-1.49	.457531	-.143144	-12.20
18	.110999E+01	.282881E+01	-15.18	.374862E-01	.102201E+01	-2.17	-.734983E-01	-.194014E+01	-12.76
19	.301972	.183575	-14.96	.339587E-01	.887106	-2.43	-.727393	-.141434E+01	-13.44
20	.366965	.756373	-15.32	.337250E-01	.880909	-1.54	.422598	.647289E-01	-14.47

図1 Bi-CG 法、CGS 法、Bi-CGSTAB 法の α_k と β_k の履歴

図1の3種類の α_k , β_k を観察すると次のことがわかる。

- 10回の反復までは各解法の α_k , β_k , そして11回目の α_{11} までは同じ値である。
- しかし、反復11回目の β_{11} (図中の矢印)から、各解法の α_k , β_k は全く違った値になっている。

2.2 反復過程の残差ノルム

そのときのBi-CG法, CGS法, Bi-CGSTAB法の残差ノルムの様子を図2に示す。図2において水平方向は反復回数を表わし、垂直方向は相対残差ノルムの常用対数 $\log_{10}(\|r_k\|/\|b\|)$ を表わす。

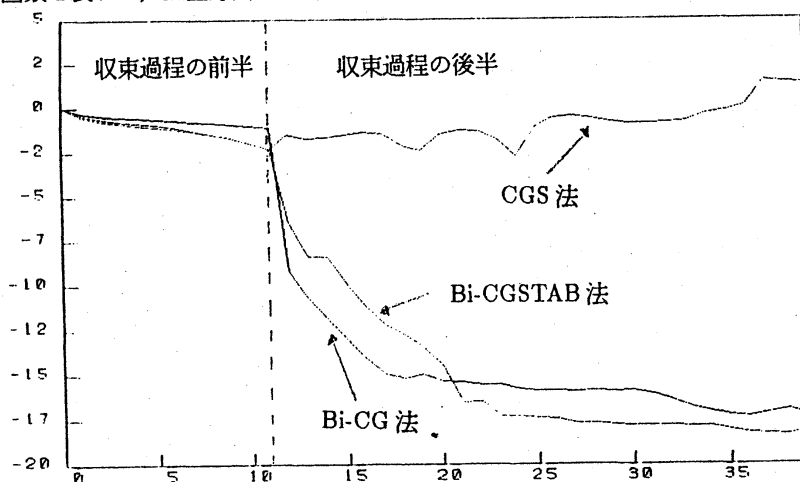


図2 アルゴリズムにおける残差ノルムの履歴

図2から、反復過程は、その残差ノルムの収束の様子から、前半部分と後半部分に分けられることがわかる。反復11回までの前半部分では、各解法の残差ノルムはいずれもほとんど減少していない。反復11回以後の後半部分では、Bi-CG法とBi-CGSTAB法は残差ノルムが突然減少し始める。一方、CGS法は40回まで反復計算を繰り返しても残差ノルムが減少する気配さえもみせなかった(数値実験では反復を250回まで続けたが結局減少しなかったことを付記する)。

2.3 いくつかの疑問点

この簡単な数値実験を通して、我々はCGS法とBi-CGSTAB法の収束特性に以下のような疑問をいだいた。

- (a) CGS法の収束過程の後半において、残差ノルムは何故Bi-CG法のように減少しないのか？また、そのときCGS法の自乗性はどのように働いたのか？
- (b) Bi-CGSTAB法の残差ノルムは、何故Bi-CG法のように突然減少するようになったのか？

実は、全ての解法は理論上12回目のときゼロに収束するはずである(理由は後の章で説明する)。しかし、実際の計算においてはBi-CG法、Bi-CGSTAB法は理論解析に比べると収束が遅い。特にCGS法は理論に反して収束しなかった。これらの結果は、実際の計算中に発生した丸め誤差の影響によるものと言で済ましてよいが、実は丸め誤差が、Bi-CG法、CGS法、Bi-CGSTAB法のどの部分にどのように影響を及ぼしているかということはまだよくわかっていない。

そこで、丸め誤差に関するこれらの疑問に答えるために、残差多項式に着目し、考察を進めることにする[2]。

3 残差多項式の計算及び考察

式(2-3)~(2-8)から求められた3種類の α_k と β_k を三項漸化式(1-3)に代入すると、各解法の残差多項式が具体的に求められる。図1に示したように、3種類の α_k と β_k は反復過程の後半部分から違った値になっており、そのため各解法の残差多項式の共通項 $R_k(\lambda)$ 自身も当然異なったものになっている。そこでこれらをはっきり区別する意味で、Bi-CG法、CGS法、Bi-CGSTAB法の残差多項式をそれぞれ $R_k^{\text{Bi-CG}}(\lambda)$ 、 $R_k^{\text{CGS}}(\lambda)$ 、 $R_k^{\text{Bi-CGSTAB}}(\lambda)$ でそれぞれ表すことにする。

3.1 固有値、固有ベクトル、初期残差ベクトルの重みの計算

A の固有値 λ_{ij} は次の式で求められる。

$$(3-1) \quad \lambda_{ij} = 4\left(\sin\left(\frac{i\pi h}{2}\right)^2 + \sin\left(\frac{j\pi h}{2}\right)^2\right), \quad i, j = 1, 2, \dots, 25.$$

また λ_{ij} に対応する固有ベクトル u_{ij} は次のように表される[4]。

$$(3-2) \quad u_{ij} = \{4h^2 \sin(i\pi kh) \sin(j\pi lh)\}_{k,l=1}^{25}, \quad i, j = 1, 2, \dots, 25.$$

固有ベクトル u_{ij} は、互いに直交する単位ベクトルであるので、それらは $\mathbf{R}^{625}$ 空間の基底ベクトルになる。初期残差ベクトル $r_0 (= b)$ を、行列 A の固有ベクトル u_{ij} で次のように展開する。

$$(3-3) \quad r_0 = \sum_{i,j=1}^{25} c_{ij} u_{ij}.$$

ここで重み c_{ij} は、

$$(3-4) \quad c_{ij} = (b, u_{ij}).$$

で求められ、その分布は図3のように示される。図の水平方向は固有値を表わし、垂直方向は $|c_{ij}|$ の常用対数 $\log_{10}(|c_{ij}|/(4h^2))$ を表わす。

