

BiCG 法系列の反復法の初期シャドウ (Shadow *) 残差ベクトルの選択について

藤野清次[†]
Seiji Fujino

阿部邦美[‡]
Kuniyoshi Abe

Abstract

Bi-CG 法, CGS 法, Bi-CGSTAB 法のような積型反復解法の反復過程では, 2つの残差ベクトル, 即ち初期残差と補助的役割を果たすと言われる初期 Shadow 残差, を反復の開始のときに与える必要がある. 前者の残差だけは初期解を与えることによって自ずと決まってくる. しかしながら, もともと, これらの残差に何を与えるかは任意にできるはずである. そこで, 本研究では, 反復解法の収束性に対する初期残差の影響について調べることにする. まず, 固有ベクトル成分の個数が異なるいろいろな初期残差の右辺項を持つ連立1次方程式を解くことにする. その結果, 初期残差がより多くの”主要な”固有ベクトル成分を持つとき, 残差は確実に収束するという事実が確かめられる. このことは, 言い換えると, 初期シャドウ残差により多くの固有ベクトル成分を持たすことによって, 反復解法の収束性を向上させられる可能性があることを示唆している. そこで, いくつかの数値実験を通して, 収束性に関する初期シャドウ残差の影響の度合について検証する.

1 はじめに

Bi-CG 法 [1] は, よく知られているように, 次の大規模な連立1次方程式を解くためのクリロフ (Krylov) 部分空間法の1つである.

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

ここで, A は $n \times n$ の大きさの非特異な行列 (必ずしも対称ではない) を指し, b はその右辺項 (以下, R.H.S. と略す) を指す. また, x_0 を解の初期推定値, そして $r_0 = b - Ax_0$ を対応する初期残差とする. 今まで Bi-CG 法の収束性を向上させるために多くの研究がなされてきた (例えば, [4, 8, 9, 10, 13] など). CGS 法 [9] は積型の解法の最初のものである. しかしながら, 多くの人が経験しているように, CGS 法は丸め誤差などのために収束が非常に不安定である. その後, Bi-CGSTAB 法 [10], 一般化積型 Bi-CG 法 [13], Bi-CGSTAB(l) 法 [8] などが次々と提案されてきた. これらは全てより安定した収束性を持たせるように工夫された解法である.

これらのアルゴリズムでは, 基本的に2つの初期残差をどのように与えてもよい. 1つのベクトル, すなわち初期値 x_0 を適当に与えると, それから初期残差 r_0 が自ずと決まってくる. もう1つの残差が初期シャドウ (Shadow) 残差 r_0^* である [8]. 後者の初期シャドウ残差 r_0^* は, アルゴリズムに付加された補助ベクトルであるとも言える. このことは, 方程式

$$A^T x^* = b^* \quad (2)$$

*Shadow の訳について: 英国の野党の Shadow Cabinet (‘影’の内閣と言われる) あるいは, ボクシングの Shadow Boxing などにおいて, Shadow という用語は定着しているが, ここでは発音どおり表示した

[†]広島市立大学情報科学部, 731-3194 広島市安佐南区大塚東3丁目4-1

[‡]理化学研究所情報環境室, 351-0198 埼玉県和光市広沢2-1

に対する残差 $b^* - Ax_0$ を意味しており, b^* は任意のベクトルである. 通常は, $r_0^* = r_0$ とするのが一般的である. しかし, ここでは, 各アルゴリズムの反復過程は 2 つの互いに独立な残差で始まるものとする. 近年, 初期シャドウ残差は収束性に重大な影響を及ぼすことがわかってきた [5]. さらに, 初期残差には乱数を与えるのがお奨めであるという報告もなされている [7]. そこで, 本研究では, これらのことが, 収束性を向上させるのに本当に有効であるかどうかを調べることにする.

ただし, ここでは, 有限の桁数での演算の影響をできるだけ排除するために, 固有ベクトルが数学的に得られる (sin 関数, cos 関数だけは用いる) モデル問題を採用することを付記する.

