数理解析研究所講究録
第 648 巻 1988 年 169-179

INDEFINITEな行列系に対するCGS法

慶應義塾大学理工学部　　野寺　隆

1.はじめに

近年，スーパーコンピュータの有効利用とともに，大規模連立１次方程式

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

の反復解法に新たな注目を集めつつある。特に，行列の前処理の技法の発達と有限の反復回数で収束する共役勾配法およびそれに類似した反復解法を併用することで，ほぼ大型行列計算の標準的なアルゴリズムが構築されつつある。また，非対称行列を係数とする連立１次方程式を効果的に解くための様々なアプローチが試みられている。

現在，利用されている反復法の多くは，多項式近似に基づくものが殆どである。即ち，ｋ回目の反復における近似解を多項式を用いて，

$$x_k = x_0 + Q_{k-1}(A)\ r_0 \tag{1.2}$$

とあらわすことができるのである。ただし，x_0 は反復法の初期値であり，$r_0(=b-Ax_0)$ は初期残差をあらわし，$Q_{k-1}(z)$ は，$k-1$次の実数係数の多項式である。ここで，残差r_k $(=b-Ax_k)$ は，次のようにあらわすことができる。

$$r_k = [I - A\ Q_{k-1}(A)]\ r_0 = P_k(A)\ r_0 \tag{1.3}$$

ただし，$P_k(z)$ は，$P_k(0)=1$を満たすｋ次の実数係数を持つ多項式である。ここで，(1.3) 式に対して適当なノルムをとることにすれば，

$$\| r_k \| \leq \| P_k(A) \| \| r_0 \| \tag{1.4}$$

が成立する。さらに，行列Aが$A=U\Lambda U^{-1}$のように対角化できるならば，

$$\begin{aligned} \| P_k(A) \| &= \| U\ P_k(\Lambda) U^{-1} \| \\ &\leq \| U \| \| U^{-1} \| \max_{\lambda \in \sigma(A)} | P_k(\lambda) | \end{aligned} \tag{1.5}$$

が成立するので，残差r_k のノルムは，次の式を満足することになる。ただし，$\sigma(A)$ は，行列Aの固有値の集合を示すものとする。

$$\| r_k \| \leq \| U \| \| U^{-1} \| \max_{\lambda \in \sigma(A)} | P_k(\lambda) | \| r_0 \| \tag{1.6}$$

すなわち，これは，行列Aの固有値が反復法の最良な多項式の形成に重要な役割を演

じることを意味している。

対称で正定値行列に対して，共役勾配法やチェビチェフ法は，残差多項式が望ましい最適性を有する多項式に基づく反復解法である。非対称行列系に対するこれらの反復解法の一般化は，最近，多くの研究者によって行われてきている。しかし，非対称行列系の反復解法の多くのものは，$(A+A^T)/2$ が正定値でなければならないとか，全ての固有値が複素平面の右半平面，または左半平面に存在することを必要とされ，かなり制約条件がきつい。しかし，半導体のデバイスシミュレーションや音響現象のモデル化から生ずるHelmholtz方程式の離散化から生ずる大型の疎行列は，非対称で定値行列とはならないものが多い。これらの問題を解くための１つのアプローチは，正規方程式:

$$A^T A x = A^T b \tag{1.7}$$

または，

$$\begin{cases} A A^T u = b \\ x = A^T u \end{cases} \tag{1.8}$$

を構成して，共役勾配法を利用することである。もう１つのアプローチはBCG 法に代表される単なる傾斜法を利用することである。BCG (Bi-Conjugate Gradient) 法は，Flecher(1985) によって対称で不定値(indefinite)な問題に利用するために提案された方法である。この算法は，共役勾配法のアルゴリズムと大変よく似ているのだが，共役勾配法が有するような最小化の性質を持っていない。よって，一般に，残差の単調減少性を有することもなく，アルゴリズムが反復途中でbreakdownすることもよくある。また，数値的な不安定性がないわけではない。しかし，そのような事実を踏まえた上でこれを利用するのであれば，この解法は非常に有効な反復解法の１つになるのである。

