

前処理付き定常反復法

岡山理科大学総合情報学部 仁木 滉 (Hiroshi Niki)

1 はじめに

n 次の正則行列 A を係数とする線型方程式

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

をより解きやすい形

$$PAx = Pb \quad (2)$$

に変換して解く前処理法が 1968 年に EVANS によって提案された [2]. 以来, 種々の前処理法が開発されている. これらの手法については文献 [1][3] に詳しく述べられている. 前処理行列として EVANS が実際に用いた方法は (2) 式を更に変更した (3) 式の型である [2].

$$P_L^{-1}AP_R^{-1}y = P_L^{-1}b, \quad y = P_Rx \quad (3)$$

ここで, P_L, P_R は正則である. 行列 A を狭義下三角部分 L , 狭義上三角部分 U , 対角成分を単位行列, すなわち, $A = I - L - U$ と分解可能なときに, EVANS は $P_L = (I - \omega L)$, $P_R = (I - \omega U)$ を用いている. ただし, ω は SOR 反復法の加速係数である. このとき, $P_L^{-1}AP_R^{-1}$ の条件数 $P = \lambda_{\max}/\lambda_{\min}$ が改善される事を実験例で示している. したがって, EVANS の前処理法は行列 A の条件数の改善を主目的とし, 結果として反復行列のスペクトル半径の減少が得られている. EVANS の前処理行列の選定方法は行列 A を $A = M - N$ と分離したときの M を P_L として用いる事を提案している. (2) 式の形の前処理法の実用的な方法の開発の報告例は無い. 1991 年に Gunawardena らは係数行列の対角項が単位行列である Z 行列に対して, A の要素の a_{ii+1} のみで構成した行列 S と単位行列 I を用いた $(I + S)$ を (1) 式に左から乗算して得られた方程式に Gauss-Seidel 法を適用する手法を提案している [6]. この方法は (1) 式に対する Gauss-Seidel 法のスペクトル半径よりも小さくなる事を示している. EVANS らの定義した前処理法の範疇に入らないためか Gunawardena らは $(I + S)$ を前処理行列とは定義していなく, 修正 Gauss-Seidel 法 (Modified Gauss-Seidel Method) と名付けている. 我々はこの $(I + S)$ が (2) 式の型の前処理法であることに着目して, Gunawardena らの方法を $(I + S)$ 型前処理法と名付ける.

(2) 式の P の最適な選択は $P = A^{-1}$ であることは明らかであるが実用的でない. したがって, A^{-1} の近似行列が簡単に得られることが前処理法の性能に影響する重要な課題である.

我々は (1) 与えられた行列を Z 行列, (2) 反復法として Gauss-Seidel 系を用いるとする.

この 2 条件の下での P の選択を考える. Gauss-Seidel 反復行列 $(I - L)^{-1}U$ における U 成分を可能な限り零に近づけることを考える. そのために, A の上三角部分 U を小さくす

るような A^{-1} の近似行列として $(I - U)^{-1}$ を用いることにする. このとき, $(I - U)^{-1} = I + U + U^2 + \dots + U^{n-1}$ と展開できるから $(I - U)^{-1} \simeq (I + U) = P$ とする. この前処理付反復法を適応的 Gauss-Seidel 法と名付けた [19]. 数値結果より $(I + S)$ 型よりも優れていることが分かった. 更に U を補正した $(I + \beta U)$ 型, $(I + BU)$ 型の前処理法を提案し多くの数値例にて優れた収束特性を持つことを知った [13][14][15]. ここで, β は正の定数, B は各行にそれぞれ β_i を付加したものである. 一方, $(I + S)$ 型の改良版として $(I + \alpha S)$ 型を提案し良好な成果を得た [12].

前処理法の一の大きな問題点は前処理操作のために乗算回数が $O(n^3)$ となる事である. 小武守らは前処理操作は対角項のみとし, 非対角項の前処理作業は反復計算中に行う事を提案し, 前処理作業による乗算回数を $O(n^2)$ に減少する事に成功した. しかしながら反復計算中での乗算量は増加するが反復回数的大幅な減少から全体として増加量は無視できる事を報告した.

さて多くの数値結果より, $(I + \alpha S)$ 型は疎な行列に, $(I + BU)$ 型は密な行列に適している事を知った. 小武守らはこれらの数値実験をもとに汎用性に優れた 2 段階前処理付反復法を提案した. 本論文ではこの方法について説明する.