2 モデル問題と収束性

ここでは, 固有値と対応する固有ベクトルが数学的に得られるモデル問題をテスト問題として採用する [11]. すなわち, 以下のようなパラメータ σ を含むヘルムホルツ (Helmholtz) 方程式を通常の 5 点差分で近似して得られる連立 1 次方程式をここでは扱う.

$$u_{xx} + u_{yy} + \sigma u = f(x, y), \quad 0 < x, y < \pi \quad (3)$$

この式は, 正方形領域 $\Omega = (0, \pi) \times (0, \pi)$ で定義されており, 境界条件としては全周 Dirichlet 境界条件を課す. 格子の幅を, 両方向とも $h = \frac{1}{m+1}$ で与えると, 次のような $n \times n$ ($n = m^2$) の大きさの係数行列が得られる.

$$A := \begin{bmatrix} D_m & -I_m & & & \\ -I_m & D_m & -I_m & & \\ & \dots & \dots & \dots & \\ & & -I_m & D_m & -I_m \\ & & & -I_m & D_m \end{bmatrix}. \quad (4)$$

ただし, D_m と I_m は以下のように与えられる $m \times m$ の小行列である.

$$D_m := \begin{bmatrix} 4 - \sigma h^2 & -1 & & & \\ -1 & 4 - \sigma h^2 & -1 & & \\ & \dots & \dots & \dots & \\ & & -1 & 4 - \sigma h^2 & -1 \\ & & & -1 & 4 - \sigma h^2 \end{bmatrix}.$$

また, I_m は単位行列である. 行列 A の固有値 λ_{ij} と対応する固有ベクトル v_{ij} は以下のように表すことができる [11].

$$\lambda_{ij} := 4 - \sigma h^2 - \frac{2(4 - \sigma h^2)}{|4 - \sigma h^2|} (\cos(i \cdot \pi \cdot h) + \cos(j \cdot \pi \cdot h)) \quad (i, j = 1, 2, \dots, m),$$

$$v_{ij} := 4h^2 \sin(i \cdot \pi \cdot k \cdot h) \sin(j \cdot \pi \cdot l \cdot h)_{k,l=1}^m \quad (i, j = 1, 2, \dots, m).$$

行列 A は対称であるので, 最大 (最小) 固有値から行列の条件数を以下の式で求めることができる.

$$\text{cond}(A) = \frac{\max_{i,j} |\lambda_{ij}|}{\min_{i,j} |\lambda_{ij}|}.$$

表 1 にパラメータ σ の値とそのときの条件数を示す. 大きな条件数になる場合, すなわち, $m = 25$, $n = 625$ そして $\sigma = 350$, の場合を本研究では例として選んだ.

m	パラメータ: σ										
	0	50	100	150	200	250	300	350	400	450	500
15	103	1,664	497	191	165	140	22,345	333	691	1,451	955
25	273	6,238	2,314	335	886	6,292	523	39,077	858	322	954
50	1,053	29,415	13,265	1,215	5,958	4,765	1,439	1,833	10,663	2,004	2,416

表 1: 行列 A の条件数

2.1 右辺ベクトルと収束性

ここでは、方程式 (3) の右辺ベクトル および反復解法の収束性との関係について調べる。さらに、右辺ベクトルに含まれる固有ベクトル成分の数と収束性との関係についても言及する。行列 A の固有ベクトル v_{ij} と初期残差 r_0 の間には、