最近，注目を集めている反復解法の１つに，このBCG法を再構成しなおしたCGS(Conjugate Gradient Squared) 法がある。当然，CGS法は，BCG法を再構成しなおしただけなので，BCG法が持つ悪い面もそのまま受け継いでおり，残差の単調減少性などは当然有していない。しかし，この解法の特筆すべきは，その収束性にあり，BCG法の収束に必要な反復回数のほぼ50%～70%の反復回数で収束することにある。しかし，この解法が万能かと言えば，かならずしも確かではない。非常に簡単な例題でも

この解法がBCG法に劣ることもあるのである。様々な例題をもとにして，CGS法の良い面，悪い面について報告する。

2. BCG法と CGS法

先ず最初に BCG法の算法について述べることにする。

[BCG法の算法]

(1) 初期値 x_0 を選び，残差ベクトル

$$r_0 = b - A x_0$$

を計算し，$\overline{p}_0 = \overline{r}_0 = p_0 = r_0$ と置く。

(2) 次の手順を繰り返す。(k= 0, 1, 2, 3, …)

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k \tag{2.1a}$$

$$r_{k+1} = r_k - \alpha_k A p_k \tag{2.1b}$$

$$\overline{r}_{k+1} = \overline{r}_k - \alpha_k A^T \overline{p}_k \tag{2.1c}$$

$$p_{k+1} = p_k - \beta_k r_{k+1} \tag{2.1d}$$

$$\overline{p}_{k+1} = \overline{p}_k - \beta_k \overline{r}_{k+1} \tag{2.1e}$$

$$\alpha_k = (r_k , \overline{r}_k)/(A p_k , \overline{p}_k) \tag{2.1f}$$

$$\beta_k = (r_{k+1}, \overline{r}_{k+1})/(r_k , \overline{r}_k) \tag{2.1g}$$

この算法は，1975年にFletcher [1] によって，対称なindefiniteな線形方程式の解法として提案され，O'Leary [6]，Jacobs [2] ，Saad [8] によって議論されている。O'Leary は，ブロックBCG 法への拡張，また,Jacobs は複素行列演算を利用することによって，この算法の有効性を強調している。Saadは，この算法が非対称行列行列を3重対角化するためのランチョスの算法に基づくものであることを述べている。

この算法によって生成される残差ベクトルおよび方向ベクトルの系列 $\{r_k\}$ と $\{p_k\}$ は次の関係を満足する。

$$(r_k , \overline{r}_j) = 0, \qquad j \neq k \qquad \text{(双直交性)}$$

$$(A p_k , \overline{p}_j) = 0, \qquad j \neq k \qquad \text{(双共役性)}$$

この算法によって生成される近似解は，次のようになる。

$$x_k = x_0 + z_k,$$

$$z_k \in K_k = \text{span}\{r_0, Ar_0, A^2 r_0, \cdots A^{k-1} r_0\},$$

$$r_k = b - Az_k \perp \overline{K} = \text{span}\{r_0, A^T r_0, (A^T)^2 r_0, \cdots, (A^T)^{k-1} r_0\}.$$

もし，方程式の係数行列Aが対称正定値ならば，BCG 法は共役勾配法となり，共役勾配法の有する全ての性質が成立するのである。しかし，係数行列が非対称行列であると共役勾配法の有する全ての性質が，BCG 法において成立しないことになり，BCG 法は単なる quasi projection法となる。よって，共役勾配法の有するような最小化の性質をもたないことになり，その結果，誤差の単調減少性も保証されない。また，BCG 法は，良い近似解が得られる前に，$\alpha_k = 0$となり算法の続行を中断せねばならない状況に置かれることがしばしばある。しかし，BCG 法は係数行列に関して，GCR 法系の反復解法のように $(A + A^T)/2$ が正定値であるというような条件がない。