2 2 段階前処理付反復法

$k = 0, 1, 2$ に対して行列 $A^{(k)} = (a_{ij}^{(k)})$ を

$$\begin{cases} A^{(0)} &= A, \\ A^{(1)} &= P_1 A^{(0)}, \\ A^{(2)} &= P_2 [D^{(1)}]^{-1} A^{(1)}, \end{cases}$$

と定義する. ただし, $D^{(1)}$ は $A^{(1)}$ の対角部分を要素にもつ行列. P_1 と P_2 はそれぞれ, 第 1 段階前処理行列と第 2 段階前処理行列である. $k = 0, 1$ に対して $A^{(k)} = I - L^{(k)} - U^{(k)}$ とする. ここで, $-L^{(k)}$ と $-U^{(k)}$ はそれぞれ $A^{(k)}$ の狭義下三角部分と狭義上三角部分を要素にもつ行列である. このとき, 前処理行列として $P_1 = (I + U^{(0)})$, $P_2 = (I + U^{(1)})$ を用いるならば, 河野らが述べているように [11], $A^{(2)}$ に対する Gauss-Seidel 反復行列のスペクトル半径は小さくなる. しかしながら, 第 1 段階前処理 $P_1 A^{(0)}$ は行列と行列の乗算 $U^{(0)} A^{(0)}$ によって $O(n^3)$ の演算が必要になってくる. そこで我々は, 演算量を減らすために $\bar{U}^{(0)} = (-\bar{u}_{ij}^{(0)})$ の各行に対して 1 個の非零の要素を用いることにする. すなわち, $\bar{U}^{(0)}$ の各要素は

$$\begin{aligned} 0 < |\bar{u}_{ij}^{(0)}| &\leq |a_{ij}|, & \text{for } j = j_i, \\ \bar{u}_{ij}^{(0)} &= 0, & \text{for } j \neq j_i, \end{aligned}$$

である。ここで、 j_i は各 $i < n$ に対して $j_i > i$ を満たす定数である。この $\bar{U}^{(0)}$ を用いると、第1段階の前処理の演算量は $O(n^2)$ に減少する。具体的な $\bar{U}^{(0)}$ の選択として、

$$\bar{U}^{(0)} = \begin{pmatrix} 0 & -\Re(a_{12}) & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & -\Re(a_{23}) & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -\Re(a_{n-1n}) \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \equiv \bar{S},$$

を用いる。ここで、 $\Re(a_{ij})$ は a_{ij} の実数部をあらわす。そこで、実際的な2段階前処理の各前処理行列をそれぞれ、

$$\begin{cases} P_1 = I + \bar{S}, \\ P_2 = I + BU^{(1)}. \end{cases} \quad (4)$$

とする。この方法は A が実行列のとき、 $I + S$ 型の前処理を行った後あらためて $I + BU$ 型前処理を行う方法である。

更に、2段階前処理行列の一般化を行う。前処理行列 P_k を $k = 1, 2$ に対して

$$P_k = I + B^{(k-1)}\hat{U}^{(k-1)},$$

と定義する。ただし、 $B^{(k-1)} = \text{diag}\{\beta_1^{(k-1)}, \dots, \beta_n^{(k-1)}\}$ は非負対角行列で $\hat{U}^{(k-1)} = (-\hat{u}_{ij}^{(k-1)})$ は

$$0 \leq |\hat{u}_{ij}^{(k-1)}| \leq |a_{ij}^{(k-1)}|, \quad i < j$$

を満たす狭義上三角行列である。このことから、 $\hat{U}^{(k-1)}$ は $0 \leq |\hat{U}^{(k-1)}| \leq |U^{(k-1)}|$ である。この一般化された2段階前処理は今まで述べてきたすべての前処理を統一的に表記している。

3 収束定理

次に、収束定理について考察する。この節を通して $k = 1, 2$ とする。議論を簡単にするために、集合 N_i を $N_i = \{i+1, \dots, n\}$ とする。更に、各 $i < n$ に対して $A^{(k)}$ の狭義上三角部分の要素が非負である集合 N_i^+ と、その補集合 N_i^- をそれぞれ、 $N_i^{+(k-1)} = \{j \mid |a_{ij}^{(k-1)}| - \beta_i^{(k-1)}|\hat{u}_{ij}^{(k-1)}| \geq 0, j > i\}$ 、 $N_i^{-(k-1)} = N_i - N_i^{+(k-1)}$ とおく。また、各 $i < n$ に対して $l_{(k-1)} = \min_{j>i} |a_{ij}^{(k-1)}|/|\hat{u}_{ij}^{(k-1)}|$ とおく。

定義 3.1 正則な行列 $A \in \mathbf{Z}^{n \times n}$ が $A^{-1} \geq O$ ならば、 A を M 行列という。

定義 3.2 $n \times n$ 複素行列 $A = (a_{ij})$ の比較行列 $\langle A \rangle = (\alpha_{ij})$ が M 行列ならば、 A を H 行列という。ただし、 α_{ij} は

$$\alpha_{ii} = |a_{ij}|, \quad \alpha_{ij} = -|a_{ij}|, \quad i \neq j$$

である。

定理 3.3 行列 $A \in \mathbf{Z}^{n \times n}$ が M 行列であるための必要十分条件は $A\mathbf{u} > \mathbf{0}$ となる正ベクトル \mathbf{u} が存在することである。

