数理解析研究所講究録 1320 巻 2003 年 212-218

非優対角線型方程式系の前処理行列による優対角化法

岡山理科大学総合情報学部情報科学科 榊原道夫(Michio SAKAKIHARA)
仁木滉(Hiroshi NIKI)
Department of Information Science
Okyama University of Science
岡山理科大学大学院総合情報研究科 森本宗典(Munenori MORIMOTO)
Graduate School of Information Science
Okyama University of Science
岡山理科大学工学部応用化学科 岡本直孝 (Naotaka OKAMOTO)
Department of Applied Chemistry
Okyama University of Science

1. はじめに

境界要素法の離散化で現れる線型方程式のように係数行列が一般に密行列である場合，数値解法としてピボッティングを伴うGaussの消去法を適用するのが一般的である．Gauss消去法は未知数の数nが増加すると$O(n^3)$の計算量が必要である．また計算された解の精度は係数行列の条件数と係数成長因子(前進消去で係数行列の絶対値が増加する上限[1])に依存する．また Gauss-Seidel 法のような反復法は，計算時間は初期値の選択に依存するが計算量の増加は$O(n^2)$で Gauss 消去法よりも増加率が少ない．しかしながら，反復法は収束しない場合が存在する．反復法は係数行列から構成された反復行列のスペクトル半径が1未満でなければ収束しない．スペクトル半径が 1 未満であるかを 厳密に判定するためには反復行列の絶対値最大の固有値を求めなければならず，現実的ではない．係数行列だけの情報で，そのことを判定する方法としては優対角性の検証がある．優対角行列は特定の微分方程式に差分法を適用した場合などの特殊な場合にしか現れない．そのため一般に優対角性が保証されない境界要素法に直接反復法の適用は適切でないように思われる．我々は特定の前処理行列を用いると，行列Aの任意の要素を零とする前処理法を開発した[8]．この方法に着目して境界要素方程式を優対角化する手続きを提案する．優対角化された方程式系には反復法を適用することができ従来適用されてきた行列(正定値対称行列，M-行列など)以外の境界要素方程式のような密行列に対して，反復法が解法として有効であることを示す．また，Gauss-Seidel 法の前処理による加速についても述べる．

2. 優対角性

線型方程式系

$$Ax = b \tag{1}$$

が優対角であるとは，係数行列$A = (a_{ij})$に対し，

$$|a_{ii}| \geq \sum_{j=1, j\neq i}^{n} |a_{ij}|, i=1,\ldots,n \tag{2}$$

を満たし，少なくとも 1 個の狭義不等式が成立することである．このとき係数行列は正則であり方程式系は一意解を持つ．また条件（2）を満たすとき，基本反復法（Jacobi 法，Gauss-Seidel 法など）の収束が保証される．各行に対して次の優対角度

$$t_i = \frac{\sum_{j=1, j\neq i}^{n} a_{ij}}{a_{ii}},\ i=1,2,\ldots,n \tag{3}$$

を定義する．$t_i < 1$であるならばその行は狭義優対角である．またよく知られているように優対角行列は次の補題により H-行列と関連つけられる．

補題 1[6]：正方行列 A が H-行列であるための必要十分条件は，AD が狭義優対角行列となる正則な対角行列 $D, d_{ii} > 0$ が存在する（このような行列を一般化優対角行列と言う）ことである．

3．反復法と収束定理

線型方程式系(1)に対する反復法はその係数行列の種々な分離から導かれる．係数行列が与えられて，何らかの反復法が適用できるか否かの判定は多岐にわたる．Ostrowski-Reich の定理[7]として知られている係数行列が正定値対称の場合 Gauss-Seidel 法は収束する．また係数行列が M-行列の場合も Gauss-Seidel 法は収束する．しかしながら，与えられた方程式系の係数行列が正定値であるかまたは M-行列であるかは，優対角性のように係数から簡単に判定することは困難である．さらに境界要素法の適用で生成される離散系に現れる係数行列は密行列であるため，問題は一層難しくなる．優対角性は簡単な判定条件であるが，非常に厳しい条件である．境界要素法で現れる行列では優対角の条件を満足する行列を構成するのは困難である．そのために単調性を必要としない H-行列に対しての判定法が研究されている．補題 1 から理解できるように H-行列と一般化優対角行列とは等価である．与えられた行列の比較行列を

$$\langle A\rangle = (\alpha_{ij}), \qquad \alpha_{ij} = \begin{cases} |a_{ii}| & \\ -|a_{ij}| & i \neq j \end{cases} \tag{4}$$