BCG 法の算法で注目すべき点は，$\overline{r}_k$ と$\overline{p}_k$ に関連する漸化式で計算されたこれらのベクトルの値は，単に，ステップサイズを決定する内積の計算のみに使用されていることである。

近年，BCG 法と数学的に同値な算法として CGS法が提案されている。CGS 法は，1984年，Sonneveld ［7］によって提案されたものであり，その算法は次のようになる。

［CGS 法の算法］

(1) 初期値$\overline{x}_0$ を選び，残差ベクトル

$$\overline{r}_0 = b - A\overline{x}_0$$

を計算し，$\overline{p}_0 = e_0 = r_0 = \overline{r}_0$ と置く。

(2) 次の計算を繰り返す。($k = 0, 1, 2, \cdots$)

$$\overline{x}_{k+1} = \overline{x}_k + \alpha_k (e_k + h_k) \tag{2.2a}$$

$$h_{k+1} = e_k + \alpha_k A\overline{p}_k \tag{2.2b}$$

$$\overline{r}_{k+1} = \overline{r}_k - \alpha_k A(e_k + h_{k+1}) \tag{2.2c}$$

$$e_{k+1} = r_{k+1} + \beta_k h_{k+1} \tag{2.2d}$$

$$\overline{p}_{k+1} = e_{k+1} + \beta_k (h_{k+1} + \beta_k \overline{p}_k) \tag{2.2e}$$

$$\alpha_k = (r_0, \overline{r}_k)/(r_0, A\overline{p}_k) \tag{2.2f}$$

$$\beta_k = (r_0, \overline{r}_{k+1})/(r_0, \overline{r}_k) \tag{2.2g}$$

CGS法の算法はBCG 法の算法から簡単な代数計算により導出可能であり，その詳細は名取［3］を参照されたい。

CGS法の重要な性質は，その収束性にあり，BCG 法と比較して，ほぼ半分程度の反復回数で収束する点にある。これは，各々の算法の残差多項式の性質を考えればあきらかなことである。即ち，BCG 法の残差 r_k を残差多項式 $R_k(A)$ を用いて表し，次の条件，$\| r_k \| = \| R_k(A) r_0 \| << b$ をほぼ満足すれば，(2.2c)式のCGS 法の残差のノルム $\| \overline{r_k} \| = \| R_k^2(A) r_0 \|$ は，より小さくなり，速い収束が期待できることになる。しかし，CGS 法は，単にBCG 法を代数的な計算によって変形して，各々のベクトルの成分の伝達をよくしただけなので，BCG 法が持つ悪い面もほぼ全て持ち合わせていることになる。

ここで，BCG 法と CGS法の計算量と算法を実現するために必要な記憶領域を考えてみると，表 2.1のようになる。この表からも分かるよに，BCG 法と CGS法の計算量は同じではない。また，記憶領域も同様である。

表2.1　算法に必要な計算量(1回の反復に必要な掛け算回数) と記憶領域

	算法			
	ORTHOMIN(q) 法	GCR(q)法	BCG法	CGS法
計算量	(3q+4)n, Av	((3/2)q+4)n, Av	7n, Av, $A^T v$	8n, 2×Av
記憶領域	(2q+4)n	(2q+4)n	6n	7n

この表から次のことが理解できる。 CGS法は，BCG 法と比較して反復回数を減少させる代わり，その代償として，n回の余分な掛け算とn個の成分を持つ1つ余分のベクトルを記憶するための領域を必要とする。即ち，CGS法が他の反復解法と比較して有効であるためには，計算量を減らすためにより速く収束しなければならない。

