交代2項漸化式と准残差を用いた BiCGStar variant 法の性能評価

岩里 洸介[1]　村上 啓一[2]　藤野 清次[3]

概要：反復法を用いて連立一次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ を解くことを考える．この問題を解くための解法として BiCGStab 法や GPBiCG 法などの積型反復法が広く用いられている．一方，使用する漸化式やパラメータの決定法の違いにより GPBiCG 法の改良版が提案されている．BiCGSafe 法はパラメータの決定に准残差ベクトルを用いた解法である．阿部版 GPBiCG 法は安定化多項式を導入し，Rutishauser の交代 2 項漸化式を用いた解法である．本論文では，交代 2 項漸化式と准残差の戦略を適用した BiCGStar(BiCG STabilized Associate Residual) variant 法を提案する．また，数値実験を通して BiCGStar variant 法が収束性と計算時間の面で優れていることを明らかにする．

キーワード：反復法，GPBiCG 法，BiCGStar variant 法，交代 2 項漸化式，准残差ベクトル

Evaluation of variant of BiCGStar method with coupled two-term recurrence and associate residual

Abstract: We consider to iterative methods for solving a linear system of equations $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$. Among many iterative methods, product-type of iterative methods e.g., BiCGStab and GPBiCG are often used for the purpose of solution for realistic problems. On the other hand, improved variants of GPBiCG were proposed. These variants differ the using polynomial and determination of the parameters. BiCGSafe applied associate residual for determination of the parameters. Abe's GPBiCG introduced stabilized polynomial constructed by two-term recurrence of Rutishauser. In this paper, we propose the variant of BiCGStar(BiCG STabilized Associate Residual) method based on two strategies, improvement stabilization by applying coupled two-term recurrence and using associate residual. Through numerical experiments, we make clear that the variant of BiCGStar method outperforms other methods from the view points of convergence and computational times.

Keywords: Iterative method, GPBiCG, Variant of BiCGStar, Coupled two-term recurrence, Associate residual vector

1. はじめに

連立一次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ を解くことを考える．ただし，係数行列 A は大きさ $N \times N$ の実非対称行列，$\boldsymbol{x}$ と $\boldsymbol{b}$ は次数 N の解ベクトルと右辺ベクトルとする．非対称行列を係数に持つ連立一次方程式に対する解法として，積型反復法がある．積型反復法では，残差 $\boldsymbol{r}_k := \boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_k$ が $R_k(0) = 1$ を示すような k 次の Lanczos 多項式 $R_k(A)$ と，$H_k(0) = 1$ を示すような k 次の安定化 (加速) 多項式 $H_k(A)$ により，$\boldsymbol{r}_k = H_k(A)R_k(A)\boldsymbol{r}_0$ と表される．広く用いられている積型反復法として BiCGStab(Bi-Conjugate Gradient Stabilized) 法や GPBiCG(Generalized Product-type BiCG) 法など挙げられる．本稿では，GPBiCG 法に交代 2 項漸化式と准残差の戦略を適用した BiCGStar(BiCG STabilized Associate Residual) variant 法を提案する．また，数値実験を通して BiCGStar variant 法が収束性と計算時間の面で優れていることを明らかにする．

[1] 九州大学工学部電気情報工学科
Department of Electrical Engineering and Computer Science, School of Engineering, Kyushu University
[2] 九州大学大学院システム情報学府情報学専攻
Graduate School of Information Science and Electrical Engineering, Kyushu University
[3] 九州大学情報基盤研究開発センター
Research Institute for Information Technology, Kyushu University

2. GPBiCG 法とその変形版の概要

2.1 GPBiCG 法

この節では GPBiCG 法について述べる [8]．Lanczos 多項式 $R_k(\lambda)$ と補助多項式 $P_k(\lambda)$ は次の交代漸化式

$$R_0(\lambda) = 1, \quad P_0(\lambda) = 1, \tag{1}$$
$$R_k(\lambda) = R_{k-1}(\lambda) - \alpha_{k-1}\lambda P_{k-1}(\lambda), \tag{2}$$
$$P_k(\lambda) = R_k(\lambda) + \beta_{k-1}P_{k-1}(\lambda), \tag{3}$$
$$k = 1, 2, \ldots.$$

を満たす．ここで λ は行列 A の固有値である．加速多項式は互いに独立する適当な 2 組のパラメータ ζ_k と η_k を導入し, 以下の 3 項漸化式を満たす．

$$H_0(\lambda) = 1, \tag{4}$$
$$H_1(\lambda) = (1 - \zeta_0\lambda)H_0(\lambda), \tag{5}$$
$$H_{k+1}(\lambda) = (1 + \eta_k - \zeta_k\lambda)H_k(\lambda) - \eta_k H_{k-1}(\lambda), \tag{6}$$
$$k = 1, 2, \ldots.$$

一方，式 (4)-(6) によって生成された多項式列 $H_{k+1}(\lambda)$ はすべて $H_{k+1}(0) = 1$ を満足する．したがって，

$$G_k(\lambda) = -(H_{k+1}(\lambda) - H_k(\lambda))/\lambda \tag{7}$$

を満足する多項式列 $\{G_k(\lambda)\}$ が存在する．式 (7) を用いて，式 (4)-(6) は以下の交代漸化式で表わすことができる．

$$H_0(\lambda) = 1,\ G_0(\lambda) = \zeta_0, \tag{8}$$
$$H_k(\lambda) = H_{k-1}(\lambda) - \lambda G_{k-1}(\lambda), \tag{9}$$
$$G_k(\lambda) = \zeta_k H_k(\lambda) + \eta_k G_{k-1}(\lambda), \tag{10}$$
$$k = 1, 2, \ldots.$$

また，上記の漸化式中のパラメータ ζ_k, η_k の値は残差ベクトル $\boldsymbol{r}_{k+1}$ の 2 ノルムが局所的に最小になるように決定される．

以下に GPBiCG 法の算法を示す．ここで，ϵ は収束判定に用いる微小な値である．初期シャドウ残差ベクトルを $\boldsymbol{r}_0^*$ とする．