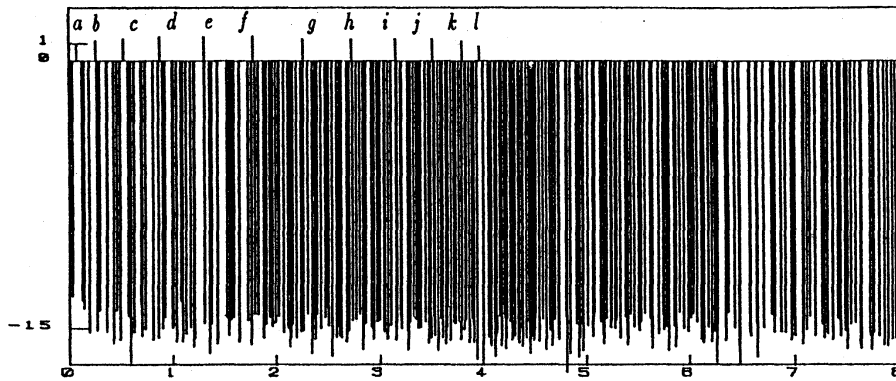


図3 固有値区間における重み c_{ij} の分布

そこで重みの大小をはっきり認識することにする。図3の中で $a, b, \dots, l$ と表された12個の重み c_{ij} (注: 全て二重根) の絶対値は $10^{-1.5} < |c_{ij}| < 10^{-0.8}$ になっており、これらの重みを大重みと呼ぶ。大重み以外の重み c_{ij} の絶対値は、 $10^{-19.7} < |c_{ij}| < 10^{-15.1}$ になり、これらの重みを小重みと呼ぶ。実は、全ての小重み c_{ij} の理論値がゼロであることが容易に確かめられる。それで、初期残差ベクトル r_0 はたった12個の固有ベクトルの組合せになって、理論上各解法は反復の12回目で完全に収束するはずである。

3.2 残差多項式による残差ノルムの計算

さて、反復の第 k ステップにおいて、Bi-CG法、CGS法、Bi-CGSTAB法の残差ノルムは、式(2-3)~(2-8)から計算された3種類の α_k と β_k 、そして式(3-4)の c_{ij} 、さらにそれぞれの残差多項式を用いると、次のように計算できる。

$$(3-5) \quad \|r_k^{\text{Bi-CG}}\|^2 = \sum_{i,j=1}^{25} c_{ij}^2 \{R_k^{\text{Bi-CG}}(\lambda_{ij})\}^2$$

$$(3-6) \quad \|r_k^{\text{CGS}}\|^2 = \sum_{i,j=1}^{25} c_{ij}^2 \{R_k^{\text{CGS}}(\lambda_{ij})\}^4$$

$$(3-7) \quad \|r_k^{\text{Bi-CGSTAB}}\|^2 = \sum_{i,j=1}^{25} c_{ij}^2 \{Q_k(\lambda_{ij})\}^2 \{R_k^{\text{Bi-CGSTAB}}(\lambda_{ij})\}^2$$

式(3-5)~(3-7)から計算された残差ノルムの様子を図4に示す。

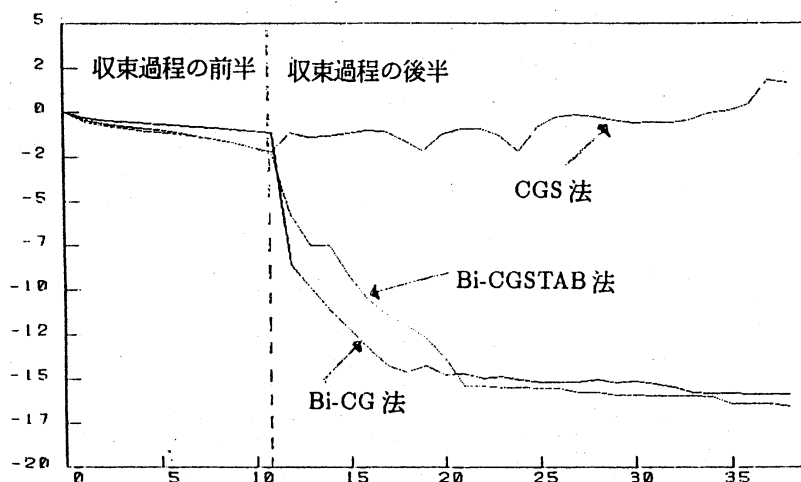


図4 残差多項式による残差ノルムの履歴

3.3 反復過程の丸め誤差と残差多項式の丸め誤差の相似性

我々は各解法の反復過程の演算と各残差多項式の演算の両方を併せ考え、丸め誤差の影響を次のようにまとめる。

- 式(2-2)の右辺項 b を計算するとき丸め誤差が混入する。それを初期ゴミと呼ぶ。式(3-4)によって計算した重み c_{ij} に含まれる丸め誤差はその初期ゴミに対応する。
- 反復過程の演算において混入する丸め誤差を反復ゴミと呼ぶ。 α_k, β_k の違いはその反復ゴミによるものである。逆に、 α_k, β_k はその反復ゴミの情報を把握している。何故なら、 α_k, β_k が決定されると各解法のアルゴリズムの性質も決定されるからである。

図4を図2と比較すると、残差多項式によって計算された残差ノルムは、実際のアルゴリズムから得られた残差ノルムとほぼ同じ軌跡を辿ることから、残差多項式によって計算された残差ノルムの受けた丸め誤差の影響は、実際のアルゴリズムの残差ノルムの受けた丸め誤差の影響と同じオーダーのものといえる。

そこで次の章からは、我々は式(3-5)~式(3-7)を考える対象にし、重み c_{ij} の特徴と残差多項式の特徴を調べる。そしてBi-CG法、CGS法、そしてBi-CGSTAB法の初期ゴミと反復ゴミの影響を分析する。