3.数値実験例

CGS法が非対称行列問題に対して有効な例は，野寺［4, 5］に詳しいので，参照されたい。今回は，CGS 法の収束性があまり良くない例を取り上げることにする。

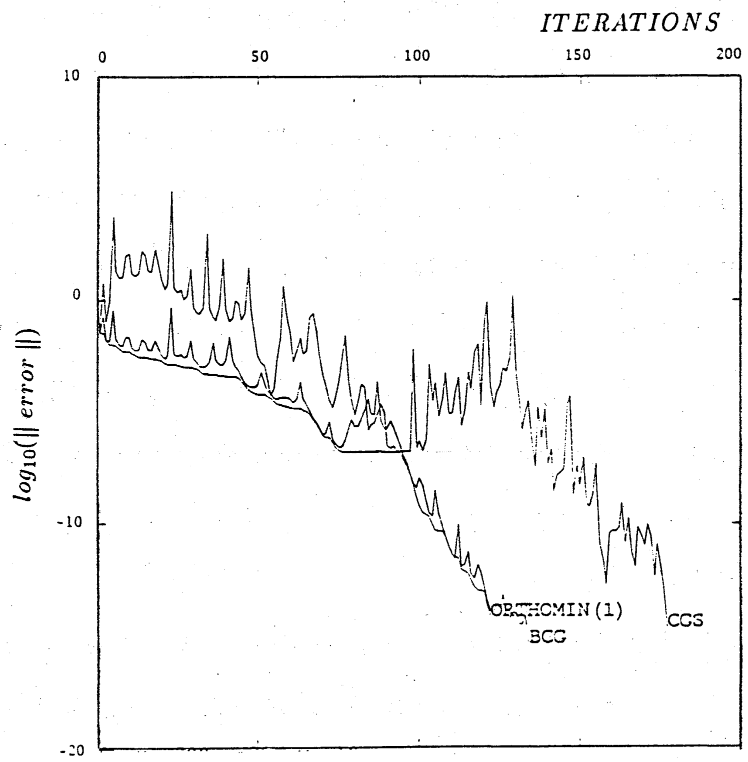

図 3.1　残差ノルム VS 反復回数，$\sigma=300$, h = 1/16, nonpreconditioning
ORTHOMIN(1)，BCG法，CGS法