$$r_0 = \sum_{i,j=1}^m c_{ij} v_{ij}.$$

の関係がある。定数 c_{ij} は、しばしば基底ベクトル v_{ij} の重みとも呼ばれ、次の式を満たす。

$$c_{ij} = (b, v_{ij}) \quad (i, j = 1, 2, \dots, m). \quad (5)$$

さらに、ここでは次の 4 つの厳密解を取り扱うことにする。方程式 (3) の右辺の関数 $f(x, y)$ は、その厳密解が次のようになるように定められる。

$$u_1(x, y) = \sin(\pi(x + y)), \quad (6)$$

$$u_2(x, y) = \cos(\pi(x + y)), \quad (7)$$

$$u_3(x, y) = x^2 + y^2, \quad (8)$$

$$u_4(x, y) = e^{x \times y}. \quad (9)$$

各 b_1, b_2, b_3 そして b_4 を方程式 (6)–(9) から得られた右辺項と定める。また、 b_1, b_2, b_3 そして b_4 の各重み c_{ij} は式 (5) を使って求められる。数値実験の結果から、重みの絶対値: $|c_{ij}|$ はその大きさから 2 つに分類できることがわかった。1 つは比較的大きな重みの集団で、ここではそれを”主要重み”と呼ぶことにする。多分もう 1 つの重みの集団は、それに比べると非常に小さな絶対値を持つかまたは 0 の重みを持つものを指し、それを”弱小重み”と呼ぶことにする。表 2 に、各右辺項が持つ重みの絶対値が存在する区間を示す。表中の“×”印は”弱小重み”がなかったことを示している。

	b_1	b_2	b_3	b_4
“主要重み”	$(10^{1.9}, 10^{-2.3})$	$(10^{2.0}, 10^{-1.0})$	$(10^{1.0}, 10^{-2.4})$	$(10^{2.3}, 10^{-2.6})$
“弱小重み”	$(10^{-13.4}, 0]$	$(10^{-13.3}, 0]$	$(10^{-13.6}, 0]$	×

表 2: 各右辺ベクトルの“主要重み”と”弱小重み”の区間

右辺ベクトル: b_1, b_2, b_3 そして b_4 の”主要重み”と”弱小重み”の個数を表 3 に示す。”主要重み”とは、別の言い方をすると、1 次独立な成分の数を意味する。

さて、各右辺ベクトル: b_1, b_2, b_3 そして b_4 を持つ連立 1 次方程式に対する結果を次に示す。反復解法としては、Bi-CG 法、CGS 法、Bi-CGSTAB 法を使用した。計算では、初期シャドウ

	b_1	b_2	b_3	b_4
”主要重み”	24	145	481	625
”弱小重み”	601	480	144	0

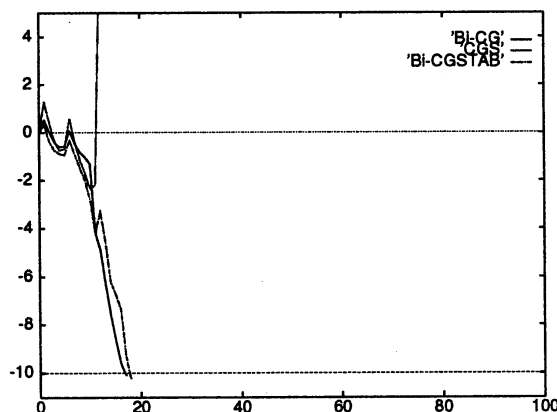
表 3: 各右辺ベクトルの”主要重み”と”弱小重み”の個数

残差として, $r_0^* = r_0$ と置いた. また, 反復の初期値はすべて $x_0 = \mathbf{0}$ と置いた. この理由は, 出来るだけ右辺ベクトルの影響が明確に現れるようにするためである. 計算はすべて SUN SPARC Station Ultra II 上で倍精度演算で行なった. 収束の様子を表した各々の図では, 水平方向に反復回数をとり, 垂直方向に $(\log_{10}(\|r_k\|_2/\|r_0\|_2))$ をとり, 両者の関係を示した. 収束判定条件は ε_{tol} が 10^{-10} 以下になったとき, 収束と判定した.

パラメータ $\sigma = 350$ のとき, 収束の様子を図 1 に b_1 のときの結果を, 同様に, 図 2 に b_2 , 図 3 に b_3 , 図 4 に b_4 のときの結果を各々示す. さらに, 表 4 に, Bi-CG 法, CGS 法そして Bi-CGSTAB 法の反復回数を示す. 表中の “×” 印は 3000 回反復を繰り返しても収束しなかったことを表す.

反復解法	b_1	b_2	b_3	b_4
Bi-CG	17	64	159	202
CGS	×	×	×	239
Bi-CGSTAB	18	71	288	358

表 4: 3 つの反復解法の収束までの反復回数

図 1: 右辺ベクトル b_1 のときの収束の様子

初期残差 r_0 は式 $b - Ax_0$ から得られたものであるのですが, 初期値を任意に選んでもよいのだが, ここでは $x_0 = \mathbf{0}$ と固定して考えた. したがって, 初期残差 r_0 は必然的に決まってしまう. 即ち, 等式: $r_0 = b$ が成り立つ. また, 初期残差の重みは式 (5) によって求められる. 重みの個数という観点から, 収束性に対する初期残差の影響について考察する. さらに, 初期残差に含まれる”主要重み”の個数が収束性にどのように影響しているのかについても次の節で探ることにする.