4 丸め誤差の分離

一般に、反復解法の実際の計算結果は、解法の理論解析という本質部分と、丸め誤差による反復ゴミから成りたっている。ここでは、残差多項式を用いて、初期ゴミのない各解法を模擬し、各解法の本質と思われる部分と、反復ゴミと思われる部分を分離し、その影響を考察する。

添字集合 Θ_1 と Θ_2 を次のように定義すると、

$$(4-1) \quad \Theta_1 = \{(i, j) : |c_{ij}| \geq 10^{-2}\}$$

$$(4-2) \quad \Theta_2 = \{(i, j) : |c_{ij}| \leq 10^{-15}\}$$

図3から、大重み c_{ij} の添字は Θ_1 に、小重み c_{ij} の添字は Θ_2 にそれぞれ属する。すなわち、

$$(4-3) \quad \Theta_1 = \{(i, 1) : i = 2, 4, \dots, 24\} \cup \{(1, j) : j = 2, 4, \dots, 24\}$$

$$(4-4) \quad \Theta_2 = \{(i, j) : 1 \leq i, j \leq 25\} - \Theta_1$$

$$(4-5) \quad \Theta_1 \cup \Theta_2 = \{(i, j) : 1 \leq i, j \leq 25\}$$

理論解析では、添字集合 Θ_2 に対応する小重み c_{ij} がゼロになるが、式(3-4)によって実際の計算で得られた c_{ij} は図3に示したような小さな値になった。これは添字集合 Θ_2 における残差多項式の演算が、初期ゴミと反復ゴミによるものであると考えられる。

式(3-5)~(3-7)は次のように二つに分けて計算できる。

$$(4-6) \quad \|r_k^{\text{Bi-CG}}\|^2 = \sum_{(i,j) \in \Theta_1} + \sum_{(i,j) \in \Theta_2} c_{ij}^2 \{R_k^{\text{Bi-CG}}(\lambda_{ij})\}^2$$

$$(4-7) \quad \|r_k^{\text{CGS}}\|^2 = \sum_{(i,j) \in \Theta_1} + \sum_{(i,j) \in \Theta_2} c_{ij}^2 \{R_k^{\text{CGS}}(\lambda_{ij})\}^4$$

$$(4-8) \quad \|r_k^{\text{Bi-CGSTAB}}\|^2 = \sum_{(i,j) \in \Theta_1} + \sum_{(i,j) \in \Theta_2} c_{ij}^2 \{Q_k(\lambda_{ij})\}^2 \{R_k^{\text{Bi-CGSTAB}}(\lambda_{ij})\}^2$$

添字集合 Θ_1 に関する和の計算を図5に、添字集合 Θ_2 に関する和の計算を図6に示す。

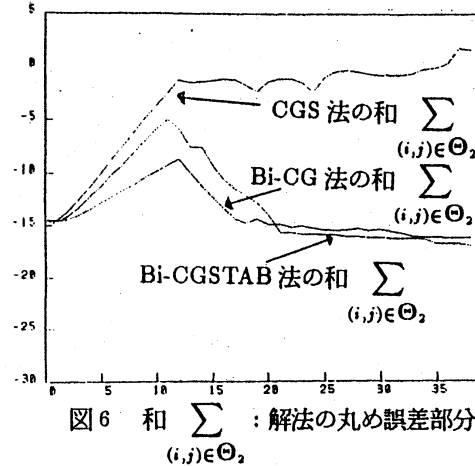
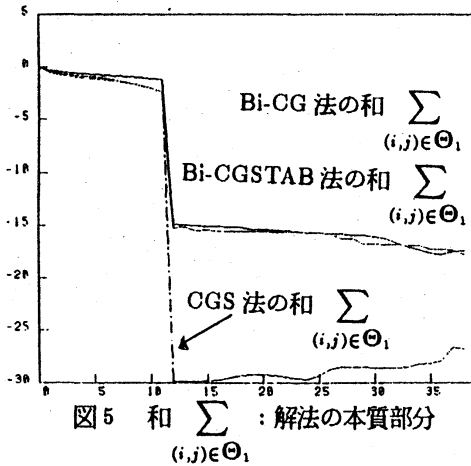


図5から、添字集合 Θ_1 の演算はちょうど12回の反復で、 10^{-15} 位のオーダに減少したことがわかった。これは各解法の理論に基づいた本質部分である。しかし、図6から理論上で完全にゼロになるはずの初期ゴミと反復ゴミと思われた添字集合 Θ_2 の演算は、反復回数につれて、次第に大きくなった。図5の中の12回以後の横線も反復ゴミによるものであるが、図6の12回以後の反復ゴミに比べると小さいので、ここで無視する。Bi-CG法とBi-CGSTAB法の反復ゴミはあるピークを過ぎてから、徐々に下がり、最後に 10^{-15} 以下に落ち着いた。

このことから、Bi-CG法とBi-CGSTAB法が11回から減少し始める理由がわかる。これは第2章の疑問(b)の答えになる。一方、図6のCGS法の反復ゴミは40回反復でも、小さくなる気配をみせなかった。この反復ゴミは第2章の疑問(a)の「CGS法が減少しない」原因である。

5 残差多項式の考察

CGS法、Bi-CGSTAB法のBi-CG部分の違いについて述べる前に、まず、Bi-CG法自身の $R_k(\lambda)$ がCGS法、Bi-CGSTAB法のBi-CG部分ほど丸め誤差に影響されていないことを実証する。そのため、次の特殊な数値実験を行う。Bi-CG法で得られた $R_k^{\text{Bi-CG}}(\lambda)$ を、本来の $R_k^{\text{CGS}}(\lambda)$ と $R_k^{\text{Bi-CGSTAB}}(\lambda)$ の代わりに式(3-5)、式(3-6)、式(3-7)に代入し、それらの和を計算する。それらの和をそれぞれ(A):Bi-CG^{Bi-CG}和(Bi-CG法自身の残差多項式による残差ノルム)、(B):CGS^{Bi-CG}和、(C):Bi-CGSTAB^{Bi-CG}和と呼ぶ。計算の結果を図7に示す。