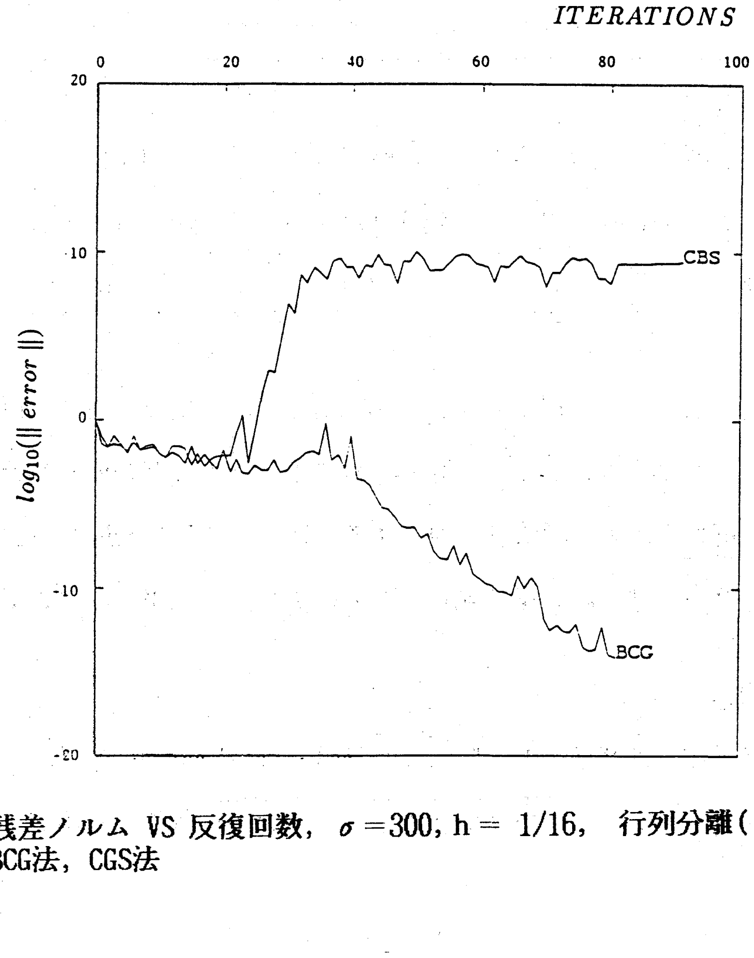

図 3.2　残差ノルム VS 反復回数，$\sigma=300$, h = 1/16,　行列分離($\omega=$ 1.0)
BCG法，CGS法

〔対称，Indefiniteな行列系の問題〕

Ω: [0, 1] × [0, 1] の正方形領域において，

$$u_{xx}+u_{yy}+\sigma u=0, \quad (x, y)\in\Omega \tag{3.1a}$$

$$u=g(x, y), \quad (x, y)\in\partial\Omega \tag{3.1b}$$

の方程式を考える。この方程式を中心差分を用いて離散化すると，次の方程式が得られる。

$$Ax=b, \tag{3.2}$$

ただし，係数行列Aは次のようなブロック3重対角行列となる。

$$A=\begin{bmatrix} D_1 & -I_k & & & 0 \\ -I_k & D_2 & -I_k & & \\ & \cdot & \cdot & \cdot & \\ & & \cdot & \cdot & \cdot \\ & & & \cdot & \cdot & -I_k \\ 0 & & & & -I_k & D_k \end{bmatrix}$$

ここで，I_k は，$k\times k$の単位行列であり，D_i は，$1\leq i\leq k$に対する，次のような$k\times k$の行列である。

$$D_i=\begin{bmatrix} 4-\sigma h^2 & -1 & & & & 0 \\ -1 & 4-\sigma h^2 & -1 & & & \\ & -1 & 4-\sigma h^2 & -1 & & \\ & & \cdot & \cdot & \cdot & \\ & & & \cdot & \cdot & \cdot \\ & & & \cdot & \cdot & \cdot \\ & & & -1 & 4-\sigma h^2 & -1 \\ 0 & & & & -1 & 4-\sigma h^2 \end{bmatrix}$$

ここでは，$4-\sigma h^2\neq 0$の場合を考えるものとする。

(3.1) 式に対するヤコビ法の反復行列B $(=I-D^{-1}A)$ の固有値は，p, q= 1, 2, 3, …, k に対して，

$$\mu_{pq}=\frac{2}{|4-\sigma h^2|}(\cos p\pi h+\cos q\pi h)$$

となる。よって，ヤコビ反復行列Bの全ての固有値は，実数の正数または負の数である。

故に，行列Aの固有値は，$B=I-D^{-1}A$と$D=(4-\sigma h^2)I$を利用して，次のように決定できる。即ち，p, q= 1, 2, 3, …, k に対して，

