新学術領域「コンピューティクスによる物質デザイン：複合相関と非平衡ダイナミクス」
計画研究「A01-2：大規模並列環境における数値計算アルゴリズム」

高精度近似解を生成する Block Krylov 部分空間反復法の収束性向上と安定化

Convergence improvement and stabilization of Block Krylov subspace methods for computing high accuracy solutions

多田野 寛人

Hiroto Tadano

筑波大学システム情報系

Faculty of Engineering, Information and Systems, University of Tsukuba

大規模係数行列 A と複数右辺ベクトル B をもつ連立一次方程式 $AX = B$ は，様々な応用分野において現れる．これらの分野においては，同方程式の求解時間が演算の大部分を占めており，高速に解く数値解法が求められている．また，同方程式を解いて得られた近似解の精度は，応用分野における計算結果にも大きな影響を及ぼすため，高精度近似解が生成できる数値解法が必要とされている．

複数本の右辺ベクトルをもつ連立一次方程式の数値解法として，Block Krylov 部分空間反復法がある．同法を用いることで複数本の右辺ベクトルをもつ連立一次方程式をまとめて解くことができ，Krylov 部分空間反復法で 1 本ずつ方程式を解く場合よりも少ない反復回数で近似解が得られることがある．Block Krylov 部分空間反復法において右辺ベクトル数が多い場合は，反復の停止条件が満たされたにもかかわらず，得られる近似解の精度が劣化する「偽収束」と呼ばれる現象が発生することがある．偽収束を回避する Block Krylov 部分空間反復法として，我々は Block BiCGGR 法 [1] を構築し，高精度近似解を生成することに成功した．しかしながら，同法において右辺ベクトル数が多い場合は，数値的不安定性の影響で残差が発散・停滞し，近似解が得られないことがある．

Krylov 部分空間反復法では，加速多項式と呼ばれる多項式を用いることで，収束性を向上させることができる．BiCGSTAB 法では 1 つのパラメータをもつ加速多項式が用いられ，GPBiCG 法などでは，2 つのパラメータをもつ加速多項式が用いられている．我々は，2 つのパラメータをもつ加速多項式を導入し，かつ高精度近似解が生成可能な Block Krylov 部分空間反復法 [2] を構築した．この方法は Block BiCGGR 法よりも高い収束性を示すものの，右辺ベクトル数が多い場合は数値的不安定性の影響で，近似解が得られないことがある．

この数値的不安定性の原因は，反復過程で現れる縦長行列を構成する列ベクトル間の線形独立性が失われるためである．文献 [3] では，反復過程においてベクトルの直交化を行うことで数値的不安定性が緩和できることが示されている．本発表では，文献[3]の手法を[2]の解法に対して適用することで，高収束・高安定かつ高精度近似解を生成できる Block Krylov 部分空間反復法について述べる．

[1] H. Tadano, T. Sakurai and Y. Kuramashi, Block BiCGGR: a new Block Krylov subspace method for computing high accuracy solutions, JSIAM Letters, Vol. 1, pp. 44—47, 2009.
[2] 多田野 寛人，櫻井 鉄也，近似解の精度劣化を可否する Block 積型 Krylov 部分空間法について，2010 年度日本応用数理学会年会講演予稿集，pp. 41—42, 2010.
[3] A. A. Dubrulle, Retooling the method of block conjugate gradients, Elec. Trans. Numer. Anal., Vol. 12, pp. 216—233, 2001.