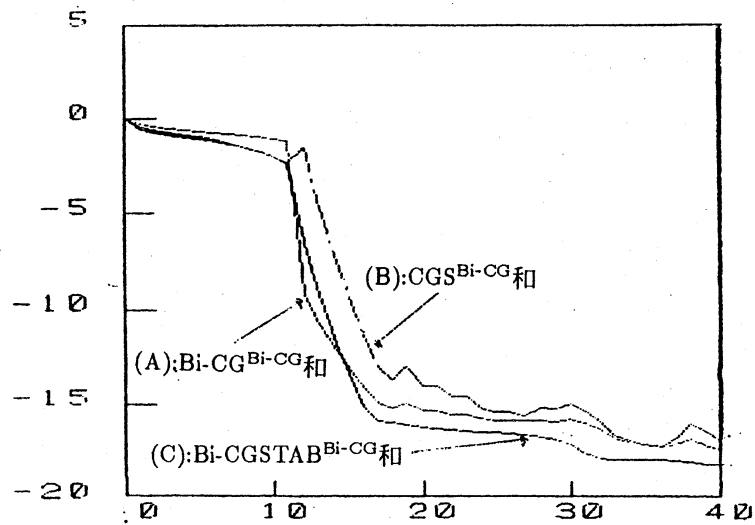


図7 $\alpha_k^{\text{Bi-CG}}$ と $\beta_k^{\text{Bi-CG}}$ を用いるCGS法とBi-CGSTAB法

図7を図2と比較すると、次のことがわかる。

- 図4で収束をしない式(3-6)の演算は、 $R_k^{\text{Bi-CG}}(\lambda)$ を使うと収束した。
- $R_k^{\text{Bi-CG}}(\lambda)$ を使った式(3-7)の演算は、図4の従来の式(3-7)より収束性が少し改善された。

したがって、Bi-CG法の残差多項式は他の二つほど丸め誤差に影響されていないことがわかる。

次に、各解法の残差多項式のグラフを反復ごとに描き出し、相対的に丸め誤差の影響の少ないBi-CG法の残差多項式の性質を基準とし、CGS法のBi-CG部分の性質、Bi-CGSTAB法のBi-CG部分の性質を考察することにする。

5.1 残差多項式のグラフ表現

式(3-5)~(3-7)から、反復解法の残差ノルムの大きさは、その解法の各固有値 λ_{ij} に対応する残差多項式の値 $R_k(\lambda_{ij})$ が如何に0に近づくかに関係することがわかる。しかし、固有値の分布区間において、残差多項式のグラフを反復ごとにそのままに描くと、反復回数が多いときの次数の大きい残差多項式のグラフを観察しても、 λ_{ij} が残差多項式の零点としてどの位のオーダーになっているかがわかりにくい。

そこで、残差多項式のグラフを次のように表現する。

- 横軸は、固有値の分布区間(0, 8)における固有値 λ_{ij} を表す。
- 縦軸は、残差多項式の値の絶対値の常用対数をとる。ただ、それらの点を結んでいくと、大変見にくい図になるので、各固有値 λ_{ij} に対応する棒グラフを採用する。
- おおのこの図は、上中下3段に分かれており、上からBi-CGSTAB法、CGS法そしてBi-CG法の順で各残差多項式の絶対値の常用対数を示す。