Algorithm 1: GPBiCG 法の算法

1. $\boldsymbol{x}_0$ is an initial guess, $\boldsymbol{r}_0 = \boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_0$,
2. Choose $\boldsymbol{r}_0^*$ such that $(\boldsymbol{r}_0^*, \boldsymbol{r}_0) \neq 0$,
3. for $k = 0, 1, \cdots$ do, (11)
4. $\quad \boldsymbol{p}_k = \boldsymbol{r}_k + \beta_{k-1}(\boldsymbol{p}_{k-1} - \boldsymbol{u}_{k-1})$,
5. $\quad \alpha_k = \dfrac{(\boldsymbol{r}_0^*, \boldsymbol{r}_k)}{(\boldsymbol{r}_0^*, A\boldsymbol{p}_k)}$,
6. $\quad \boldsymbol{y}_k = \boldsymbol{t}_{k-1} - \boldsymbol{r}_k - \alpha_k\boldsymbol{w}_{k-1} + \alpha_k A\boldsymbol{p}_k$,
7. $\quad \boldsymbol{t}_k = \boldsymbol{r}_k - \alpha_k A\boldsymbol{p}_k$,
8. $\quad \zeta_k = \dfrac{(\boldsymbol{y}_k, \boldsymbol{y}_k)(A\boldsymbol{t}_k, \boldsymbol{t}_k) - (\boldsymbol{y}_k, \boldsymbol{t}_k)(A\boldsymbol{t}_k, \boldsymbol{y}_k)}{(A\boldsymbol{t}_k, A\boldsymbol{t}_k)(\boldsymbol{y}_k, \boldsymbol{y}_k) - (\boldsymbol{y}_k, A\boldsymbol{t}_k)(A\boldsymbol{t}_k, \boldsymbol{y}_k)}$,
9. $\quad \eta_k = \dfrac{(A\boldsymbol{t}_k, A\boldsymbol{t}_k)(\boldsymbol{y}_k, \boldsymbol{t}_k) - (\boldsymbol{y}_k, A\boldsymbol{t}_k)(A\boldsymbol{t}_k, \boldsymbol{t}_k)}{(A\boldsymbol{t}_k, A\boldsymbol{t}_k)(\boldsymbol{y}_k, \boldsymbol{y}_k) - (\boldsymbol{y}_k, A\boldsymbol{t}_k)(A\boldsymbol{t}_k, \boldsymbol{y}_k)}$,
10. $\quad$ (if $k = 0$, then $\zeta_k = \dfrac{(\boldsymbol{c}_k, \boldsymbol{a}_k)}{(\boldsymbol{c}_k, \boldsymbol{c}_k)},\ \eta_k = 0$),
11. $\quad \boldsymbol{u}_k = \zeta_k A\boldsymbol{p}_k + \eta_k(\boldsymbol{t}_{k-1} - \boldsymbol{r}_k + \beta_{k-1}\boldsymbol{u}_{k-1})$,
12. $\quad \boldsymbol{z}_k = \zeta_k\boldsymbol{r}_k + \eta_k\boldsymbol{z}_{k-1} - \alpha_k\boldsymbol{u}_k$,
13. $\quad \boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{x}_k + \alpha_k\boldsymbol{p}_k + \boldsymbol{z}_k$,
14. $\quad \boldsymbol{r}_{k+1} = \boldsymbol{t}_k - \eta_k\boldsymbol{y}_k - \zeta_k A\boldsymbol{t}_k$,
15. if $||\boldsymbol{r}_{k+1}||/||\boldsymbol{r}_0|| \leq \varepsilon$ stop,
16. $\quad \beta_k = \dfrac{\alpha_k}{\zeta_k} \cdot \dfrac{(\boldsymbol{r}_0^*, \boldsymbol{r}_{k+1})}{(\boldsymbol{r}_0^*, \boldsymbol{r}_k)}$,
17. $\quad \boldsymbol{w}_k = A\boldsymbol{t}_k + \beta_k A\boldsymbol{p}_k$,
18. end do.

2.2 BiCGSafe 法

次に BiCGSafe 法について述べる．式 (1)-(3) と式 (8)-(10) を導入することにより, 次の漸化式が得られる．

$$H_{k+1}P_{k+1} = H_{k+1}R_{k+1} + \beta_k(H_kP_k - \lambda G_kP_k), \tag{12}$$
$$\lambda G_kP_k = \lambda\zeta_k H_kP_k + \eta_k(\lambda G_{k-1}R_k + \beta_{k-1}\lambda G_{k-1}P_{k-1}), \tag{13}$$
$$G_kR_{k+1} = (\zeta_k H_k + \eta_k G_{k-1})R_k - \alpha_k\lambda G_kP_k, \tag{14}$$
$$k = 1, 2, \ldots.$$

ここで，次の補助ベクトルを置く．

$$\boldsymbol{s}_k := AG_k(A)P_k(A), \tag{15}$$
$$\boldsymbol{z}_k := G_k(A)R_{k+1}(A). \tag{16}$$

更に, 新たな補助ベクトル $\boldsymbol{z}'_{k+1}$ を次のように置く．

$$\boldsymbol{z}'_{k+1} = A\boldsymbol{z}_k. \tag{17}$$

また，積型多項式 $H_{k+1}R_{k+1}$ は次の漸化式を導く．

$$\begin{aligned} H_{k+1}R_{k+1} &= H_{k+1}R_k - \alpha_k\lambda H_{k+1}P_k \\ &= H_kR_k - \alpha_k\lambda H_kP_k - \lambda(\zeta_k H_kR_k \\ &\quad + \eta_k G_{k-1}R_k - \alpha_k\lambda G_kP_k). \end{aligned} \tag{18}$$

ベクトル $\boldsymbol{z}_k$ の定義を $\boldsymbol{z}_k = \zeta_k\boldsymbol{r}_k + \eta_k\boldsymbol{z}_{k-1} - \alpha_k\boldsymbol{s}_k$ と利用すると残差ベクトル $\boldsymbol{r}_{k+1}$ のための漸化式が次のように構成される．

$$\begin{aligned} \boldsymbol{r}_{k+1} &= \boldsymbol{r}_k - \alpha_k A\boldsymbol{p}_k - A\boldsymbol{z}_k \\ &= \boldsymbol{r}_k - \alpha_k A\boldsymbol{p}_k - \boldsymbol{z}'_{k+1}. \end{aligned} \tag{19}$$

式 (17) によって定義されたベクトル $\boldsymbol{z}'_{k+1}$ は次の漸化式から得られる．

$$\begin{aligned} \lambda G_kR_{k+1} &= \lambda G_kR_k - \alpha_k\lambda(\lambda G_kP_k) \\ &= \zeta_k\lambda H_kR_k + \eta_k\lambda G_{k-1}R_k \\ &\quad - \alpha_k\lambda(\lambda G_kP_k), \end{aligned} \tag{20}$$
$$\boldsymbol{z}'_{k+1} = \zeta_k A\boldsymbol{r}_k + \eta_k\boldsymbol{z}'_n - \alpha_k A\boldsymbol{s}_k. \tag{21}$$