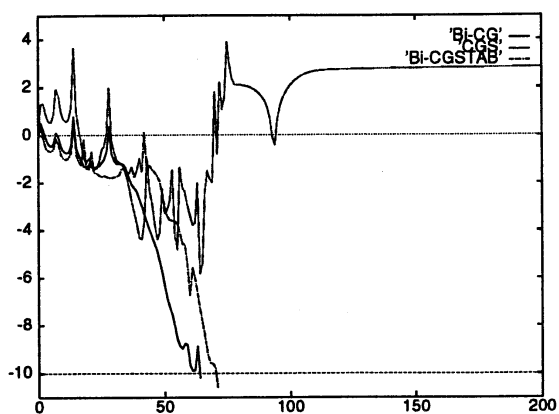


図 2: 右辺ベクトル b_2 のときの収束の様子

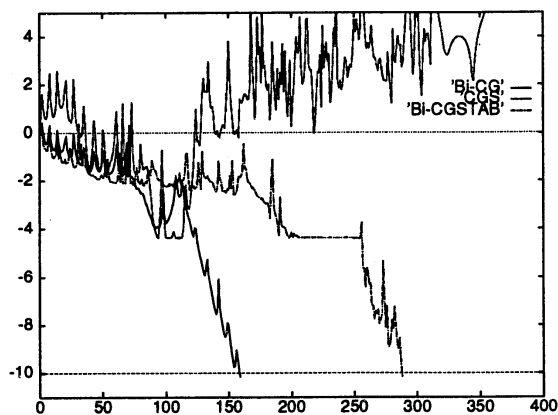


図 3: 右辺ベクトル b_3 のときの収束の様子

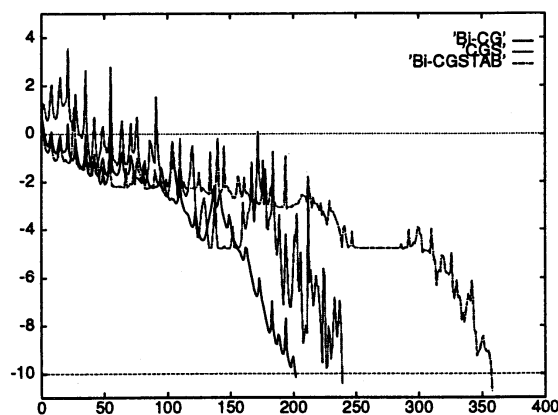


図 4: 右辺ベクトル b_4 のときの収束の様子

2.2 観察される項目

前節 2.1 で報告された数値実験結果に基づき、ここでは初期残差の“主要重み”の個数と収束性との関係について考察する。まず、“主要重み”の個数が増加するに従って収束するまでの反復回数も増えることがわかる。このことから、残差の収束は、単に行列 A の条件数だけでなく、初期残差ベクトルに含まれる“主要重み”の個数に影響を受けることがわかる。この他に次のような観察がなされる。

- “最も少ない”主要重み”の場合の初期残差ベクトル b_1 を選ぶと、Bi-CG 法と Bi-CGSTAB 法は、非常に少ない反復回数で収束する。”主要重み”の個数は、固有値 $\lambda_{1i} = \lambda_{i1} (i = 2, 4, \dots, 24)$ の 12 個の重みとみなせるので、数学的にも残差は反復回数が 12 回で収束するはずである。
- 初期残差 b_4 は最も多い”主要重み”を持っているので、どの解法も収束した。他のケースでは、CGS 法だけが発散した。このことから、少なくとも CGS 法にとっては、より多くの”主要重み”を持つ初期残差から反復計算を始めるべきだということがわかる。
- 右辺ベクトルに含まれる重みの数が増加すればするほど、収束までに必要な反復回数は増加する。何故なら、反復回数は”主要重み”の個数に強く依存しているからである。