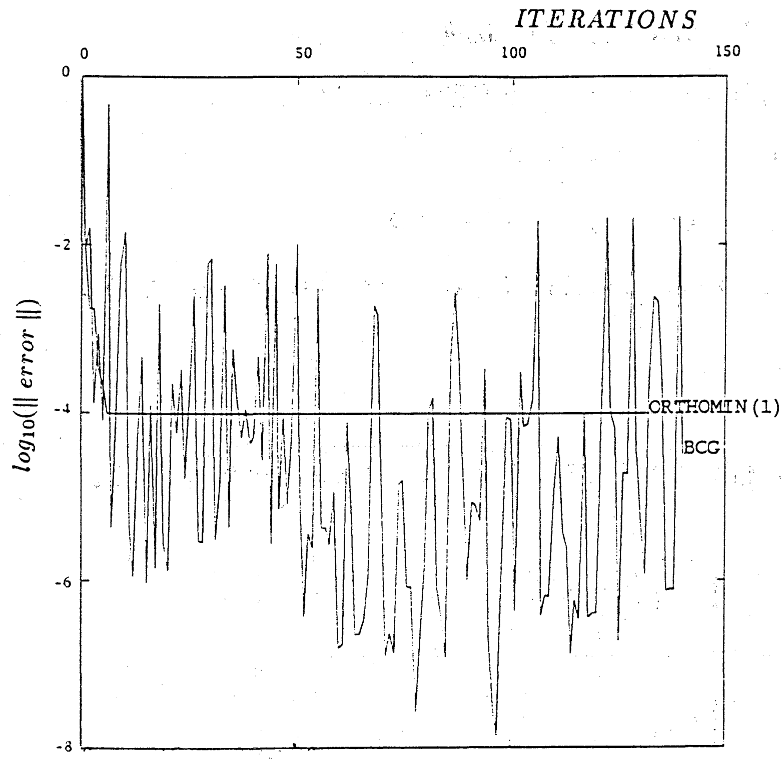

図 3.3 残差ノルム VS 反復回数, $\sigma=300$, h = 1/16, 不完全LU分解
ORTHOMIN(1)法, BCG 法

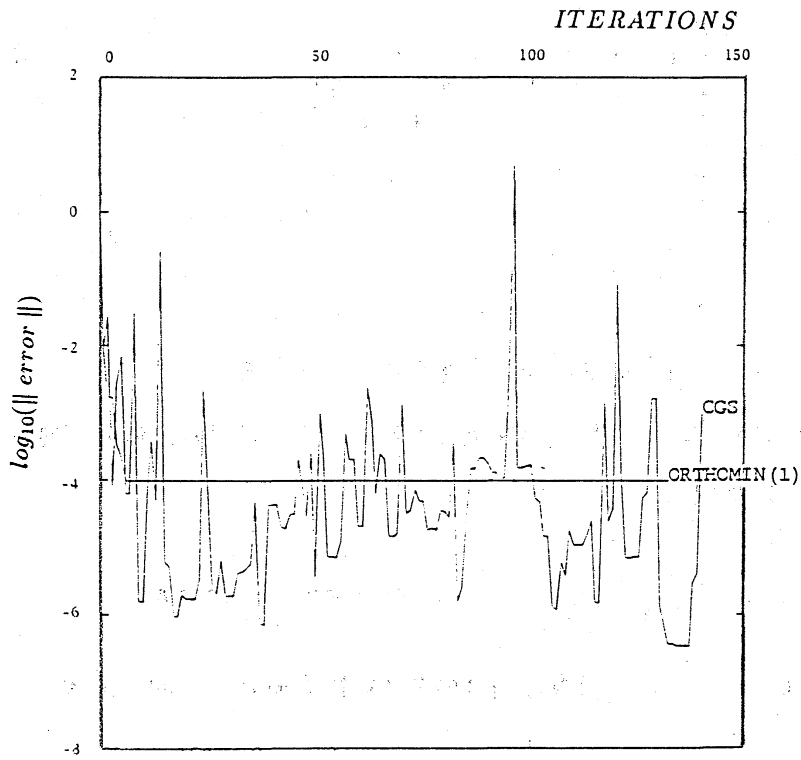

図 3.4 残差ノルム VS 反復回数, $\sigma=300$, h = 1/16, 不完全LU分解
ORTHOMIN(1)法, CGS 法

$$\lambda_{pq} = (4 - \sigma h^2)(1 - \mu_{pq})$$
$$= (4 - \sigma h^2) - \frac{2(4 - \sigma h^2)}{|4 - \sigma h^2|}(\cos p\pi h + \cos q\pi h)$$

となる。行列Aが対称行列なので，その条件数は最大，最小固有値を用いて次の式で与えられる。

$$\mathrm{cond}(A) = \frac{\max\limits_{p,q} |\lambda_{pq}|}{\min\limits_{p,q} |\lambda_{pq}|}$$