補題 3.4 $A^{(k-1)}$ を H 行列とする。また, $\mathbf{v}^{(k-1)} = (v_1^{(k-1)}, \dots, v_n^{(k-1)})^T$ とする。各 $i < n$ に対して,

$$\beta_i^{(k-1)} = \begin{cases} \frac{v_i^{(k-1)} - \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}^{(k-1)}| v_j^{(k-1)} + 2 \sum_{j \in N_i^-(k-1)} |a_{ij}^{(k-1)}| v_j^{(k-1)}}{\sum_{j=1}^n \sum_{s=i+1}^n |\hat{u}_{is}^{(k-1)}| a_{sj}^{(k-1)} |v_j^{(k-1)} - 2 \sum_{j \in N_i^+(k-1)} |\hat{u}_{ij}^{(k-1)}| v_j^{(k-1)}}, & \text{if } \sum_{j=i+1}^n |\hat{u}_{ij}^{(k-1)}| \neq 0, \\ \infty, & \text{if } \sum_{j=i+1}^n |\hat{u}_{ij}^{(k-1)}| = 0. \end{cases}$$

とおく。このとき, 各 $i < n$ に対して

$$\sum_{j=1}^n \sum_{s=i+1}^n |\hat{u}_{is}^{(k-1)}| a_{sj}^{(k-1)} |v_j^{(k-1)} > 2 \sum_{j \in N_i^+(k-1)} |\hat{u}_{ij}^{(k-1)}| v_j^{(k-1)}$$

ならば, $\beta_i^{(k-1)} > |a_{i(i+1)}^{(k-1)}| / |\hat{u}_{i(i+1)}^{(k-1)}|$ である。

証明 $A^{(k-1)}$ が H 行列であることより, すべての i に対して

$$v_i^{(k-1)} - \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}^{(k-1)}| v_j^{(k-1)} > 0,$$

を満たす正ベクトル $\mathbf{v}^{(k-1)}$ が存在する。このとき, ある $i < n$ に対して

$$\sum_{j=i+1}^n |\hat{u}_{ij}^{(k-1)}| = 0$$

ならば, $\beta_i^{(k-1)} > |a_{i(i+1)}^{(k-1)}| / |\hat{u}_{i(i+1)}^{(k-1)}|$ であることは簡単に分かる。次に, ある $i < n$ に対して

$$\sum_{j=i+1}^n |\hat{u}_{ij}^{(k-1)}| \neq 0$$

かつ

$$\sum_{j=1}^n \sum_{s=i+1}^n |\hat{u}_{is}^{(k-1)}| a_{sj}^{(k-1)} |v_j^{(k-1)} > 2 \sum_{j \in N_i^+(k-1)} |\hat{u}_{ij}^{(k-1)}| v_j^{(k-1)}$$

と仮定すると,

$$\begin{aligned}
& |\hat{u}_{il}^{(k-1)}| \left\{ v_i^{(k-1)} - \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}^{(k-1)}| v_j^{(k-1)} + 2 \sum_{j \in N_i^-(k-1)} |a_{ij}^{(k-1)}| v_j^{(k-1)} \right\} \\
& - |a_{il}^{(k-1)}| \left\{ \sum_{j=1}^n \sum_{s=i+1}^n |\hat{u}_{is}^{(k-1)}| a_{sj}^{(k-1)} |v_j^{(k-1)} - 2 \sum_{j \in N_i^+(k-1)} |\hat{u}_{ij}^{(k-1)}| v_j^{(k-1)} \right\} \\
= & |\hat{u}_{il}^{(k-1)}| \left\{ v_i^{(k-1)} - \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}^{(k-1)}| v_j^{(k-1)} \right\} \\
& + |a_{il}^{(k-1)}| \left[\sum_{s=i+1}^n |\hat{u}_{is}^{(k-1)}| \left\{ v_s^{(k-1)} - \sum_{j=1, j \neq s}^n |a_{sj}^{(k-1)}| v_j^{(k-1)} \right\} \right] \\
& + 2 |\hat{u}_{il}^{(k-1)}| \sum_{j \in N_i^-(k-1)} \left\{ |a_{ij}^{(k-1)}| - \frac{|a_{il}^{(k-1)}|}{|\hat{u}_{il}^{(k-1)}|} |\hat{u}_{ij}^{(k-1)}| \right\} v_j^{(k-1)} > 0.
\end{aligned}$$

が成立する。したがって、ある $i < n$ に対して

$$\begin{aligned}
& |\hat{u}_{il}^{(k-1)}| \left\{ v_i^{(k-1)} - \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}^{(k-1)}| v_j^{(k-1)} + 2 \sum_{j \in N_i^-(k-1)} |a_{ij}^{(k-1)}| v_j^{(k-1)} \right\} \\
> & |a_{il}^{(k-1)}| \left\{ \sum_{j=1}^n \sum_{s=i+1}^n |\hat{u}_{is}^{(k-1)}| a_{sj}^{(k-1)} |v_j^{(k-1)} - 2 \sum_{j \in N_i^+(k-1)} |\hat{u}_{ij}^{(k-1)}| v_j^{(k-1)} \right\} > 0
\end{aligned}$$

を得る。これは、ある $i < n$ に対して

$$\frac{v_i^{(k-1)} - \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}^{(k-1)}| v_j^{(k-1)} + 2 \sum_{j \in N_i^-(k-1)} |a_{ij}^{(k-1)}| v_j^{(k-1)}}{\sum_{j=1}^n \sum_{s=i+1}^n |\hat{u}_{is}^{(k-1)}| a_{sj}^{(k-1)} |v_j^{(k-1)} - 2 \sum_{j \in N_i^+(k-1)} |\hat{u}_{ij}^{(k-1)}| v_j^{(k-1)}} > \frac{|a_{il}^{(k-1)}|}{|\hat{u}_{il}^{(k-1)}|},$$