収束過程の反復回数 k が1から39までの残差多項式の様子を図8に示す。

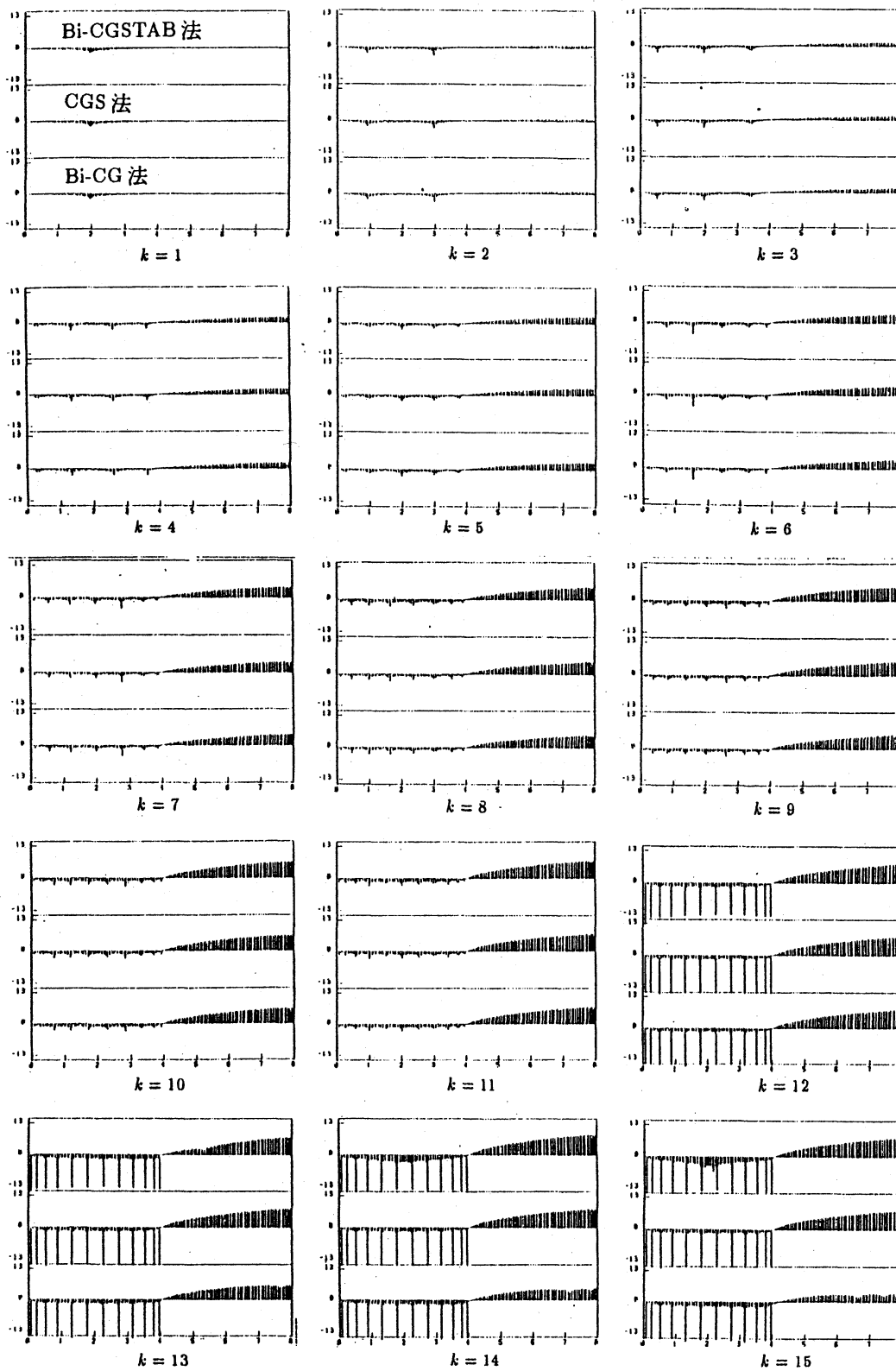


図8 Bi-CG 法, CGS 法, Bi-CGSTAB 法の残差多項式 $R_k(\lambda)$ のグラフ

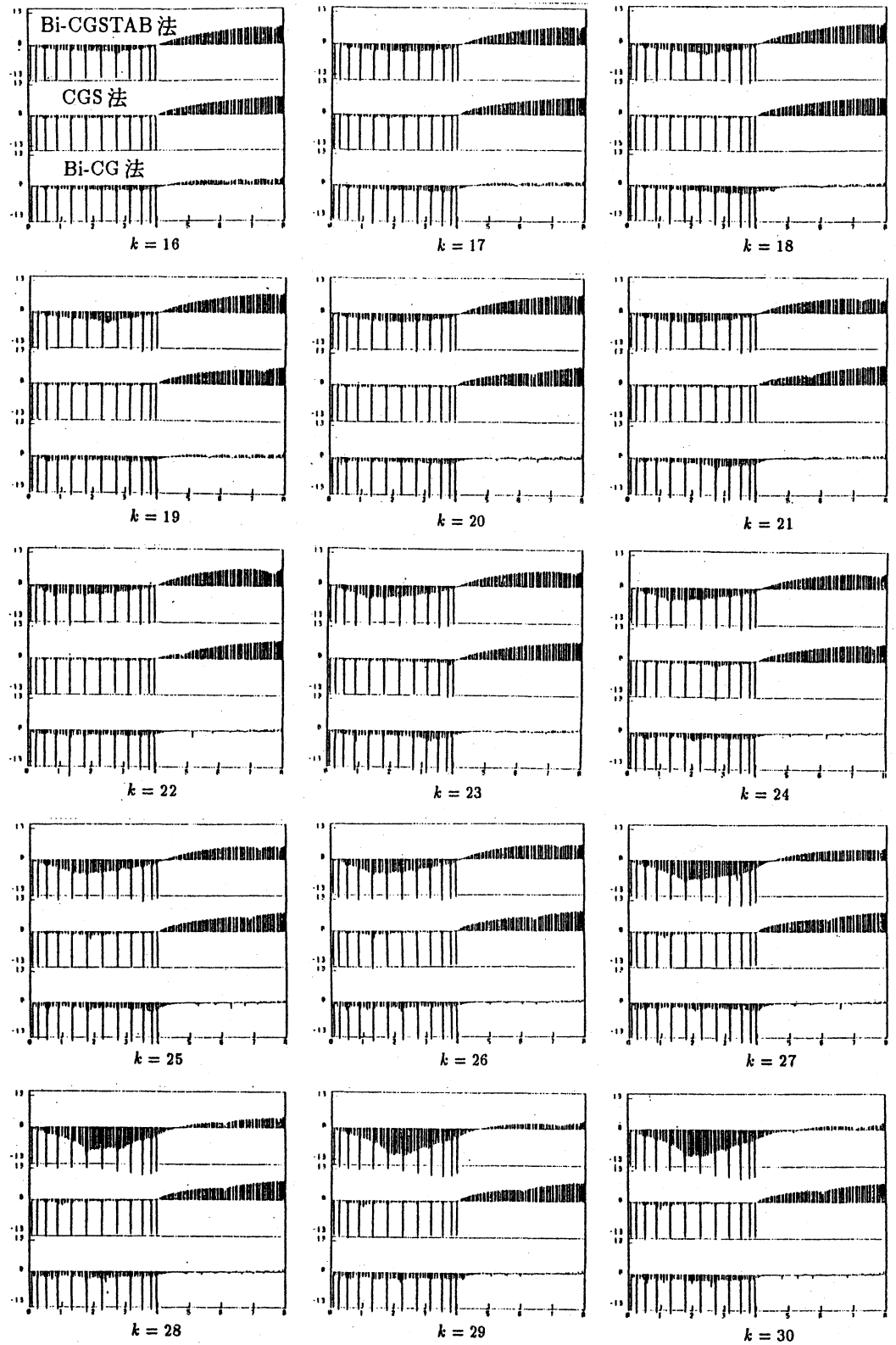


図8の続(その1)