ここで示した観察と考察から、残差は反復の初期の段階で収束することがわかる。しかしながら、同時に、初期残差が持つ”主要重み”が少ないと、発散する可能性も大きいことを意味している。したがって、これらの事実から 1 つの結論が得られる。すなわち、収束性の改良のためにはより多く”主要重み”を有する初期残差を選ぶことが重要である、ことがわかる。しかしながら、収束性についてもっと深く理解するには、もっと多くの経験を積まなくてはならないと思われる。そこで、次の節では、初期シャドウ残差のよりよい与え方について議論と考察をする。

3 初期シャドウ残差のよりよい選択の方法

次の連立 1 次方程式について考える。

$$\tilde{A}\tilde{x} = \tilde{b}, \quad (10)$$

ここで、

$$\tilde{A} = \begin{pmatrix} A & 0 \\ 0 & A^T \end{pmatrix}, \quad \tilde{x} = \begin{pmatrix} x \\ x^* \end{pmatrix}, \quad \tilde{b} = \begin{pmatrix} b \\ b^* \end{pmatrix}.$$

である。Bi-CG 法のアルゴリズムは、もともと共役勾配法 (Conjugate Gradient method) を線形系 $\tilde{H}\tilde{A}$ に形式的に当てはめたことから生まれたと言ってもよい。ここで、

$$\tilde{H} = \begin{pmatrix} 0 & I \\ I & 0 \end{pmatrix}.$$

である。 I は単位行列を表す。Bi-CG 法のアルゴリズムから生まれた残差 r_k は、次のように方向ベクトル p_k で計算される。

$$r_{k+1} = r_k - \alpha_k A p_k, \quad p_{k+1} = r_{k+1} + \beta_k p_k. \quad (11)$$

ここで、パラメータ α_k と β_k は Bi-CG 法のアルゴリズムの中で決定される。同様に、初期残差ベクトル r_k^* は、次に示すシャドウ方向ベクトル p_k^* を使って交互に更新されていく。

$$r_{k+1}^* = r_k^* - \alpha_k A^T p_k^*, \quad p_{k+1}^* = r_{k+1}^* + \beta_k p_k^*. \quad (12)$$

積型の反復解法の反復過程では、行列の転置: $A^T x$ の計算をしなくても残差の計算を進めることができる。また、シャドウ残差ベクトル列 r_k^* と シャドウ方向ベクトル列 p_k^* は反復ごとに更新する必要がない。しかし、計算過程では初期のシャドウ残差 r_0^* は使われる。したがって、初期残差 r_0 と初期シャドウ残差 r_0^* を陽に計算の最初で与えなければならない。通常よくやられるように、初期値を $x_0 = 0$ とすれば、初期残差 r_0 は必然的に決まってしまう。一方、初期シャドウ残差 r_0^* はどのように与えてもよいし、適切に与えることがより重要になってくる。

前節では、初期残差の”主要重み”の個数が少ないとき、丸め誤差の影響を強く受け、反復が発散することが示された。それ故、次のようなことに期待ができる。初期シャドウ残差 r_0^* が多くの”主要重み”を含めば収束性がよくなるであろう、という期待である。

それでは、初期シャドウ残差 r_0^* が本当にたくさんの”主要重み”を持てばいい影響があるのかを、数値実験で確かめてみよう。すでに示した図 1, 図 2そして図 3などからわかるように、CGS 法は発散した。また、右辺ベクトル b_4 は、最も多く”主要重み”を持つ場合であり、この場合は CGS 法は収束した。確認のため繰り返になるが、固有値 λ_{ij} はいずれの場合もまったく同じであることを付記する。表 5に、残差ベクトルとして選んだ 2 つの初期残差を示す。また、計算結果を図 5, 図 6と図 7に示す。