以上の操作により残差ベクトル $\boldsymbol{r}_{k+1}$ は次のように導出で

きる．

$$\boldsymbol{p}_k = \boldsymbol{r}_k + \beta_{k-1}(\boldsymbol{p}_{k-1} - \boldsymbol{s}_{k-1}), \tag{22}$$
$$\boldsymbol{s}_k = \zeta_k A\boldsymbol{p}_k + \eta_k(\boldsymbol{z}'_k + \beta_{k-1}\boldsymbol{s}_{k-1}), \tag{23}$$
$$\boldsymbol{z}_k = \zeta_k \boldsymbol{r}_k + \eta_k \boldsymbol{z}_{k-1} - \alpha_k \boldsymbol{s}_k, \tag{24}$$
$$\boldsymbol{z}'_{k+1} = \zeta_k A\boldsymbol{r}_k + \eta_k \boldsymbol{z}'_k - \alpha_k A\boldsymbol{s}_k, \tag{25}$$
$$\boldsymbol{r}_{k+1} = \boldsymbol{r}_k - \alpha_k A\boldsymbol{p}_k - \boldsymbol{z}'_{k+1}. \tag{26}$$
$$\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{x}_k + \alpha_k \boldsymbol{p}_k + \boldsymbol{z}_k. \tag{27}$$

BiCGSafe 法では，式 (26) からわかるように残差ベクトル $\boldsymbol{r}_{k+1}$ にパラメータ ζ_k，η_k が含まれていない．ここで准残差ベクトル $\boldsymbol{a\_r}_k$ を次のように導入する，

$$\boldsymbol{a\_r}_k := H_{k+1}R_k\boldsymbol{r}_0. \tag{28}$$

ここで漸化式 $H_{k+1}R_k$ は次のように展開できる．

$$H_{k+1}R_k = H_kR_k - \zeta_k\lambda H_kR_k - \eta_k\lambda G_{k-1}R_k. \tag{29}$$

したがって，准残差ベクトル $\boldsymbol{a\_r}_k$ は次のように表される．

$$\boldsymbol{a\_r}_k = \boldsymbol{r}_k - \zeta_k A\boldsymbol{r}_k - \eta_k \boldsymbol{y}_k. \tag{30}$$

BiCGSafe 法ではパラメータ ζ_k，η_k をこの准残差ベクトル $\boldsymbol{a\_r}_k$ の 2 ノルムの局所的な最小化により決定する．式 (30) の漸化式は BiCGSafe 法のアルゴリズム中では計算されてない．式 (30) の漸化式はパラメータ ζ_k，η_k の計算にのみ利用される．

2.3 阿部版 GPBiCG 法

本節では Rutishauser の交代 2 項漸化式を導入した阿部版 GPBiCG 法を説明する．$R_k(\lambda)$ と $P_k(\lambda)$ は次の交代漸化式

$$R_0(\lambda) = 1, \quad P_0(\lambda) = 1, \tag{31}$$
$$R_k(\lambda) = R_{k-1}(\lambda) - \alpha_{k-1}\lambda P_{k-1}(\lambda), \tag{32}$$
$$P_k(\lambda) = R_k(\lambda) - \beta_{k-1}P_{k-1}(\lambda), \quad k = 1, 2, \ldots. \tag{33}$$

を満たす．ここで GPBiCG 法で用いた交代漸化式とはパラメータ β の符号が逆になっていることに注意する．多項式 $\tilde{G}_k(\lambda)$ を次のように定義する．

$$\tilde{G}_k(\lambda) = \lambda G_k = -(H_{k+1}(\lambda) - H_k(\lambda)). \tag{34}$$

多項式 $\tilde{G}_k(\lambda)$ を用いて，Rutishauser の交代 2 項漸化式は次のように表される．

$$\tilde{G}_0(\lambda) = 0, \quad H_0(\lambda) = 1, \tag{35}$$
$$\tilde{G}_k(\lambda) = \zeta_{k-1}\lambda H_{k-1}(\lambda) - \eta_{k-1}\lambda\tilde{G}_{k-1}(\lambda), \tag{36}$$
$$H_k(\lambda) = H_{k-1}(\lambda) - \tilde{G}_k(\lambda), \ k = 1, 2, \ldots. \tag{37}$$

ここで，多項式 $H_k(\lambda)$，$\tilde{G}_k(\lambda)$ を安定化多項式と呼ぶ．また，上記の漸化式中のパラメータ ζ_k, η_k の値は残差ベクトル $\boldsymbol{r}_{k+1}$ の 2 ノルムが局所的に最小になるように決定される．

式 (31)-(33) において, 漸化式の係数 α_k と β_k は直交条件 $H_kR_{k+1}\boldsymbol{r}_0 \perp \boldsymbol{r}_0^*$， $AH_kP_{k+1}\boldsymbol{r}_0 \perp \boldsymbol{r}_0^*$ を満たすように計算される．ここで補助ベクトルを

$$\boldsymbol{p}_k := H_kP_k\boldsymbol{r}_0, \tag{38}$$
$$\boldsymbol{t}_k := H_kP_{k+1}\boldsymbol{r}_0 \tag{39}$$

と置く．$H_kR_{k+1}\boldsymbol{r}_0$ と $AH_kP_{k+1}\boldsymbol{r}_0$ は次のように表される．

$$H_kR_{k+1}\boldsymbol{r}_0 = \boldsymbol{r}_k - \alpha_k A\boldsymbol{p}_k \perp \boldsymbol{r}_0^*, \tag{40}$$
$$AH_kP_{k+1}\boldsymbol{r}_0 = A\boldsymbol{t}_k - \beta_k A\boldsymbol{p}_k \perp \boldsymbol{r}_0^*. \tag{41}$$

漸化式の係数の α_k と β_k は直交条件 $(H_kR_{k+1}\boldsymbol{r}_0,\ \boldsymbol{r}_0^*) = 0$ と $(AH_kP_{k+1}\boldsymbol{r}_0,\ \boldsymbol{r}_0^*) = 0$ から次のように得られる．

$$\alpha_k = \frac{(\boldsymbol{r}_0^*,\ \boldsymbol{r}_k)}{(\boldsymbol{r}_0^*,\ A\boldsymbol{p}_k)}, \tag{42}$$
$$\beta_k = \frac{(\boldsymbol{r}_0^*,\ A\boldsymbol{t}_k)}{(\boldsymbol{r}_0^*,\ A\boldsymbol{p}_k)} = -\frac{\alpha_k(\boldsymbol{r}_0^*,\ \boldsymbol{r}_{k+1})}{\zeta_k(\boldsymbol{r}_0^*,\ \boldsymbol{r}_k)}. \tag{43}$$

3. BiCGStar variant 法

3.1 BiCGStar variant 法の導出

本節では BiCGStar variant 法を導出する．$R_k(\lambda)$ と $P_k(\lambda)$ は式 (31)-(33) の交代 2 項漸化式を構成する．文献 [1] で提案された GPBiCG 法の variant4 と同様に, Rutishausr の交代漸化式 [5]

$$\tilde{G}_0(\lambda) = 0, \quad H_0(\lambda) = 1, \tag{44}$$
$$\tilde{G}_k(\lambda) = \zeta_{k-1}\lambda H_{k-1}(\lambda) - \eta_{k-1}\lambda\tilde{G}_{k-1}(\lambda), \tag{45}$$
$$H_k(\lambda) = H_{k-1}(\lambda) - \tilde{G}_k(\lambda), \quad k = 1, 2, \ldots. \tag{46}$$