を意味する。ゆえに、各 $i < n$ に対して

$$\sum_{j=1}^n \sum_{s=i+1}^n |\hat{u}_{is}^{(k-1)}| a_{sj}^{(k-1)} |v_j^{(k-1)} > 2 \sum_{j \in N_i^+(k-1)} |\hat{u}_{ij}^{(k-1)}| v_j^{(k-1)}$$

ならば、 $\beta_i^{(k-1)} > |a_{il}^{(k-1)}| / |\hat{u}_{il}^{(k-1)}|$ である。■

補題 3.5 $A^{(k-1)}$ を H 行列とする。また、 $\mathbf{v}^{(k-1)} = (v_1^{(k-1)}, \dots, v_n^{(k-1)})^T$ とする。このとき、 $0 \leq \beta_i^{(k-1)} < \beta_i^{\prime(k-1)}$ ($i < n$) に対して $A^{(k)}$ は H 行列である。

証明 $A^{(k-1)}$ が H 行列であることより, すべての i に対して

$$v_i^{(k-1)} - \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}^{(k-1)}| v_j^{(k-1)} > 0,$$

を満たす正ベクトル $\mathbf{v}^{(k-1)}$ が存在する. $i < n$ に対して $\{A^{(k)} \mathbf{v}^{(k-1)}\}_i$ をベクトル $A^{(k)} \mathbf{v}^{(k-1)}$ の i 行目の成分とする. このとき, ある $i < n$ に対して

$$\sum_{j=i+1}^n |\hat{u}_{ij}^{(k-1)}| = 0$$

ならば,

$$\{A^{(k)} \mathbf{v}^{(k-1)}\}_i = v_i^{(k-1)} - \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}^{(k-1)}| v_j^{(k-1)} > 0$$

が成立する. いま, ある $i < n$ に対して

$$\sum_{j=i+1}^n |\hat{u}_{ij}^{(k-1)}| \neq 0$$

であると仮定する. このとき, ある $i < n$ に対して

$$\begin{aligned} \{A^{(k)} \mathbf{v}^{(k-1)}\}_i &= |1 - \beta_i^{(k-1)} \sum_{s=i+1}^n \hat{u}_{is}^{(k-1)} a_{si}^{(k-1)}| v_i^{(k-1)} \\ &\quad - \sum_{j=1}^{i-1} |a_{ij}^{(k-1)} - \beta_i^{(k-1)} \sum_{s=i+1}^n \hat{u}_{is}^{(k-1)} a_{sj}^{(k-1)}| v_j^{(k-1)} \\ &\quad - \sum_{j=i+1}^n |a_{ij}^{(k-1)} - \beta_i^{(k-1)} \sum_{s=i+1}^n \hat{u}_{is}^{(k-1)} a_{sj}^{(k-1)}| v_j^{(k-1)} \\ &\geq v_i^{(k-1)} - \beta_i^{(k-1)} \sum_{s=i+1}^n |\hat{u}_{is}^{(k-1)} a_{si}^{(k-1)}| v_i^{(k-1)} \\ &\quad - \sum_{j=1}^{i-1} |a_{ij}^{(k-1)}| v_j^{(k-1)} - \beta_i^{(k-1)} \sum_{j=1}^{i-1} \sum_{s=i+1}^n |\hat{u}_{is}^{(k-1)} a_{sj}^{(k-1)}| v_j^{(k-1)} \\ &\quad - \sum_{j=i+1}^n |a_{ij}^{(k-1)} - \beta_i^{(k-1)} \hat{u}_{ij}^{(k-1)}| v_j^{(k-1)} \\ &\quad - \beta_i^{(k-1)} \sum_{j=i+1}^n \sum_{s=i+1, s \neq j}^n |\hat{u}_{is}^{(k-1)} a_{sj}^{(k-1)}| v_j^{(k-1)} \\ &\geq v_i^{(k-1)} - \sum_{j=1}^{i-1} |a_{ij}^{(k-1)}| v_j^{(k-1)} \\ &\quad - \beta_i^{(k-1)} \sum_{j=1}^n \sum_{s=i+1, s \neq j}^n |\hat{u}_{is}^{(k-1)} a_{sj}^{(k-1)}| v_j^{(k-1)} \\ &\quad - \sum_{j=i+1}^n \left| |a_{ij}^{(k-1)}| - \beta_i^{(k-1)} |\hat{u}_{ij}^{(k-1)}| \right| v_j^{(k-1)} \end{aligned}$$