と定義する．A が H-行列ならばその比較行列 $\langle A\rangle$ は M-行列，すなわち $\langle A\rangle^{-1} \geq 0$ である．H-行列の集合は優対角行列の集合よりも広い集合である．境界要素法に現れる行列は一般に非 H-行列である．一方，H-行列の性質より以下に示すような有用な結果が得られている．分離 $A=M-N$ を考える．そのとき $\langle M\rangle - |N|$ が M-行列のとき H-分離という．また $\langle A\rangle = \langle M\rangle - |N|$ のとき H-互換分離という．このように分離を考えられることは反復法をより多様に構成できることを示している． A.Frommer and D.B.Szyld[2] は $A=M-N$ を H-互換分離とすると $\langle A\rangle = \langle M\rangle - |N|$ および $\langle M\rangle$ は H-行列で

$$\rho\left(M^{-1}N\right) \le \rho\left(\langle M\rangle^{-1}|N|\right) < 1 \tag{5}$$

が成立する．この事は従来知られている結果の一般化を示している．このことより，ただちにAが一般化優対角行列（H-行列）で Gauss－Seidel 分離を適用した場合，その反復は収束することが分かる．

境界要素法の離散化で現れるような線型方程式系に対し反復法の議論をするためには，より広範囲の行列の集合を新たに考えなければならない．そのような集合を定義するヒントが H-行列である．H-行列は対角行列により優対角行列に変換できる．このことより優対角化するのに対角行列による変換以外の場合を次の節において考える．

4. 非優対角行列の優対角化

非優対角行列を優対角化する変換行列として$Q^{(k)} = (q_{ij}^{(k)})$：対角成分がすべて1で，

$A^{(k-1)} = Q^{(k-1)} \cdots Q^{(1)}A$; $A^{(0)} = A$の非優対角行について絶対値最大列のインデックスが(m,n)とするとき，その成分を

$$q_{mn}^{(k)} = -\frac{a_{mn}^{(k-1)}}{a_{mm}^{(k-1)}} \tag{6}$$

により与え、その他の成分はすべて零の行列を考える．ただし$a_{ij}^{(0)} = a_{ij}$で$a_{mn}^{(k)}$は第m行の絶対値最大成分である．この行列を係数行列の左側から作用さす．この変換は非優対角行の絶対値最大成分の値を零にする変換である．この変換で優対角化できる行列の集合を明確に特徴付けることには成功していない．消去に対応するこの行列により係数行列を優対角化することを試みる．

5. 数値例

先ず簡単な行列により前節まで述べたことを説明する．行列

$$A = \begin{pmatrix} 1 & -0.5 & 0.6 & 0.2 \\ -0.4 & 1 & -0.3 & 0.4 \\ 0.3 & -0.6 & 1 & -0.5 \\ 0.5 & 0.1 & -0.7 & 1 \end{pmatrix} \tag{7}$$

は優対角行列ではなく事実

$$\langle A\rangle^{-1} = \begin{pmatrix} -2.99 & -0.99 & -1.23 & -1.01 \\ -0.86 & -0.22 & -1.17 & -0.84 \\ -1.11 & -1.05 & -0.67 & -0.98 \\ -1.01 & -1.26 & -1.20 & -0.30 \end{pmatrix} \tag{8}$$

となり，明らかに比較行列は M-行列ではない．そのために Gauss-Seidel 反復の収束は保証

できない．しかしながら 4 節で示した乗算を2回行うことにより優対角化が以下のように行える．まず

$$Q^{(1)}=\begin{pmatrix}1 & 0 & -0.6 & 0\\ 0.4 & 1 & 0 & 0\\ 0 & 0.6 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 0.7 & 1\end{pmatrix} \tag{9}$$

とすると

$$Q^{(1)}A=\begin{pmatrix}0.82 & -0.14 & 0 & 0.5\\ 0 & 0.8 & -0.06 & 0.48\\ 0.06 & 0 & 0.82 & -0.26\\ 0.71 & -0.32 & 0 & 0.65\end{pmatrix} \tag{10}$$

を得る．第 4 行目がまだ優対角でないため

$$Q^{(2)}=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1 & 0\\ -0.87 & 0 & 0 & 1\end{pmatrix} \tag{11}$$