を導入する．ここで, ζ_k, η_k は任意のパラメータである．また,$\tilde{G}_k(\lambda)$ は,

$$\tilde{G}_k(\lambda) = \lambda G_k = -H_{k+1}(\lambda) + H_k(\lambda) \tag{47}$$

と表される．

以下では，多項式 $R_k(\lambda)$，$P_k(\lambda)$，$H_k(\lambda)$，$\tilde{G}_k(\lambda)$ を R_k，P_k，H_k，$\tilde{G}_k$ と略記する．多項式の更新のために, H_kR_k，$\tilde{G}_kR_k$，H_kP_k，$\tilde{G}_kP_k$ から $H_{k+1}R_{k+1}$，$\tilde{G}_{k+1}R_{k+1}$，$H_{k+1}P_{k+1}$，$\tilde{G}_{k+1}P_{k+1}$ を求める．ここで，GPBiCG 法とその変形版では $\boldsymbol{r}_{k+1} = H_{k+1}(A)R_{k+1}(A)\boldsymbol{r}_0$ の多項式の展開において $H_{k+1}(A)$ を先に展開したが, BiCGStar variant 法では BiCGSafe 法と同様に $R_{k+1}(A)$ を先に展開する．

$$H_{k+1}R_{k+1} = H_{k+1}R_k - \alpha_k\lambda H_{k+1}P_k, \tag{48}$$
$$H_{k+1}R_k = H_kR_k - \tilde{G}_{k+1}R_k, \tag{49}$$
$$\tilde{G}_{k+1}R_{k+1} = \zeta_k\lambda H_kR_k + \eta_k\tilde{G}_kR_k, \tag{50}$$
$$H_{k+1}P_k = H_kP_k - \tilde{G}_{k+1}P_k, \tag{51}$$
$$\tilde{G}_{k+1}P_k = \zeta_k\lambda H_kP_k + \eta_k\tilde{G}_kP_k. \tag{52}$$

(49) 式-(52) 式から $H_{k+1}R_{k+1}$ が求まる． $\tilde{G}_{k+1}R_{k+1}$, $H_{k+1}P_{k+1}$, $\tilde{G}_{k+1}P_{k+1}$ は,

$$\tilde{G}_{k+1}R_{k+1} = \tilde{G}_{k+1}R_k - \alpha_k\lambda\tilde{G}_{k+1}P_k, \quad (53)$$
$$H_{k+1}P_{k+1} = \tilde{H}_{k+1}R_{k+1} - \beta_k\tilde{H}_{k+1}P_k, \quad (54)$$
$$\tilde{G}_{k+1}P_{k+1} = \tilde{G}_{k+1}R_{k+1} - \tilde{G}_{k+1}P_k. \quad (55)$$

と各々求まる．ここで補助ベクトルを

$$\boldsymbol{p}_k := H_kP_k\boldsymbol{r}_0,\quad \boldsymbol{v}_k := \tilde{G}_{k+1}R_k\boldsymbol{r}_0,$$
$$\boldsymbol{q}_k := \tilde{G}_kR_k\boldsymbol{r}_0,\quad \boldsymbol{w}_k := \tilde{G}_{k+1}P_k\boldsymbol{r}_0,$$
$$\boldsymbol{u}_k := \tilde{G}_kP_k\boldsymbol{r}_0,\quad \boldsymbol{y}_k := H_{k+1}P_k\boldsymbol{r}_0$$

と導入する．これらの補助ベクトルを (48) 式-(55) 式に代入すると

$$\boldsymbol{v}_k = \zeta_k\lambda\boldsymbol{r}_k + \eta_k\boldsymbol{q}_k, \quad (56)$$
$$\boldsymbol{p}_{k+1} = \boldsymbol{r}_{k+1} - \beta_k\boldsymbol{y}_k, \quad (57)$$
$$\boldsymbol{a\_r}_k = \boldsymbol{r}_k - \boldsymbol{v}_k,\ \boldsymbol{w}_k = \zeta_k\lambda\boldsymbol{p}_k + \eta_k\boldsymbol{u}_k,$$
$$\boldsymbol{y}_k = \boldsymbol{p}_k - \boldsymbol{w}_k,\ \boldsymbol{r}_{k+1} = \boldsymbol{a\_r}_k - \alpha_k\lambda\boldsymbol{y}_k,$$
$$\boldsymbol{q}_{k+1} = \boldsymbol{v}_k - \alpha_k\lambda\boldsymbol{w}_k,\ \boldsymbol{u}_{k+1} = \boldsymbol{q}_{k+1} - \beta_k\boldsymbol{w}_k$$

と表される．

安定化多項式のパラメータ ζ_k，η_k について考える．GP-BiCG 法では ζ_k，η_k を残差ベクトル $\boldsymbol{r}_{k+1}$ の 2 ノルムの最小化により決定したが，本解法では第 2.3 節で述べた BiCGSafe 法と同様に，パラメータ ζ_k，η_k を准残差ベクトル $\boldsymbol{a\_r}_k$ の 2 ノルムが最小化されるように決定される．

$$||\boldsymbol{a\_r}_k||_2 = ||\boldsymbol{r}_k - \zeta_kA\boldsymbol{r}_k - \eta_k\boldsymbol{q}_k||_2 \quad (58)$$

を最小化する ζ_k，η_k を考える．関数 ϕ を

$$\phi = \frac{1}{2}||\boldsymbol{r}_k - \zeta_kA\boldsymbol{r}_k - \eta_k\boldsymbol{q}_k||_2 \quad (59)$$

と置く．$||\boldsymbol{a\_r}_k||_2$ が最小のとき $\nabla\phi = 0$ が成立する．ここで，

$$\nabla = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial\zeta} \\ \frac{\partial}{\partial\eta} \end{bmatrix} \quad (60)$$

である．したがって，

$$\nabla\phi = \begin{bmatrix}A\boldsymbol{r}_k,\ \boldsymbol{q}_k\end{bmatrix}^T \left(\boldsymbol{r}_k - \begin{bmatrix}A\boldsymbol{r}_k,\ \boldsymbol{q}_k\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\zeta_k \\ \eta_k\end{bmatrix}\right) \quad (61)$$