が成立する. ある $i < n$ に対して

$$0 \leq \beta_i^{(k-1)} \leq |a_{il}^{(k-1)}| / |\hat{u}_{il}^{(k-1)}|$$

ならば,

$$\begin{aligned} \{A^{(k)}\mathbf{v}^{(k-1)}\}_i &\geq v_i^{(k-1)} - \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}^{(k-1)}| v_j^{(k-1)} + \beta_i^{(k-1)} \sum_{j=i+1}^n |\hat{u}_{ij}^{(k-1)}| v_j^{(k-1)} \\ &\quad - \beta_i^{(k-1)} \sum_{j=1}^n \sum_{s=i+1, s \neq j}^n |\hat{u}_{is}^{(k-1)}| a_{sj}^{(k-1)} |v_j^{(k-1)}| \\ &= v_i^{(k-1)} - \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}^{(k-1)}| v_j^{(k-1)} \\ &\quad + \beta_i^{(k-1)} \sum_{s=i+1}^n |\hat{u}_{is}^{(k-1)}| \left\{ v_s^{(k-1)} - \sum_{j=1, j \neq s}^n |a_{sj}^{(k-1)}| v_j^{(k-1)} \right\} > 0 \end{aligned}$$

を得る. 更に, ある $i < n$ に対して

$$\sum_{j=1}^n \sum_{s=i+1}^n |\hat{u}_{is}^{(k-1)}| a_{sj}^{(k-1)} |v_j^{(k-1)}| \leq 2 \sum_{j \in N_i^{+(k-1)}} |\hat{u}_{ij}^{(k-1)}| v_j^{(k-1)}$$

かつ

$$\beta_i^{(k-1)} > |a_{il}^{(k-1)}| / |\hat{u}_{il}^{(k-1)}|$$

ならば,

$$\begin{aligned} \{A^{(k)}\mathbf{v}^{(k-1)}\}_i &\geq v_i^{(k-1)} - \sum_{j=1}^{i-1} |a_{ij}^{(k-1)}| v_j^{(k-1)} \\ &\quad - \beta_i^{(k-1)} \sum_{j=1}^n \sum_{s=i+1, s \neq j}^n |\hat{u}_{is}^{(k-1)}| a_{sj}^{(k-1)} |v_j^{(k-1)}| \\ &\quad - \sum_{j \in N_i^{+(k-1)}} \left\{ |a_{ij}^{(k-1)}| - \beta_i^{(k-1)} |\hat{u}_{ij}^{(k-1)}| \right\} v_j^{(k-1)} \\ &\quad + \sum_{j \in N_i^{-(k-1)}} \left\{ |a_{ij}^{(k-1)}| - \beta_i^{(k-1)} |\hat{u}_{ij}^{(k-1)}| \right\} v_j^{(k-1)} \\ &= v_i^{(k-1)} - \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}^{(k-1)}| v_j^{(k-1)} + 2 \sum_{j \in N_i^{-(k-1)}} |a_{ij}^{(k-1)}| v_j^{(k-1)} \\ &\quad - \beta_i^{(k-1)} \left\{ \sum_{j=1}^n \sum_{s=i+1}^n |\hat{u}_{is}^{(k-1)}| a_{sj}^{(k-1)} |v_j^{(k-1)}| - 2 \sum_{j \in N_i^{+(k-1)}} |\hat{u}_{ij}^{(k-1)}| v_j^{(k-1)} \right\} \\ &> 0, \end{aligned}$$

を得る. また, ある $i < n$ に対して

$$\sum_{j=1}^n \sum_{s=i+1}^n |\hat{u}_{is}^{(k-1)} a_{sj}^{(k-1)}| v_j^{(k-1)} > 2 \sum_{j \in N_i^{+(k-1)}} |\hat{u}_{ij}^{(k-1)}| v_j^{(k-1)}$$

かつ

$$|a_{il}^{(k-1)}| / |\hat{u}_{il}^{(k-1)}| < \beta_i^{(k-1)} < \beta_i^{\prime(k-1)}$$

ならば, $\{A^{(k)} \mathbf{v}^{(k-1)}\}_i > 0$ を得る. ところで, $i = n$ に対して

$$\{A^{(k)} \mathbf{v}^{(k-1)}\}_n = |a_{nn}^{(k-1)}| v_n^{(k-1)} - \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{nj}^{(k-1)}| v_j^{(k-1)} > 0$$

である. したがって, 定理 3.3 より, $0 \leq \beta_i^{(k-1)} < \beta_i^{\prime(k-1)}$ ($i < n$) に対して $\langle A^{(k)} \rangle$ は M 行列である. すなわち, H 行列の定義から, $0 \leq \beta_i^{(k-1)} < \beta_i^{\prime(k-1)}$ ($i < n$) に対して $A^{(k)}$ は H 行列である. ■

定理 3.6 A を H 行列とする. このとき, $0 \leq \beta_i^{(k-1)} < \beta_i^{\prime(k-1)}$ ($i < n$) に対して $A^{(2)}$ は H 行列である.