とし上の結果より

$$Q^{(2)}Q^{(1)}A=\begin{pmatrix}0.82 & -0.14 & 0 & 0.50\\ 0 & 0.80 & -0.06 & 0.48\\ 0.06 & 0 & 0.82 & -0.26\\ 0 & -0.198 & 0 & 0.215\end{pmatrix} \tag{12}$$

となり狭義優対角行列となる．

さて，次に領域[0, 1]×[0, 1]におけるラプラス方程式の Dirichlet 問題に対し境界要素法を適用して得られる係数行列の場合を取り上げる．境界要素として一定要素（128要素）を適用する．生成された行列はもちろん優対角行列ではない．しかしこの場合 Gauss-Seidel 反復は収束する．

図1に係数行列の要素の大きさについての分布図を示す．図下のゲージに要素の最大値と最小値の表示と，その区間での相対的な要素の大きさの変化と色の変化の対応を示す．25回の乗算後によりすべての行が優対角となる（図2,3参照）．$Q^{(k)}$ の乗算で計算量は$O(n^2)$で，この例の場合 $Q^{(k)}$ の乗算回数は25回である．この操作により生成された係数行列は優対角化され反復法の適用が可能であることが分かる．

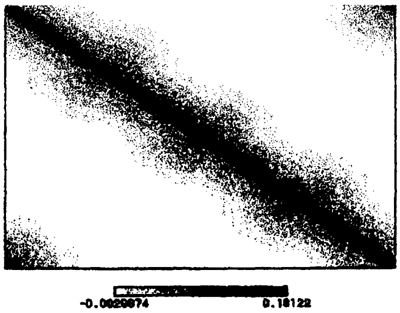

図1:行列成分の大きさ分布図

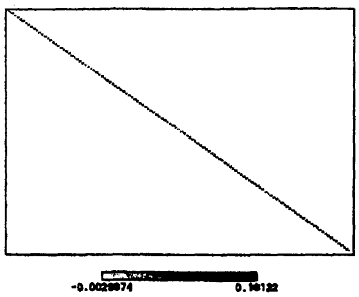

図2:25回乗算後の行列成分の大きさ分布図

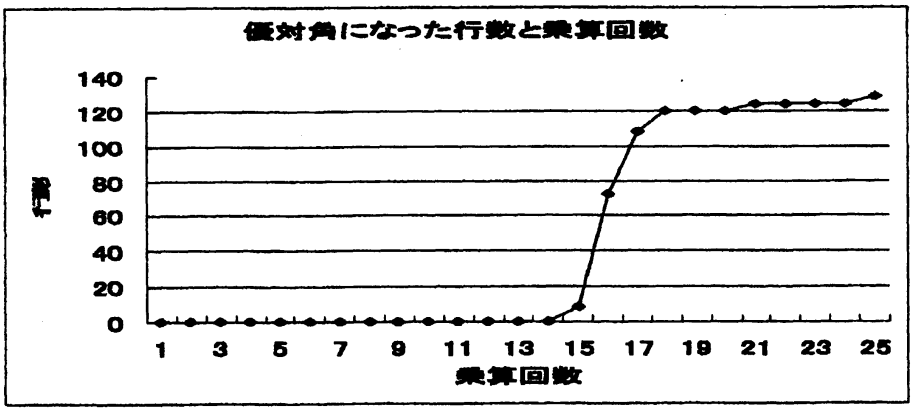

図3:乗算回数と優対角度との関係

また図 3 から優対角行数は15回目の乗算以降に急激に増加している. 優対角度が減少するほど優対角性がよくなるが, 優対角性に比例して反復法の収束比は向上する. しかしながら収束が可能ならば係数行列を狭義優対角行列化の必要はなく, $A^{(k)}$が一般化優対角行列となる回数で乗算を停止すればよい. ここで示した例の場合15～17程度の乗算で停止できる.

次に同じように境界要素法を適用した場合で領域を[0, 1]×[0, 0.2]と変えた場合の数値例を示す. この場合, Gauss-Seidel 反復法は収束せず, そのスペクトル半径は1563. 57である. ここで示した優対角化の操作により係数行列は優対角化され, 優対角化された係数行列による Gauss-Seidel 反復行列のスペクトル半径は0. 128857である. 優対角化の乗算は59回である.