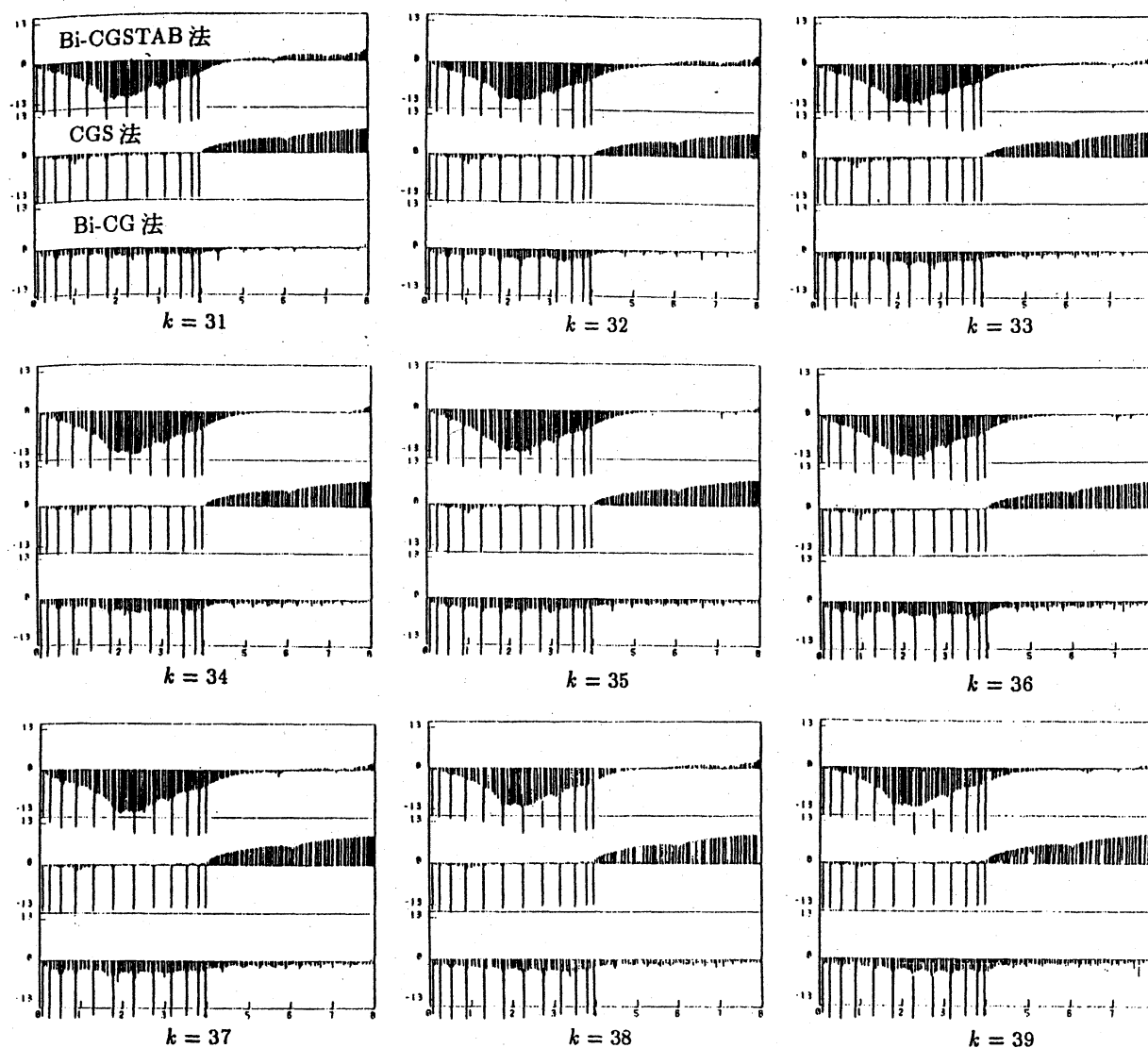


図8の続(その2)

5.2 グラフから見た残差多項式の機能とその比較

各解法が受けた初期ゴミは同じであるが、 α_k , β_k が異なる計算値になっていることから、各解法が受けた丸め誤差の影響も異なることがわかる。そこで、残差多項式のグラフから各解法が受けた丸め誤差の影響を読み取り考察する。

5.2.1 Bi-CG法の残差多項式の機能

Bi-CG法の残差多項式の特徴をまとめ、その収束のメカニズムを見極めたのち、CGS法とBi-CGSTAB法のBi-CG部分の比較をすることにする。

Bi-CG 法：12 回までのグラフでは、12 個の大重みをもつ固有値 λ_{ij} に対応する残差多項式の値 $R_k(\lambda_{ij})$ が、解法自身の小さくすべき対象になっていた。それらの大きさが 12 回目まで 10^{-13} まで引き下げられた。すなわち、12 個の大重みをもつ固有値が 12 次の残差多項式の根になった。したがって、根になっていない残りの小重みをもつ固有値に対応する残差多項式の値が小さくなる保証は全くない。そのとき、固有値分布区間の左半分 $(0, 4]$ に属した小重みに対応する残差多項式の値は、同じ区間に分布している大重みに対応する残差多項式の値の影響で、 10^0 の以下に抑えられた。一方、大重みのない右半分 $[4, 8)$ では、小重みに対応する残差多項式の値が反復を続けるにつれて、次第に大きくなっていった（初期ゴミがなければ、この時の Bi-CG 法はもう収束したはずが、初期ゴミと反復ゴミで、残差ノルムはまだゼロに収束していない）。その後の反復では、大重みに対応する残差多項式の値が小さいオーダに保ったまま、右半分の小重みに対応する残差多項式の値が徐々に減少している。34 回のあたりからすべての残差多項式の値は、 10^0 位のオーダになった。

我々は、残差多項式をこのような大重みを先に、小重みを後に分けて処理していくプロセスは、Bi-CG 法の収束に関する固有機能が残差多項式に反映したものと解釈する。言い替えば、12 回まで初期ゴミと反復ゴミが相対的に極小であるので、Bi-CG 法の固有機能は残差ノルムの大きさを左右する大重み部分を処理の対象にし作用する。大重み部分の比重が相対的に小さくなると、初期ゴミと反復ゴミの影響がではじめる。そのため、13 回の反復からは、Bi-CG 法の固有機能が初期ゴミと累積した反復ゴミの影響を取り除くように働く。

5.2.2 CGS 法, Bi-CGSTAB 法の Bi-CG 部分の固有機能の比較

次に、CGS 法, Bi-CGSTAB 法の Bi-CG 部分のグラフを反復ごとに追跡し、Bi-CG 法の残差多項式と比較し、それらの Bi-CG 部分の固有機能を考察する。

10 回までの 3 種類の α_k と β_k の一致性からも予想できるように、12 回までの上中 2 段のグラフは、下段のグラフと同じである。つまり、初期ゴミと反復ゴミの影響が出る前は、CGS 法, Bi-CGSTAB 法の Bi-CG 部分の固有機能は Bi-CG 法のそれと同じである。ところが、 β_{10} の相違からも予測できるように、その後 CGS 法のグラフ, Bi-CGSTAB 法のグラフは、Bi-CG 法のグラフと違ってくる。