証明 補題 3.5 から, $0 \leq \beta_i^{(0)} < \beta_i^{\prime(0)}$ ($i < n$) に対して, $A^{(1)}$ は H 行列である, 更に, $A^{(1)}$ が H 行列であるから, $0 \leq \beta_i^{(1)} < \beta_i^{\prime(1)}$ ($i < n$) に対して $A^{(2)}$ もまた H 行列である. ■

4 移流拡散問題への応用

2 段階前処理付 Gauss-Seidel 法 (P2) の有効性を確かめるために 1 次反応を伴う定常移流拡散問題の境界要素解析に適用する. 更に, 1 次反応を伴う非定常移流拡散方程式のラプラス変換解法にも適用を試みる. また, 比較のために $I + BU$ 型前処理付 Gauss-Seidel 法 (P1), Gauss-Seidel 法 (G.S.), BiCGStab 法, Gauss 消去法も試みる. 収束判定基準は $\|\mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{x}^{(k)}\| / \|\mathbf{x}^{(k+1)}\| \leq 10^{-6}$ とした.

4.1 1 次反応を伴う定常移流拡散問題

2 次元領域 $\Omega = (0, 1) \times (0, 1)$ 内の位置座標 $X = (x, y)$ における反応物質 A の成分濃度 $\phi_A = \phi_A(X)$ を表す 1 次反応を伴う定常移流拡散方程式

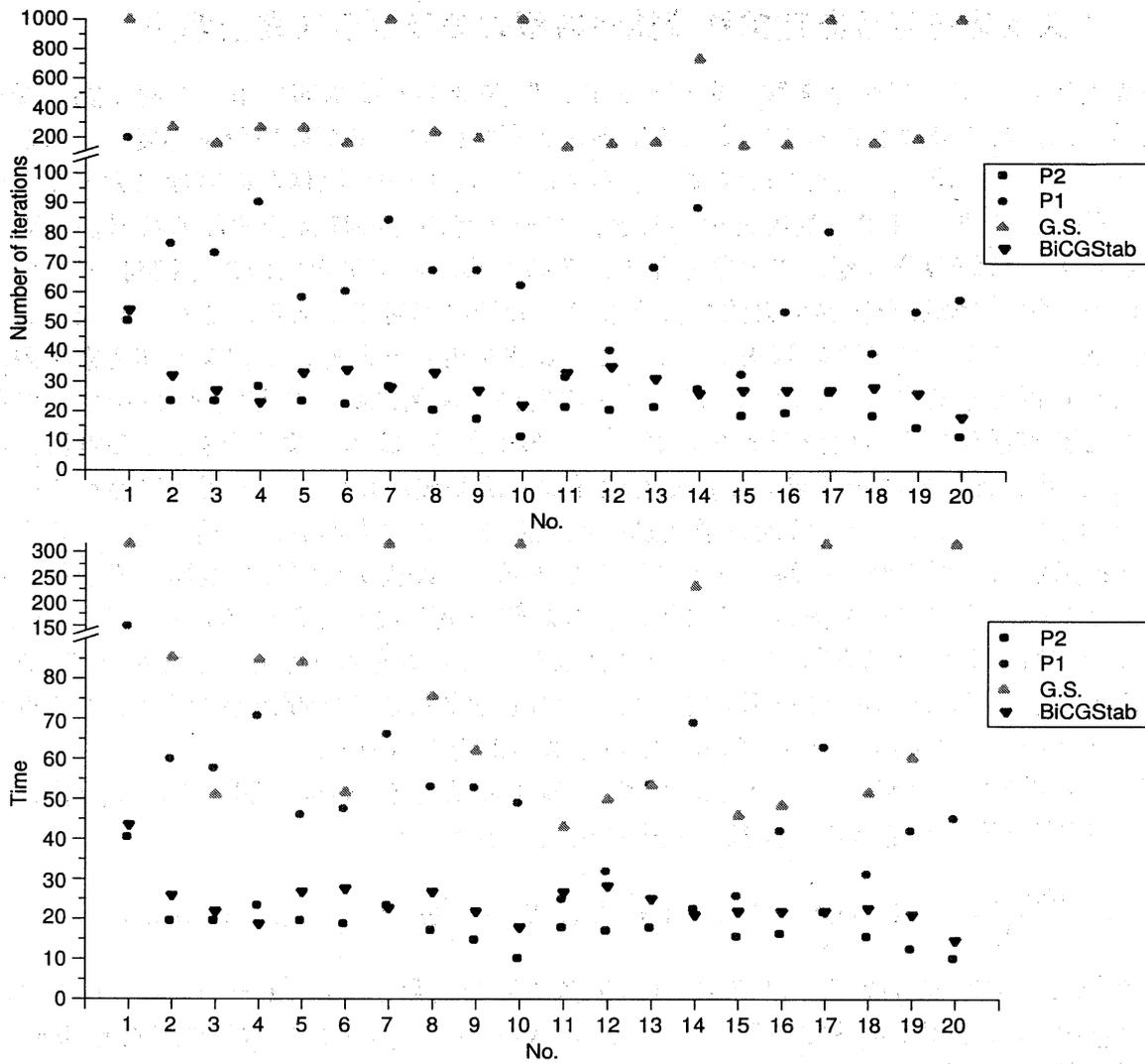
$$L[\phi] = -D\nabla^2 \phi_A + \mathbf{v} \cdot \nabla \phi_A + k\phi_A = 0 \quad \text{in } \Omega$$

を境界要素法で離散化する. ここで, D は拡散係数, 流速は一定の系について取り扱い $\mathbf{v} = (v_x, v_y)$ で表わす. k は 1 次反応速度定数である. 境界条件を

$$\phi(0, y) = \sin(\pi y)$$

$$\phi(x, 0) = \phi(1, y) = \phi(x, 1) = 0.$$

とする. 要素数 1280 の場合の数値結果を図 1 に示す.