ここで，適当なσとhについて条件数を計算すると表3.1 のようになる。

表 3.1　行列Aの条件数

σ	h		
	1/8	1/16	1/32
0	25.27	103.09	414.35
30	43.99	193.56	792.31
90	324.59	316.43	1,004.28
120	106.64	362.71	1,068.23
150	42.63	191.68	509.14
300	113.39	22,345.96	667.74
600	5.40	834.09	780/09

ここで，(3.2) 式の右辺のベクトルbを，

$$\overline{u}(x, y) = 3e^{x+y}(x - x^2)(y - y^2)$$

が，厳密解となるように決定した。特に，BCG法およびCGS法があまり良い収束性をしない例について述べることにする。即ち，上の表 3.1において，σ = 300, h =1/16の場合の数値例について述べる。図 3.1は，行列の前処理を行わない場合の各算法の残差ノルムの収束性を示したものである。この場合，CGS法はBCG法やORTHOMIN(1)法よりも収束性が劣っている(これは，野寺 [4, 5] に示された例とは全く逆の現象が起こっている)。BCG 法とORTHOMIN(1) 法は，その残差ノルムの収束状況がほぼ同一と考えられるが，各々の計算量を考えると，BCG 法は ORTHOMIN(1)法のほぼ1.7 倍の計算量を必要とするから ORTHOMIN(1)法が優れていることが分かる。次に，行列の前処理を行った場合には，どのような変化が起こるかを見ることにする。図3.2 は行