となる．よって (61) 式を解くことで ζ_k，η_k が与えられる．これを解くと，

$$\begin{bmatrix}\zeta_k \\ \eta_k\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}(A\boldsymbol{r}_k,\ A\boldsymbol{r}_k) & (A\boldsymbol{r}_k,\ \boldsymbol{q}_k) \\ (\boldsymbol{q}_k,\ A\boldsymbol{r}_k) & (\boldsymbol{q}_k,\ \boldsymbol{q}_k)\end{bmatrix}^{-1}\begin{bmatrix}(A\boldsymbol{r}_k,\ \boldsymbol{r}_k) \\ (\boldsymbol{q}_k,\ \boldsymbol{r}_k)\end{bmatrix} \quad (62)$$

となる．ここで，

$$S = (A\boldsymbol{r}_k,\ A\boldsymbol{r}_k)(\boldsymbol{q}_k,\ \boldsymbol{r}_k) - (A\boldsymbol{r}_k,\ \boldsymbol{q}_k)(\boldsymbol{q}_k,\ A\boldsymbol{r}_k) \quad (63)$$

とすると，

$$\begin{bmatrix}\zeta_k \\ \eta_k\end{bmatrix} = \frac{1}{S}\begin{bmatrix}(\boldsymbol{q}_k,\ \boldsymbol{q}_k) & -(A\boldsymbol{r}_k,\ \boldsymbol{q}_k) \\ (-\boldsymbol{q}_k,\ A\boldsymbol{r}_k) & (A\boldsymbol{r}_k,\ A\boldsymbol{r}_k)\end{bmatrix}\begin{bmatrix}(A\boldsymbol{r}_k,\ \boldsymbol{r}_k) \\ (\boldsymbol{q}_k,\ \boldsymbol{r}_k)\end{bmatrix}. \quad (64)$$

以上より，

$$\zeta_k = \frac{(\boldsymbol{q}_k,\ \boldsymbol{q}_k)(A\boldsymbol{r}_k,\ \boldsymbol{r}_k) - (A\boldsymbol{r}_k,\ \boldsymbol{q}_k)(\boldsymbol{q}_k,\ \boldsymbol{r}_k)}{(A\boldsymbol{r}_k,\ A\boldsymbol{r}_k)(\boldsymbol{q}_k,\ \boldsymbol{q}_k) - (A\boldsymbol{r}_k.\ \boldsymbol{q}_k)(\boldsymbol{q}_k,\ A\boldsymbol{r}_k)}, \quad (65)$$
$$\eta_k = \frac{(A\boldsymbol{r}_k,\ A\boldsymbol{r}_k)(\boldsymbol{q}_k,\ \boldsymbol{r}_k) - (\boldsymbol{q}_k,\ A\boldsymbol{r}_k)(A\boldsymbol{r}_k,\ \boldsymbol{r}_k)}{(A\boldsymbol{r}_k,\ A\boldsymbol{r}_k)(\boldsymbol{q}_k,\ \boldsymbol{q}_k) - (A\boldsymbol{r}_k,\ \boldsymbol{q}_k)(\boldsymbol{q}_k,\ A\boldsymbol{r}_k)} \quad (66)$$

と求められる．

次に，近似解ベクトル $\boldsymbol{x}_{k+1}$ の更新式について述べる．まず，新たに次の補助ベクトルを置く．

$$\boldsymbol{v}'_k = A^{-1}\boldsymbol{v}_k, \quad (67)$$
$$\boldsymbol{q}'_k = A^{-1}\boldsymbol{q}_k \quad (68)$$

と置く．(56) 式の $\boldsymbol{v}_k$ は補助ベクトル $\boldsymbol{v}'_k$，$\boldsymbol{q}'_k$ を用いて

$$\boldsymbol{v}'_k = \zeta_k\boldsymbol{r}_k + \eta_k\boldsymbol{q}'_k \quad (69)$$

と表される．$\boldsymbol{r}_k = \boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_k$ の関係を用いて，補助ベクトル $\boldsymbol{a}'\_\boldsymbol{r}_k$ が $\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{a}'\_\boldsymbol{r}_k = \boldsymbol{a\_r}_k$ を満たすように設定する．$\boldsymbol{a}'\_\boldsymbol{r}_k$ は次のように表される．

$$\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{a}'\_\boldsymbol{r}_k = \boldsymbol{a\_r}_k = \boldsymbol{r}_k - \boldsymbol{v}_k,$$
$$= \boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_k - \boldsymbol{v}_k, \quad (70)$$
$$\boldsymbol{a}'\_\boldsymbol{r}_k = \boldsymbol{x}_k + \boldsymbol{v}'_k. \quad (71)$$

(69) 式，(71) 式より近似解ベクトル $\boldsymbol{x}_{k+1}$ の更新式

$$\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{r}_{k+1},$$
$$= \boldsymbol{r}_k - \boldsymbol{v}_k - \alpha_kA\boldsymbol{y}_k,$$
$$= \boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_k - \boldsymbol{v}_k - \alpha_kA\boldsymbol{y}_k, \quad (72)$$
$$\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{x}_k + \boldsymbol{v}'_k + \alpha_k\boldsymbol{y}_k,$$
$$= \boldsymbol{a}'\_\boldsymbol{r}_k + \alpha_k\boldsymbol{y}_k \quad (73)$$

が得られる．また，(57) 式のベクトル $\boldsymbol{p}_{k+1}$ より $\boldsymbol{q}'_{k+1}$ の更新式

$$\boldsymbol{q}'_{k+1} = \boldsymbol{v}'_k + \alpha_k\boldsymbol{w}_k \quad (74)$$

が得られる．

以下に BiCGStar variant 法の算法を示す．ここで，ϵ は収束判定に用いる微小な値である．初期シャドウ残差ベクトルを $\boldsymbol{r}_0^*$ とする．

Algorithm 2: BiCGStar variant 法の算法

1. Let $\boldsymbol{x}_0$ be an initial guess, Compute $\boldsymbol{r}_0 = \boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_0$,
2. Choose $\boldsymbol{r}_0^*$, such that $(\boldsymbol{r}_0^*,\ \boldsymbol{r}_0) \neq 0$
3. Compute $A\boldsymbol{r}_0$, $\boldsymbol{p}_0 = \boldsymbol{r}_0$, $A\boldsymbol{p}_0 = A\boldsymbol{r}_0$,
4. for $k = 0, 1, ..,$ do,
5. $\zeta_k = \dfrac{(\boldsymbol{q}_k,\ \boldsymbol{q}_k)(A\boldsymbol{r}_k,\ \boldsymbol{r}_k) - (A\boldsymbol{r}_k,\ \boldsymbol{q}_k)(\boldsymbol{q}_k,\ \boldsymbol{r}_k)}{(A\boldsymbol{r}_k,\ A\boldsymbol{r}_k)(\boldsymbol{q}_k,\ \boldsymbol{q}_k) - (A\boldsymbol{r}_k.\ \boldsymbol{q}_k)(\boldsymbol{q}_k,\ A\boldsymbol{r}_k)}$,
6. $\eta_k = \dfrac{(A\boldsymbol{r}_k,\ A\boldsymbol{r}_k)(\boldsymbol{q}_k,\ \boldsymbol{r}_k) - (\boldsymbol{q}_k,\ A\boldsymbol{r}_k)(A\boldsymbol{r}_k,\ \boldsymbol{r}_k)}{(A\boldsymbol{r}_k,\ A\boldsymbol{r}_k)(\boldsymbol{q}_k,\ \boldsymbol{q}_k) - (A\boldsymbol{r}_k,\ \boldsymbol{q}_k)(\boldsymbol{q}_k,\ A\boldsymbol{r}_k)}$,
7. $\boldsymbol{v}_k = \zeta_kA\boldsymbol{r}_k + \eta_k\boldsymbol{q}_k$,
8. $\boldsymbol{v}'_k = \zeta_k\boldsymbol{r}_k + \eta_k\boldsymbol{q}'_k$,
9. $\boldsymbol{a\_r}_k = \boldsymbol{r}_k - \boldsymbol{v}_k$,