No	v_x	v_y	k	No	v_x	v_y	k
1	0	0	10^{-4}	11	0	0	100
2	10	0	0	12	10	0	100
3	40	0	0	13	40	0	100
4	80	0	0	14	80	0	100
5	0	10	0	15	0	10	100
6	0	40	0	16	0	40	100
7	0	80	0	17	0	80	100
8	10	10	0	18	10	10	100
9	40	40	0	19	40	40	100
10	80	80	0	20	80	80	100

図 1: 要素数 1280 の場合の反復回数と計算時間の比較

4.2 1次反応を伴う非定常移流拡散方程式のラプラス変換解法

境界要素法を用いて非定常解析を行うとき、時間依存の基本解を用いて解く際に問題となるのは、時間発展を追って行くために各ステップにおいて領域積分を必要とすることである。つまり、積分方程式中に含まれる領域積分の扱い方が数値解の精度に大きく影響する。特に、小さな時間分割幅を用いると、ソース点周辺の被積分関数の特異性が顕著になるため、数値積分が極めて困難となる。そのため、非定常現象のごく初期、すなわち $t=0$ の近傍での解析を境界要素法で行う事は一般的に不可能である。これを解決する一つの方法としてラプラス変換解法がある。この解法を用いると極めて初期の非定常現象が精度よく解析できる [17]。しかしながら、この解法の使用に際して問題となるのは、汎用性のある数値逆ラプラス変換公式を必要とする事である。岡本と澤見 [18] は、細野による変換公式 [8] が有限要素法領域においても境界要素法領域においても汎用性に優れていることを示した。したがって、移流拡散問題の数値解法にこの変換公式を用いる。このラプラス変換解法は任意の時間の解を得ることができるが、数値逆ラプラス変換公式を用いるためには1つの非定常解を得るために10～20数個の級数項の計算が必要である。この事は前述の個数回分の行列方程式を解かなければならない事を意味する。したがって、要素数が増大すると Gauss 消去法を用いていたのでは必然的に計算時間が増大する。この点を克服するために、2段階前処理付 Gauss-Seidel 法の適用を試みる。

まず、ラプラス変換解法について説明する。解析領域を Ω 、時間区間を $I = [t_0, t_f]$ とする。1次反応を伴う非定常移流拡散方程式は次式で与えられる。

$$\frac{\partial \phi(X, t)}{\partial t} - \nabla \cdot (D \nabla \phi(X, t)) + \mathbf{v} \cdot \nabla \phi(X, t) + k \phi(X, t) = 0 \quad \text{in } \Omega \times I \quad (5)$$

ここで、 $\phi(X, t)$ は成分濃度、 t は時間、 D は拡散係数で定数とする。 $\mathbf{v} = (v_1, \dots, v_N)$ は流速、 $k (\geq 0)$ は反応速度定数である。また、 $X = X(x_1, \dots, x_N)$ は N 次元座標を意味する。

境界条件は Γ_1 上で濃度が、 Γ_2 上で質量流束が与えられているものとする。

$$\begin{aligned} \phi(X, t) &= \bar{\phi}(t) && \text{on } \Gamma_1 \\ q(X, t) &= D \frac{\partial \phi(X, t)}{\partial n} = \bar{q}(t) && \text{on } \Gamma_2 \end{aligned} \quad (6)$$

ここで、 $\bar{\phi}$ と \bar{q} は既知であり、 n は外向き単位法線ベクトルである。初期条件は $t = t_0$ において

$$\phi(X, t_0) = \phi_0(X) \quad \text{in } \Omega$$

のように与えられるものとする。次に問題の時間依存性を取り除くために時間変数 t に関してラプラス変換を行うと次式

$$-D \nabla^2 \Phi + \mathbf{v} \cdot \nabla \Phi + (s + k) \Phi - \Phi_0 = 0 \quad \text{in } \Omega \quad (7)$$

を得る。ここで、 $\Phi = \Phi(X, s)$ は次式で表される $\phi(X, t)$ のラプラス変換形である。

$$\Phi(X, s) = L[\phi(X, t)] = \int_0^\infty e^{-st} \phi dt. \quad (8)$$

ただし, s は変換パラメータである. 以下簡単化のため, 初期値 Φ_0 が零の場合について取り扱うものとし, 式 (7) を書き改めると次式となる.

$$-D\nabla^2\Phi + \mathbf{v} \cdot \nabla\Phi + (s+k)\Phi = 0 \quad \text{in } \Omega \quad (9)$$

式 (6) の境界条件をラプラス変換形で表わすと

$$\begin{aligned} \Phi(X, s) &= \bar{\Phi}(X, s) \quad \text{on } \Gamma_1 \\ Q(X, s) &= \bar{Q}(X, s) \quad \text{on } \Gamma_2 \end{aligned}$$

となる. ここで, $Q(X, s)$ はラプラス変換された $q(X, t)$ を表わしている. ラプラス変換解法の計算手順を示す.