初期残差	図 5	図 6	図 7
r_0	b_1	b_2	b_3
r_0^*	b_4	b_4	b_4

表 5: 残差ベクトルとそれに対応する収束の様子を表す図

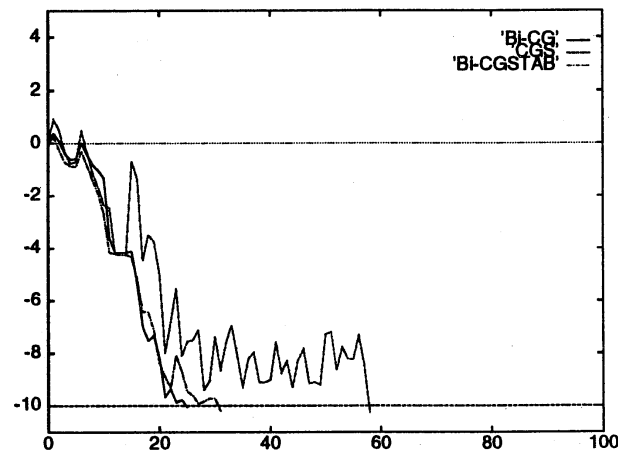


図 5: 残差ベクトル $r_0 = b_1$ と $r_0^* = b_4$ を用いたときの収束の様子

これらの図から次のようなことがわかる。CGS 法も含めてテストしたすべての解法が確実に収束した。特に、CGS 法の残差は、前の節で $r_0^* = r_0$ としたとき発散したのに対して、今回は収束した。一方、Bi-CG 法と Bi-CGSTAB 法の反復回数は増加した。しかし、”主要重み”の増加した割合に比べると、反復回数の増加はそれ程多いものではない。初期シャドウ残差 r_0^* としてより多くの”主要重み”を有する残差ベクトルを選ぶ有用性がこれである。収束までの反復回数の変化の様子を表 6に示す。この表から、右辺ベクトルを $r_0^* = b_4$ としたとき、CGS 法の反復回数が最も少なくなったという事実が分かる。

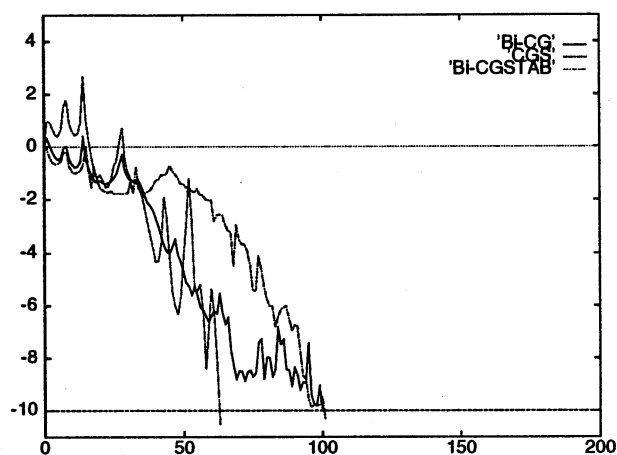


図 6: 残差ベクトル $r_0 = b_2$ と $r_0^* = b_4$ を用いたときの収束の様子

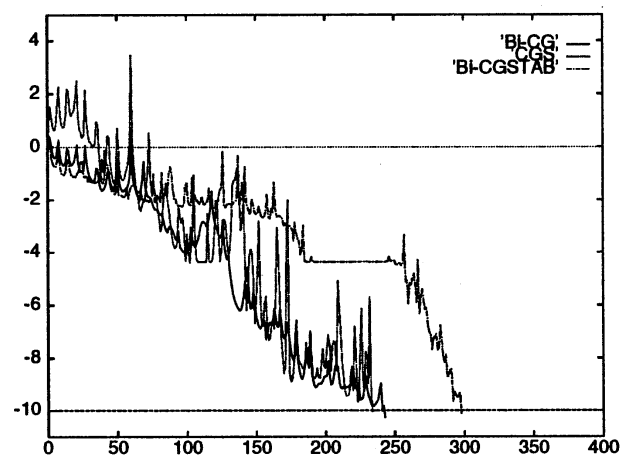


図 7: 残差ベクトル $r_0 = b_3$ と $r_0^* = b_4$ を用いたときの収束の様子

反復解法	$r_0 = b_1$		$r_0 = b_2$		$r_0 = b_3$	
	$r_0^* = r_0$	$r_0^* = b_4$	$r_0^* = r_0$	$r_0^* = b_4$	$r_0^* = r_0$	$r_0^* = b_4$
Bi-CG	17 → 25		64 → 100		159 → 243	
CGS	× → 58		× → 63		× → 234	
Bi-CGSTAB	18 → 31		71 → 101		288 → 298	