$\boldsymbol{a}'\_\boldsymbol{r}_k = \boldsymbol{x}_k + \boldsymbol{v}'_k$,
$\boldsymbol{w}_k = \zeta_k A\boldsymbol{p}_k + \eta_k \boldsymbol{u}_k$,
Compute $A\boldsymbol{w}_k$,
$\boldsymbol{y}_k = \boldsymbol{p}_k - \boldsymbol{w}_k$,
$A\boldsymbol{y}_k = A\boldsymbol{p}_k - A\boldsymbol{w}_k$,
$\alpha_k = \dfrac{(\boldsymbol{r}_0^*,\ \boldsymbol{r}_k)}{(\boldsymbol{r}_0^*,\ A\boldsymbol{p}_k)}$,
$\boldsymbol{r}_{k+1} = \boldsymbol{a}\_\boldsymbol{r}_k - \alpha_k A\boldsymbol{y}_k$,
if $||\boldsymbol{r}_{k+1}||/||\boldsymbol{r}_0|| \le \epsilon$ stop,
$\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{a}'\_\boldsymbol{r}_k + \alpha_k \boldsymbol{y}_k$,
$\boldsymbol{q}_{k+1} = \boldsymbol{v}_k - \alpha_k A\boldsymbol{w}_k$,
$\boldsymbol{q}'_{k+1} = \boldsymbol{v}'_k + \alpha_k \boldsymbol{w}_k$,
Compute $A\boldsymbol{r}_{k+1}$,
$\beta_k = \dfrac{\alpha_k(\boldsymbol{r}_0^*,\ \boldsymbol{r}_{k+1})}{\zeta_k(\boldsymbol{r}_0^*,\ \boldsymbol{r}_k)}$,
$\boldsymbol{p}_{k+1} = \boldsymbol{r}_{k+1} - \beta_k \boldsymbol{y}_k$,
$A\boldsymbol{p}_{k+1} = A\boldsymbol{r}_{k+1} - \beta_k A\boldsymbol{y}_k$,
$\boldsymbol{u}_{k+1} = \boldsymbol{q}_{k+1} - \beta_k \boldsymbol{w}_k$,
end do.

表 1 に BiCGStar variant 法を含む 8 種類の解法の 1 反復当たりの計算量を示す．ここで "$M\boldsymbol{v}$" は行列ベクトル積，"Dot" は内積，"AXPY" はベクトル同士の四則演算 ($\boldsymbol{z} = \alpha\boldsymbol{x} + \boldsymbol{y}$) の回数を表す，AXPY の計算回数はベクトル同士の加減算とベクトルスカラー積を各々 0.5 回とした．また BiCGStar variant 法を BiCGStar_v と表記する．

表 1 8 種類の積型反復法の 1 反復当たりの計算量
Table 1 Computational costs per iteration of eight iterative methods

method	$M\boldsymbol{v}$	Dot	AXPY
GPBiCG	2	8	14.0
GPBiCG_v1	2	8	14.5
GPBiCG_v2	2	8	14.0
GPBiCG_v3	2	8	13.0
GPBiCG_v4	2	8	13.5
GPBiCG_AR	2	8	14.0
BiCGSafe	2	8	13.5
BiCGStar_v	2	8	13.5

4. 数値実験

4.1 計算機環境と計算条件

計算はすべて倍精度浮動小数点演算で行った．計算機は Dell Power Edge（CPU：Intel Xeon X5570，クロック周波数：2.93GHz，メモリ：24Gbytes，OS：RedHat Enterprise Linux 5.6）を使用した．プログラムは Fortran90 を用いて実装し，コンパイラは Intel Fortran Compiler を使用した．最適化オプションは "-fast" を使用した．右辺項は物理的条件から得られる値を用いた．存在しない場合には，厳密解を $\hat{\boldsymbol{x}} = (1, 1, ..., 1)^T$ とし，$\boldsymbol{b} = A\hat{\boldsymbol{x}}$ で作成した．
収束判定条件は相対残差の 2 ノルム：$||\boldsymbol{r}_{k+1}||_2/||\boldsymbol{r}_0||_2 \le 10^{-10}$ とした．初期近似解 $\boldsymbol{x}_0$ はすべて 0 とした．初期シャドウ残差ベクトル $\boldsymbol{r}_0^*$ は初期残差ベクトル $\boldsymbol{r}_0$ とした．行列は予め対角スケーリングによって対角項をすべて 1.0 に正規化した．最大反復回数は 50000 回とした．

4.2 テスト行列

表 2 にテスト行列の特徴を示す．テスト行列はフロリダ大学の疎行列データベース [6] より選出した．

表 2 10 種類のテスト行列の特徴
Table 2 Characteristics of ten test matrices

行列	次元数	非零要素数	平均非零要素数	解析分野
bcircuit	68,902	375,558	5.5	回路解析
epb3	84,617	463,625	5.5	熱交換器
wang4	26,068	177,196	6.8	半導体解析
atmosmodd	1,270,432	8,814,880	6.9	流体解析
memplus	17,758	126,150	7.1	回路解析
ecl32	51,993	380,415	7.3	半導体解析
chipcool1	20,082	281,150	14	熱伝導解析
water_tank	60,740	2,035,281	33.5	流体解析
raefsky3	21,200	1,488,768	70.2	流体解析
sme3Dc	42,930	3,148,656	73.3	半導体解析

4.3 実験結果

表 3 に 10 個のテスト行列における 8 種類の解法の収束性を示す．ここで, "ratio" は計算時間 (time[sec.]) の GPBiCG 法との比を示す．"TRR" は真の相対残差 (True Relative Residual) の常用対数 $\log_{10}(||\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_{k+1}||_2/||\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_0||_2)$ の値を意味する．