CGS 法：CGS 法のグラフでは、大重みに対応する残差多項式の値は、依然小さく保ったままであるが、小重みに対応する残差多項式の値は、少しも小さくなる気配はない。図 7 で見たように、丸め誤差の影響の少ない $\alpha_k^{\text{Bi-CG}}$ と $\beta_k^{\text{Bi-CG}}$ を使うと $\text{CGS}^{\text{Bi-CG}}$ 和が収束したことから、CGS 法の α_k , β_k は丸め誤差の影響で収束するような機能を無くしたことがわかる。 β_k が非常に小さいとアルゴリズムの中での β_k^2 の演算において情報の伝播が中断される。そのため CGS 法の Bi-CG 部分の固有機能が破壊されてしまったと解釈できる。

Bi-CGSTAB 法：Bi-CGSTAB 法の β_{10} の (Bi-CG 法との) ズレは、CGS 法のズレよりひどい。それで、上段の Bi-CGSTAB 法のグラフでは、14 回回りから 26 回回りにかけて、左半分の小重みに対応する残差多項式の値が小さくなって、右半分の小重みに対応する残差多項式の値があまり小さくならなかった。Bi-CGSTAB 法の Bi-CG 部分の固有機能は、Bi-CG 法と比べると働くべき区間を間違ったように見えた。しかし、Bi-CG 法よりかなり遅くなったが、26 回あたりから右半分の小重みに対応する残差多項式の値も減少するようになった。したがって、Bi-CGSTAB 法の Bi-CG 部分の固有機能は一時的に故障したが、徐々に回復したことがわかる。

この例に限っていうと、残差多項式のグラフから見た CGS 法と Bi-CGSTAB 法の Bi-CG 部分の固有機能は、Bi-CGSTAB 法の Bi-CG 部分の方が CGS 法の Bi-CG 部分より勝っていることがわかる。

5.2.3 固有機能に対するコメント

一般に、何かの原因で CGS 法と Bi-CGSTAB 法の Bi-CG 部分の固有機能が故障したとき、CGS 法は自乗性のため、故障した同士が助け合うようなものでそこで自滅する可能性が高い。一方、Bi-CGSTAB 法は、STAB 部分の機能からの助けがあり、Bi-CG 部分の固有機能が回復するチャンスがある。このように理解できるのではないかと思う。

6 残差多項式による収束特性への考察

ここでは、残差多項式を用いるいくつかのテスト結果から、CGS 法と Bi-CGSTAB 法の収束特性、いわば CGS 法の自乗性と Bi-CGSTAB 法の STAB 性を考察し、両解法の比較を行う。

まず、第 4 章の図 5 で示した数値実験と同様に次のテストを行う。

- CGS 法の $R_k^{\text{CGS}}(\lambda)$ を、本来の $R_k^{\text{Bi-CG}}(\lambda)$ と $R_k^{\text{Bi-CGSTAB}}(\lambda)$ の代わりに、式 (3-5)、式 (3-6)、式 (3-7) の三つの式に代入し、それらの和を計算する。それらの和をそれぞれ (D):Bi-CG^{CGS}和、(E):CGS^{CGS}和 (CGS 法自身の残差多項式による残差ノルム)、(F):Bi-CGSTAB^{CGS}和と呼ぶ。それらの和の値を図 9 に示す。
- Bi-CGSTAB 法の $R_k^{\text{Bi-CGSTAB}}(\lambda)$ を、本来の $R_k^{\text{Bi-CG}}(\lambda)$ と $R_k^{\text{CGS}}(\lambda)$ の代わりに、式 (3-5)、式 (3-6)、式 (3-7) の三つの式に代入し、それらの和を計算する。それらの和をそれぞれ (G):Bi-CG^{Bi-CGSTAB}和、(H):CGS^{Bi-CGSTAB}和、(I):Bi-CGSTAB^{Bi-CGSTAB}和 (Bi-CGSTAB 法自身の残差多項式による残差ノルム) と呼ぶ。それらの和の値を図 10 に示す。

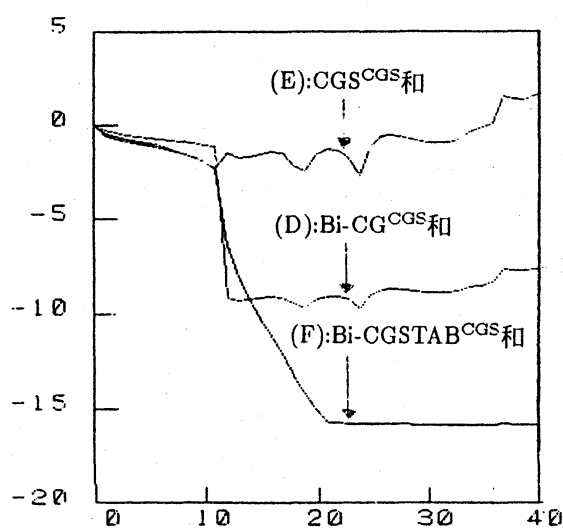


図 9 α_k^{CGS} と β_k^{CGS} を用いる
Bi-CG 法と Bi-CGSTAB 法

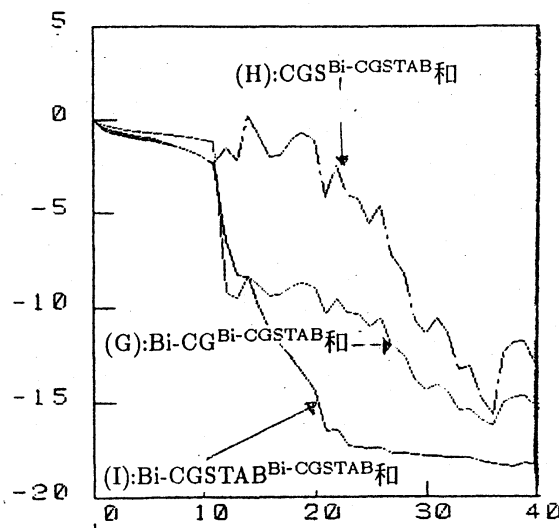


図 10 $\alpha_k^{\text{Bi-CGSTAB}}$ と $\beta_k^{\text{Bi-CGSTAB}}$ を用いる
Bi-CG 法と CGS 法