6. Gauss-Seidel 法への適応

Gauss-Seidel 法を加速する方法としては SOR 法が一般的であるが SOR 法は加速係数を適切に決定することが困難である. したがって, 近年 Khono, Niki[4]らにより開発されている前処理を用いる Gauss－Seidel 法が有効な解法として考えられる. (1)のかわりに

$$\bar{A}x = PAx = Pb \tag{13}$$

に反復法を適用する．PはPAの計算量が$O(n^2)$程度でおさまるよう疎な行列により構成する．例えば行列

$$P=\begin{pmatrix} 1 & -a_{12} & 0 & \cdots \\ 0 & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & -a_{n-1n} \\ 0 & \cdots & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{14}$$

を用いる．(14)よりも有効な前処理行列[4,5]を適用することにより Gauss-Seidel 反復法が加速できることが示されている．これに加えて，今回示した優対角化によっても Gauss-Seidel 法の反復回数を減らすことができる．表1に反復回数の比較を示す．優対角化は前処理の 1 つと考えることができる．与えられた線型方程式系の係数行列を優対角化し Gauss-Seidel(GS)法を適用するアルゴリズムを優対角化 GS 法と呼ぶことにする． 優対角化が加速法として有効であるかを確かめるために，5 節で取り上げた正方領域における 2 次元ラプラス方程式の Dirichlet 問題に対し境界要素法を適用して得られる係数行列の場合についての数値例を示す．

表 1 は前述の境界要素法の問題より導出された線型方程式系に GS 法と優対角化 GS 法を適用した場合の反復回数，計算時間の比較の表である．この例は GS 法が収束する場合である．収束判定条件は $\max_i \left| x_i^{[n+1]} - x_i^{[n]} \right| \le 10^{-12}$ である．未知数の増加とともに GS 法の反復回数は増加する．優対角化反復法の反復回数は優対角化の効果により 20 回前後の反復回数で収束条件を満足している．表2は計算時間について Gauss 消去法と比較した表である．未知数の増加に伴い優対角化にかかる時間は増加するが，全計算時間は優対角化 GS 法が未知数の数が1600までは優位なデータが得られている．

表1．優多角化 Gauss-Seidel(GS)法と優対角化 GS 法データの比較

未知数の数	GS 法 反復回数	優対角化 GS 法 反復回数
400	400	18
800	709	19
1200	995	18
1600	1271	18
2000	1536	21

表2．Gauss 消去法と提案する解法の計算時間の比較

M	Gauss 消去法 計算時間(秒)	優対角化時 間	GS 反復による 解法の時間	提案する解法の 全計算時間
400	0. 33	0. 26	0. 02	0. 28
800	2. 52	2. 15	0. 07	2. 22
1200	8. 27	7. 05	0. 14	7. 19
1600	19. 47	18. 75	0. 25	19. 00
2000	38. 48	38. 39	0. 45	38. 84

本研究では係数行列の優対角化のアルゴリズムの定式化と GS 反復法との併用による線型方程式の新たな解法（優対角化 GS 法）を提案した．数値例として境界要素方程式に適用し優対角化の状況を示し，離散化により生成された係数行列を提案するアルゴリズムで優対角化できることが数値例より明にした．反復法は従来，差分法，有限要素法などの疎行列を生成する離散化を対象に活発に議論されてきた．ここで示した優対角化の手続きを用いることで密行列を生成する積分方程式の離散化においても反復法の研究をすることが有用である場合が存在することが示された．今後は優対角化の効率を上げる方法を考察していく．

参考文献

[1] L.V. Foster; Gaussian elimination with partial pivoting can fail in practice, SIAM J. Matrix Anal. Appl. ,15(1994)1354-1362.

[2] A.Frommer,D.B.Szyld: H-splitting and two-stage iterative method, Numer.Math., 63 (1992) 345-356.

[3]A.D.Gunawardena, S.K.Jain, L.Snyder: Modified iterative methods for consistent linear systems, LAA,154-156(1991)123-143.

[4] T.Khono, H.Kotakemori, H.Niki: Improving the modified Gauss-Seidel method for Z-matrices, LAA, 267(1997)113-123.

[5) H.Kotakemori, K.Harada, M.Morimoto, H.Niki: A comparison theorems for the iterative method with preconditioner $(I+S_{\max})$, J. Comp. Appl. Math.145(2002) 373-378.

[6] M. Sakakihara: Iterative estimation of Perron root and generalized diagonally dominance, INFORMATION, 2(1999)71-75.

[7] R.S. Varga; Matrix Iterative Analysis, Springer Series in Comp. Math., Springer (1999).

[8] M. Morimoto, K. Harada, M. Sakakihara and H. Sawami: The Gauss-Seidel iterative method with the preconditioner $(I+S+S_m)$, JJIAM (to appear).