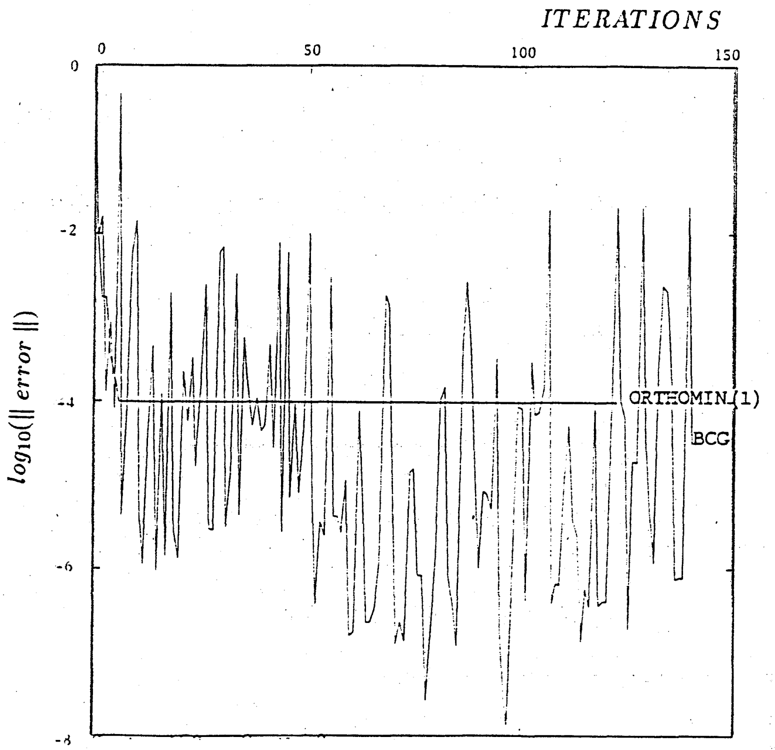

図 3.5　残差ノルム VS 反復回数，$\sigma=300$, h = 1/16，　修正不完全LU分解
ORTHOMIN(1)法，BCG法

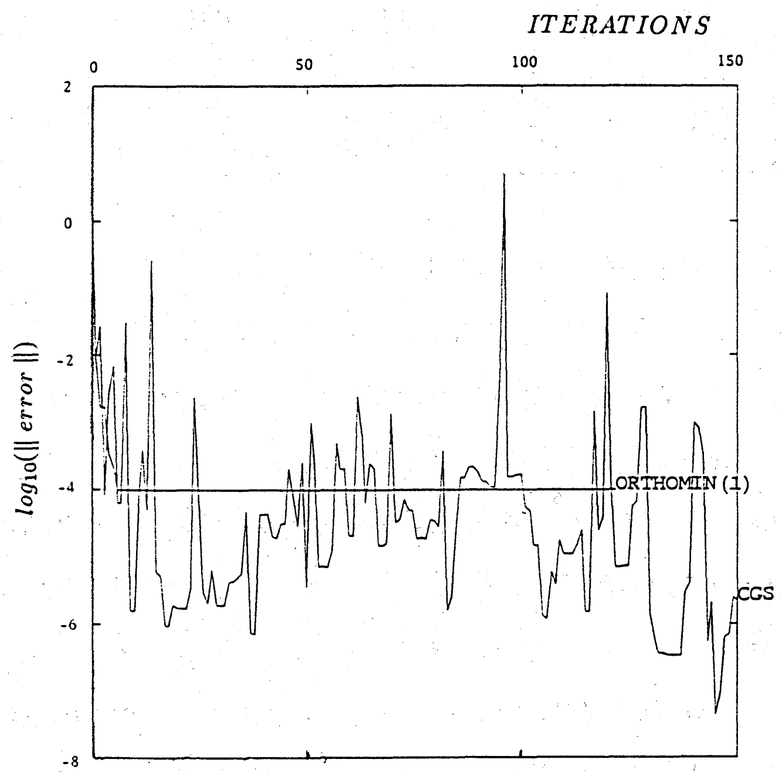

図 3.6　残差ノルム VS 反復回数，$\sigma=300$, h = 1/16，　修正不完全LU分解
ORTHOMIN(1)法，CGS 法

列の前処理に行列分離（ $\omega=1$ ）を用いた場合の残差ノルムの収束性を示したものである。この場合，BCG法の残差ノルムは収束するのであるが，CGS法の残差ノルムは発散してしまう。図3.3 および図3.4 は，不完全LU(ILU)分解法を併用した場合の残差ノルムの収束性を示したものである。また，図3.5 および図3.6 は修正不完全LU(MILU)分解法を併用した場合である。この図から明らかなように，全ての算法が収束しない。特に，BCG 法とCGS 法の残差のノルムは極端に振動している。また，ORTHOMIN(1)法の残差ノルムは，停滞して進まない。

4.おわりに

対称なINDEFINITEな係数行列を持つ連立１次方程式の反復解法としてBCG 系の反復法を考えた場合に，その収束は必ずしも良くないことを示した。特に，近年，注目されているCGS 法の算法に意外な落とし穴がある。しかし，ここで取り上げた例は極端なものなので，これらの事実を充分ふまえて算法を利用するならば，CGS 法は充分実用に耐えうるものである。

[参考文献]

[１] R.Flecter, Conjugate gradient methods for indefinite systems, Lecture Notes in Math. No.506, pp.73-89(1986).

[２] D.A.H.Jacobs, The exploitation of sparsity by iterative methods, in "Sparse Matrices and their Uses", Academic Press, pp.191-222(1981).

[３] 名取，BCG法と CGS法，京都大学数理解析研究所講究録 No.613, pp.135-145 (1987).

[４] T.Nodera, New variant of BCG method for solving nonsymmetric systems, Advances in Computer Methods for Partial Differential Equations・VI, (R.Vichevetsky and R.S.Steplmnan eds.), pp.130-135(1987).

[５] T.Nodera, The use of a CGS method for the convective diffusion problem, CATC-87, to appear.

[６] D.P.O'Leary, The block conjugate gradient algorithm and related methods, Linear Algebra and its Applications Vol.29, pp.293-322(1980).

[７] P.Sonneveld, CGS, a fast Lanczos type solver for nonsymmetric linear systems, Rep.84-16, Delft University, (1984).

[８] Y.Saad, A Lanczos biorthogonalization algorithm and oblique projection methods for solving large unsymmetric systems, SIAM J. of Numer. Anal. Vol.19, pp.485-506(1982).