それらの和の様子から CGS 法と Bi-CGSTAB 法の Bi-CG 部分の固有機能, そして CGS 法の自乗性と Bi-CGSTAB 法の STAB 性を読み取ることができる。

- (a) 図 9 の (D):Bi-CG^{CGS}和の残差ノルムは 10^{-9} のオーダー位に留まったことから, CGS 法の Bi-CG 部分の機能は図 2 に示した Bi-CG 法の固有機能の半分しか働かないことがわかる。一方, 図 10 から Bi-CGSTAB 法の Bi-CG 部分 (G):Bi-CG^{Bi-CGSTAB}和は従来の Bi-CG 法の収束と比べると遅いものの収束はしたことがわかる。
- (b) 図 9 の (F):Bi-CGSTAB^{CGS}和は, (D):Bi-CG^{CGS}和より早く小さくなったことから, Bi-CGSTAB 法の STAB 部分が重要な役割を演じることがわかる。
- (c) 図 10 から, Bi-CGSTAB 法の Bi-CG 部分の自乗 (H):CGS^{Bi-CGSTAB}和が収束する傾向をみせたことから, Bi-CGSTAB 法の Bi-CG 部分が CGS 法の Bi-CG 部分より優れていることが再び確認できた。
- (d) 図 9 から, CGS 法の Bi-CG 部分の (D):Bi-CG^{CGS}が 10^{-9} 位のオーダーになったが, CGS 法の Bi-CG 部分の自乗 (F):CGS^{CGS}和, つまり, CGS 法自身の残差ノルムが全然減少しないという現象を観察することができる。すなわち, 和

$$(6-1) \quad \sum_{i,j=1}^{25} c_{ij}^2 \{R_k^{\text{CGS}}(\lambda_{ij})\}^2$$

は 10^{-9} 位まで減少した。しかし, 和

$$(6-2) \quad \sum_{i,j=1}^{25} c_{ij}^2 \{R_k^{\text{CGS}}(\lambda_{ij})\}^4$$

が全く減少しない。この現象は次のように説明できる。

式 (3-5) から, $R_k(\lambda)$ は, もともとすべての (i, j) に対して, 反復ごとに $c_{ij}^2 \{R_k(\lambda_{ij})\}^2$ を小さくさせるように働くことがわかる。大重みの所で, $R_k(\lambda_{ij})$ が小さくならなければ, $c_{ij}^2 \{R_k(\lambda_{ij})\}^2$ が小さくならない。小重みの所では, $R_k(\lambda_{ij})$ が多少大きくても, $c_{ij}^2 \{R_k(\lambda_{ij})\}^2$ はまだ小さい。Bi-CG 法のこのような $R_k(\lambda)$ の決め方は, CGS 法の自乗性に以下のように影響を及ぼす。すなわち,

$c_{ij}^2 \{R_k(\lambda_{ij})\}^4 = c_{ij}^2 \{R_k(\lambda_{ij})\}^2 \{R_k(\lambda_{ij})\}^2$ だから, 大重みの所で, $R_k(\lambda_{ij})$ が小さいので, CGS 法の $c_{ij}^2 \{R_k(\lambda_{ij})\}^4$ は Bi-CG 法の $c_{ij}^2 \{R_k(\lambda_{ij})\}^2$ よりずっと小さくなる。これは CGS 法の自乗性による「収束の加速性」を示している (図 5 を参照)。小重みの所で, $R_k(\lambda_{ij})$ が大きいので, CGS 法の $c_{ij}^2 \{R_k(\lambda_{ij})\}^4$ は Bi-CG 法の $c_{ij}^2 \{R_k(\lambda_{ij})\}^2$ よりずっと大きくなる。これは CGS 法の自乗性による「非収束の拡大性」を示している (図 6 を参照)。これらの現象から, 我々は CGS 法が持っている自乗性の良いと悪い両面を見ることができる。

以上の結果から, CGS 法の Bi-CG 部分の固有機能は, Bi-CGSTAB 法の Bi-CG 部分の固有機能ほど良くないことがわかる。また, CGS 法の自乗性がわるい方向に働く可能性があることもわかる。そして, Bi-CGSTAB 法の STAB 部分がいい働きをすることが間接的にわかる。

7 まとめ

本研究では、一つの対称問題に対する固有値解析を通じて、Bi-CG 法, CGS 法, Bi-CGSTAB 法の残差多項式の振舞いを研究し比較した。最初に、丸め誤差を反復過程から分離し、丸め誤差を受けないときの反復解法の本来の動きを確認した。次に、丸め誤差の影響を受けたときの、各解法の収束メカニズムを明かにし比較を行なった。最後に、丸め誤差の影響が大きいときに、CGS 法の自乗性の弱点を分析し、Bi-CGSTAB 法の STAB 部分の安定機能を間接的に確認した。対称問題に対する残差多項式による理論と数値的な観点から行なった本考察が、反復解法を比較するための一つの有効な手段になり得ることを実証した。しかし、非対称問題の理論的な解析は依然今後の課題として残されている。

参考文献

- [1] R. Fletcher, *Conjugate gradient methods for indefinite systems*, Lecture Notes in Mathematics 506, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1976, pp. 73-89.
- [2] M. Mori, *Visualization of the residual polynomials of the CG and the ICCG methods*, Proceedings of the International Symposium on Numerical Analysis, O. Celebi and B. Karasozen ed., Sept. 1-4, 1987, Middle East Technical University, Ankara, pp. 257-271.
- [3] P. Sonneveld, CGS, *A fast Lanczos-type solver for nonsymmetric linear systems*, SIAM J. Sci. Stat. Comput., 10 (1989), pp. 36-52.
- [4] R. Varga, *Matrix iterative analysis*, Prentice-Hall, 1962.
- [5] H. A. van der Vorst, Bi-CGSTAB: *A fast and smoothly converging variant of Bi-CG for the solution of nonsymmetric linear systems*, Preprint Nr.633, University Utrecht, Dept. Math., 1990