表 3 より以下のことがわかる．
(1) テスト行列 10 個のうち 5 個の行列で BiCGStar variant 法が最も速く収束した．
(2) 次いで，BiCGSafe 法が 3 個の行列で最も速く収束した．
(3) 特に行列 epb3 では BiCGStar variant 法の計算時間が GPBiCG 法の計算時間よりも 17%短かった．
(4) 行列 sme3Dc において，GPBiCG 法，GPBiCG_v1-v2 法は TRR が 10^{-6} 以下にまで到達しなかった．
(5) 一方, GPBiCG_v3-v4 法, BiCGSafe 法, GPBiCG_AR 法，BiCGStar variant 法は TRR が 10^{-9} 以下まで到達した．

図 1 に GPBiCG 法，GPBiCG_v4 法，BiCGSafe 法，BiCGStar variant 法の 4 種類の解法の残差履歴を示す．図中の (a) は行列 epb3，(b) は行列 sme3Dc における残差

表 3 8 種類の解法の収束性比較
Table 3 Comparison of convergence of eight iterative methods

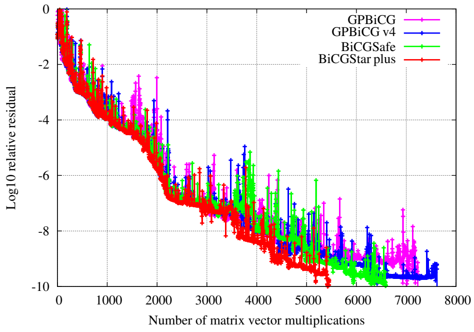
(a) 行列 bcircuit - memplus

matrix	method	Mv	time[s]	ratio	TRR
bcircuit	GPBiCG	max	178.418	-	0.66
	GPBiCG_v1	43,636	78.784	1.00	-5.38
	GPBiCG_v2	37,944	67.853	0.86	-6.58
	GPBiCG_v3	32,680	61.538	0.78	-10.01
	GPBiCG_v4	**26,384**	**45.261**	0.57	-10.15
	BiCGSafe	27,844	45.636	0.58	-10.08
	GPBiCG_AR	36,662	65.882	0.84	-9.90
	BiCGStar_v	28,088	46.142	0.59	-10.16
epb3	GPBiCG	7,800	13.348	1.00	-10.28
	GPBiCG_v1	6,904	12.611	0.94	-10.04
	GPBiCG_v2	6,342	11.482	0.86	-10.07
	GPBiCG_v3	6,164	11.404	0.85	-10.07
	GPBiCG_v4	**5,462**	**9.481**	0.71	-10.08
	BiCGSafe	6,950	10.551	0.79	-10.12
	GPBiCG_AR	5,678	9.762	0.73	-10.02
	BiCGStar_v	6,260	9.727	0.73	-10.06
wang4	GPBiCG	290	0.135	1.00	-10.09
	GPBiCG_v1	286	0.140	1.04	-10.05
	GPBiCG_v2	298	0.141	1.04	-10.02
	GPBiCG_v3	304	0.162	1.20	-10.04
	GPBiCG_v4	**282**	0.129	0.96	-10.05
	BiCGSafe	312	0.137	1.01	-10.16
	GPBiCG_AR	284	0.141	1.04	-10.04
	BiCGStar_v	292	**0.127**	0.94	-10.20
atmosmodd	GPBiCG	566	19.671	1.00	-10.00
	GPBiCG_v1	624	22.260	1.13	-10.50
	GPBiCG_v2	**570**	19.763	1.00	-10.29
	GPBiCG_v3	584	21.840	1.11	-10.02
	GPBiCG_v4	632	21.795	1.11	-10.42
	BiCGSafe	630	19.757	1.00	-10.27
	GPBiCG_AR	600	20.049	1.02	-10.03
	BiCGStar_v	594	**18.793**	0.96	-10.03
memplus	GPBiCG	382	0.135	1.00	-10.22
	GPBiCG_v1	410	0.149	1.10	-10.10
	GPBiCG_v2	424	0.150	1.11	-10.08
	GPBiCG_v3	**380**	0.149	1.10	-10.09
	GPBiCG_v4	444	0.153	1.13	-10.02
	BiCGSafe	444	0.149	1.10	-10.06
	GPBiCG_AR	408	0.150	1.11	-10.00
	BiCGStar_v	400	**0.133**	0.99	-10.00

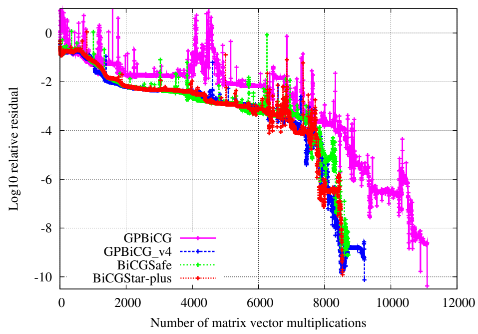
(b) 行列 ecl32 - sme3Dc

matrix	method	Mv	time[s]	ratio	TRR
ecl32	GPBiCG	**676**	0.788	1.00	-10.04
	GPBiCG_v1	736	0.909	1.15	-10.11
	GPBiCG_v2	754	0.911	1.16	-10.06
	GPBiCG_v3	750	1.010	1.28	-10.66
	GPBiCG_v4	740	0.862	1.09	-10.38
	BiCGSafe	688	**0.750**	0.95	-10.34
	GPBiCG_AR	732	0.907	1.15	-10.07
	BiCGStar_v	712	0.762	0.97	-10.19
chipcool1	GPBiCG	362	0.219	1.00	-10.01
	GPBiCG_v1	364	0.228	1.04	-10.35
	GPBiCG_v2	364	0.224	1.02	-10.71
	GPBiCG_v3	364	0.246	1.12	-10.87
	GPBiCG_v4	**354**	0.220	1.00	-10.20
	BiCGSafe	356	**0.212**	0.97	-10.34
	GPBiCG_AR	368	0.230	1.05	-10.67
	BiCGStar_v	360	**0.212**	0.97	-10.09
water_tank	GPBiCG	5,804	22.851	1.00	-10.09
	GPBiCG_v1	4,272	17.261	0.76	-10.17
	GPBiCG_v2	4,128	16.515	0.72	-10.02
	GPBiCG_v3	4,150	17.200	0.75	-10.45
	GPBiCG_v4	4,090	16.204	0.71	-10.01
	BiCGSafe	**3,982**	**15.336**	0.67	-10.01
	GPBiCG_AR	4,138	16.517	0.72	-10.00
	BiCGStar_v	4,132	15.778	0.69	-10.16
raefsky3	GPBiCG	**9,258**	**23.331**	1.00	-10.02
	GPBiCG_v1	10,276	26.311	1.13	-10.01
	GPBiCG_v2	10,198	25.989	1.11	-10.03
	GPBiCG_v3	9,832	25.470	1.09	-10.01
	GPBiCG_v4	9,992	25.236	1.08	-10.03
	BiCGSafe	10,034	24.992	1.07	-10.13
	GPBiCG_AR	9,748	24.792	1.06	-10.01
	BiCGStar_v	10,000	24.719	1.06	-10.01
sme3Dc	GPBiCG	12,044	85.987	1.00	-5.78
	GPBiCG_v1	13,978	101.741	1.18	-5.98
	GPBiCG_v2	19,634	141.597	1.65	-5.31
	GPBiCG_v3	**8,782**	66.471	0.77	-9.61
	GPBiCG_v4	8,996	64.698	0.75	-9.60
	BiCGSafe	9,006	64.146	0.75	-9.59
	GPBiCG_AR	9,158	67.894	0.79	-9.58
	BiCGStar_v	8,784	**62.038**	0.72	-9.60