表 6: 初期シャドウ残差を”主要重み”の多いものに取り替えたときの反復回数の変化

4 まとめ

“主要重み”の数が互いに異なる右辺ベクトルに対して反復解法の収束性について調べた。その結果，“主要重み”の数が増加すればするほど，残差は確実に収束することがわかった。このことから，初期シャドウ残差は残差の収束に及ぼす影響の度合は従来考えられていた以上に大きいことが確認できた。したがって，積型反復解法，特に CGS 法，に対して安定でかつ確実な収束をより望むとき，初期シャドウ残差が“主要重み”を出来るだけ多く含むようにすることも大切であるとの結論が得られた。

謝辞

本研究をするに当たり，有益なるご助言を賜った東京大学 張紹良助教授，理化学研究所 姫野龍太郎博士に深く感謝する。なお，本研究の1部は，文部省科研費，基盤研究 B(1)，”精度保証付き数値計算法とその計算理工学への応用に関する総合的研究” (課題番号:10440031)，代表者:九州大学 中尾充宏教授，ならびに広島市立大学特定研究 (課題番号 9930) の援助を得た。ここに，記して謝意を表す。

参考文献

- [1] R. Fletcher, Conjugate Gradient Methods for Indefinite Systems, in Numerical Analysis Dundee 1975, ed. by G. Watson, Lecture Notes in Mathematics, 506(1976), Springer Verlag, pp.73-89.
- [2] R. FREUND, Conjugate gradient type for linear systems with complex symmetric coefficient matrices, SIAM J. Sci. Stat. Comput., 13(1992), pp.425-448.
- [3] S. FUJINO and S.-L. ZHANG, Analysis on Convergence Behavior of the CGS and Bi-CGSTAB Methods, in Computer Arithmetic and Enclosure Methods (IMACS), L. Atanassova ed., North-Holland, New York, (1992), pp.381-390.
- [4] M. H. Gutknecht, Variants of BiCGSTAB for Matrix with Complex Spectrum, SIAM J. Sci. Comput., 14(1993), pp.1020-1033.
- [5] M. H. Gutknecht, Lanczos-type Solvers for Nonsymmetric Linear Systems of Equations, Acta Numerica, 6(1997), pp.271-397.
- [6] M. R. Hestenes and E. Stiefel, Methods of Conjugate Gradients for Solving Linear Systems, J. Res. Nat. Bur. Standards, 49(1952), pp.409-435.
- [7] W. D. Joubert, Lanczos Methods for the Solution of Nonsymmetric Systems of Linear Equations, SIAM J. Matrix Anal. Appl., 13(1992), pp.926-943.
- [8] G. L. G. Sleipen, H. A. Van der Vorst and D. R. Fokkema, BiCGstab(l) and Other Hybrid Bi-CG Methods, Numerical Algorithms, 7(1994), pp.75-109.
- [9] P. Sonneveld, CGS, A Fast Lanczos-type Solver for Nonsymmetric Linear Systems, SIAM J. Sci. Stat. Comput., 10(1989), pp.36-52.
- [10] H. A. Van der Vorst, Bi-CGSTAB: A Fast and Smoothly Converging Variant of Bi-CG for the Solution of Nonsymmetric Linear Systems, SIAM J. Sci. Stat. Comput., 13(1992), pp.631-644.
- [11] R. Varga, Matrix Iterative Analysis, Prentice-Hall, (1962).
- [12] R. WEISS, Parameter-Free Iterative Linear Solvers, Mathematical Research 97, Akademie-Verlag, (1996).
- [13] S.-L. Zhang, GPBi-CG: Generalized Product-type Methods Based on Bi-CG for Solving Nonsymmetric Linear Systems, SIAM J. Sci. Comput., 18(1997), pp.537-551.
- [14] S.-L. ZHANG and S. FUJINO, Observations on Convergence Behaviors of the Bi-CG, CGS and Bi-CGSTAB from Separating Rounding Errors, Trans. of Japan SIAM, 3(1993), pp.135-146. (in Japanese)