履歴である．また，**表 2** に GPBiCG 法と BiCGStar variant 法の真の相対残差 (TRR) と相対残差 (RR) の残差履歴を示す．



(a) epb3



(b) sme3Dc

図 1　4 種類の解法の残差履歴

Fig. 1　History of relative residual of four iterative methods

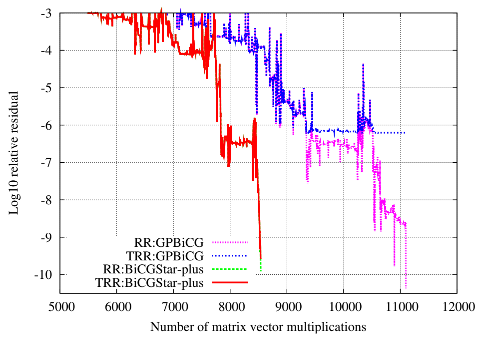


図 2　GPBiCG 法と BiCGStar variant 法の TRR と RR の残差履歴

Fig. 2　History of relative residual and true relative residual of GPBiCG and variant of BiCGStar

図 1, 図 2 から以下のことがわかる．

(1) 行列 epb3 において，BiCGStar variant 法が行列ベクトル積の約 3000 回目から他の解法よりも速く TRR の 10^{-10} に到達している．

(2) GPBiCG 法の RR が行列ベクトル積約 11000 回目で 10^{-10} に到達したのに対し，TRR は約 9500 回目から停滞を起こしている．

(3) 一方，BiCGStar variant 法の TRR と RR はほぼ一致している．

表 4 に 8 種類の解法の行列ベクトル積の回数の比と計算時間の比の平均値を示す．“ratio1” は行列ベクトル積の回数の GPBiCG 法との比を示し，“ratio2” は計算時間 (time[sec.]) の GPBiCG 法との比を示す．

表 4　各解法の行列ベクトル積計算回数比，計算時間比の平均値

Table 4　Average score of the ratio of the number of “$M\boldsymbol{v}$” and CPU time of eight iterative methods to GPBiCG

method	ratio1	ratio2
GPBiCG	1.00	1.00
GPBiCG_v1	1.01	1.05
GPBiCG_v2	1.04	1.05
GPBiCG_v3	0.92	1.01
GPBiCG_v4	0.92	0.91
BiCGSafe	0.94	0.89
GPBiCG_AR	0.93	0.95
BiCGStar_v	**0.91**	**0.86**

表 4 より以下のことがわかる．

(1) 行列ベクトル積計算回数，計算時間共に BiCGStar variant 法が良い結果を示した．

(2) 特に計算時間比の平均値では，BiCGStar variant 法が GPBiCG 法よりも 14%良い値を示した．

表 5 に 8 種類の解法の行列ベクトル積計算回数，合計計算時間における順位を示す．“score” は各行列での順位を合計したものである．

表 5　8 種類の解法の行列ベクトル積計算回数，合計計算時間における順位

Table 5　The rank of the number of “$M\boldsymbol{v}$” and computational time

method	$M\boldsymbol{v}$		time	
	score	rank	score	rank
GPBiCG	43	5	43	4
GPBiCG_v1	59	8	63	8
GPBiCG_v2	56	7	56	6
GPBiCG_v3	40	3	57	7
GPBiCG_v4	34	**1**	33	3
BiCGSafe	46	6	25	2
GPBiCG_AR	40	3	47	5
BiCGStar_v	36	2	16	**1**

表 5 より以下のことがわかる．

(1) BiCGStar variant 法は合計計算時間において最も良い値を示した．

(2) 6 個の行列で BiCGStar variant 法の行列ベクトル積計算回数が GPBiCG_v4 法より多くなった．

5. まとめ

本稿では, BiCGStar variant 法を提案した．BiCGStar variant 法は Rutishauser の交代 2 項漸化式と准残差の 2 つの戦略を導入した解法である．数値実験を通して, BiCGStar variant 法は計算時間比の平均値において，GPBiCG 法よりも 14%良い値を示した．また，行列 sme3Dc において，GPBiCG 法，GPBiCG_v1-v2 法は TRR が 10^{-6} 以下にまで到達しなかったのに対し，BiCGStar variant 法は 10^{-9} 以下にまで到達した．これらの結果から BiCGStar variant 法は収束性と計算時間の面で優れていることが示された．

参考文献

[1] Abe, K., Gerard L.G. Sleijpen: Solving linear equations with a stabilized GPBiCG method, Appl. Numer. Math., doi:10.1016/j.apnum.2011.06.10, (2011).
[2] Fujino, S., Fujiwara, M., Yoshida, M.: A proposal of preconditioned BiCGSafe method with safe convergence, Proc. of The 17th IMACS World Congress on Scientific Computation, Appl. Math. Simul., CD-ROM, Paris, France, (2005).
[3] Iwasato, K., Murakami, K., Fujino, S.: Evaluation of BiCGStar-plus method with stabilizing polynomial and associate residual, Proc. of International workshop on HPC, Krylov Subspace method and its applications, pp.41-46, (2013).
[4] Moethuthu: A Study on Refinement of Krylov Subspace Methods Based on Lanczos Process, 九州大学大学院 情報科学府情報工学専攻博士論文, (2010).
[5] Rutishauser, H., Theory of gradient method, in: Refined Iterative Methods for Computation of the Solution and the Eigenvalues of Self-Adjoint Value Problems, in: Mitt. Inst. Angew. Math. ETH Zürich, Birkhäuser, Basel, pp.24-49, (1959).
[6] University of Florida Sparse Matrix Collection: http://www.cise.ufl.edu/research/sparse/matrices/index.html.
[7] 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., vol.13, pp.631-644, (1992).
[8] Zhang, S.-L. :GPBi-CG: Generalized product-type methods preconditionings based on Bi-CG for solving nonsymmetric linear systems, SIAM J. Sci. Comput., pp.537-551, (1997).