1. 問題の時間依存性を取り除くために, 時間変数 t に関してラプラス変換を行う.
2. プラス変換面において境界要素法による離散化を行う.
3. 任意の時間に関して, 数値逆ラプラス変換に必要な回数の境界要素行列を解く.
4. 数値逆ラプラス変換公式を用いて元の物理平面に変換する.

本論文では境界要素として一定要素を用いた.

逆ラプラス変換は, 次式で示す細野による数値逆ラプラス変換公式"FILT"を用いる.

$$f_{ec}(t, \sigma) = \frac{e^\sigma}{t} \left(\sum_{m=1}^{\lambda-1} F_m + \frac{1}{2^{\mu+1}} \sum_{\nu=0}^{\mu} A_{\mu,\nu} F_{\lambda+\nu} \right) \quad (10)$$

ここで,

$$F_m = (-1)^m \text{Im} \left[F \left(\frac{\sigma + i(n-0.5)\pi}{t} \right) \right] \equiv (-1)^m \text{Im}[F(s)] \quad (11)$$

$$A_{\mu,\mu} = 1 \quad (12)$$

$$A_{\mu,\nu-1} = A_{\mu,\nu} + \binom{\mu+1}{\nu} \quad (13)$$

である. f_{ec} は近似原関数, $F = F(s)$ はラプラス変換された像関数, $i = \sqrt{-1}$, Im は虚数部を意味する. また, σ はパラメータ, λ と μ は打ち切り項数である. 本論文では, $\lambda = 10$, $\mu = 5$, $\sigma = 5.0$ を用いた.

いま, 境界条件を

$$\begin{aligned} \phi(0, y, t) &= 1, \quad \phi(0, y, t) = 0 \\ \partial\phi(x, 0, t)/\partial y &= \partial\phi(x, 1, t)/\partial y = 0, \end{aligned}$$

初期条件を, $\phi(x, y, 0) = 0$ とする. また, 時刻 $t = 0.1$, $D = 1$ とする. この場合の各手法の各反復回数のグラフと各計算時間の積上げグラフを図 2~5 示す.

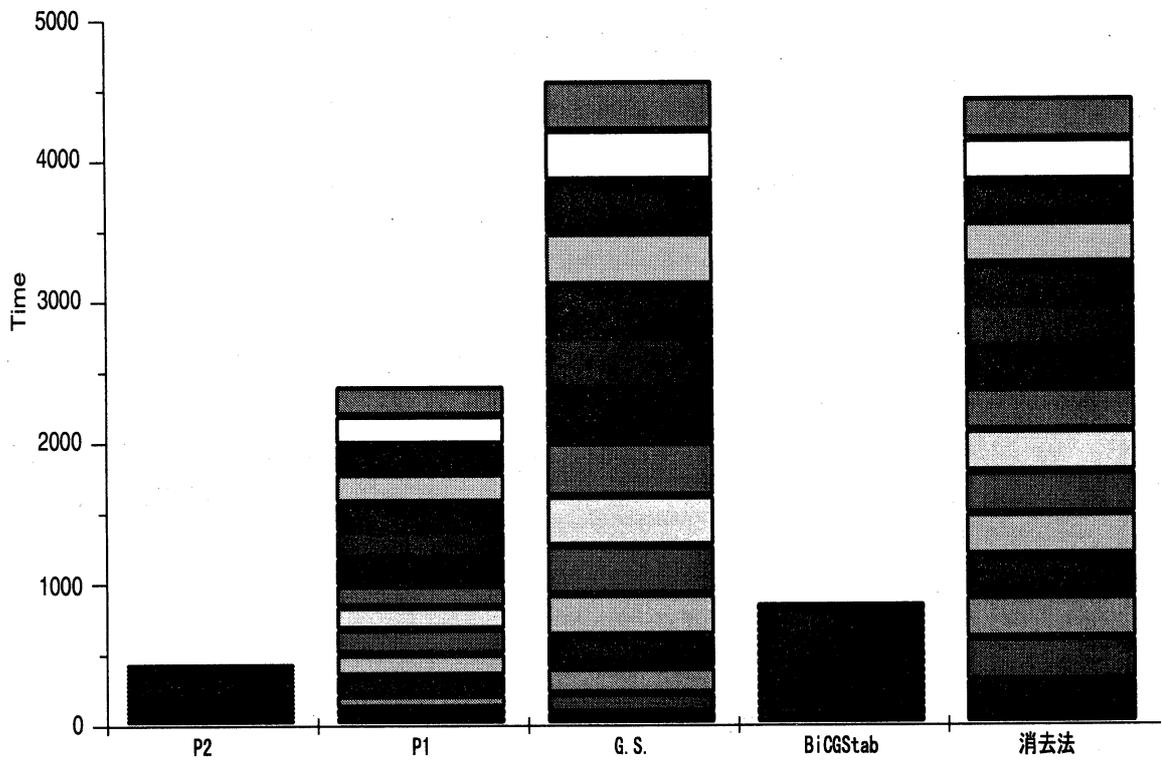
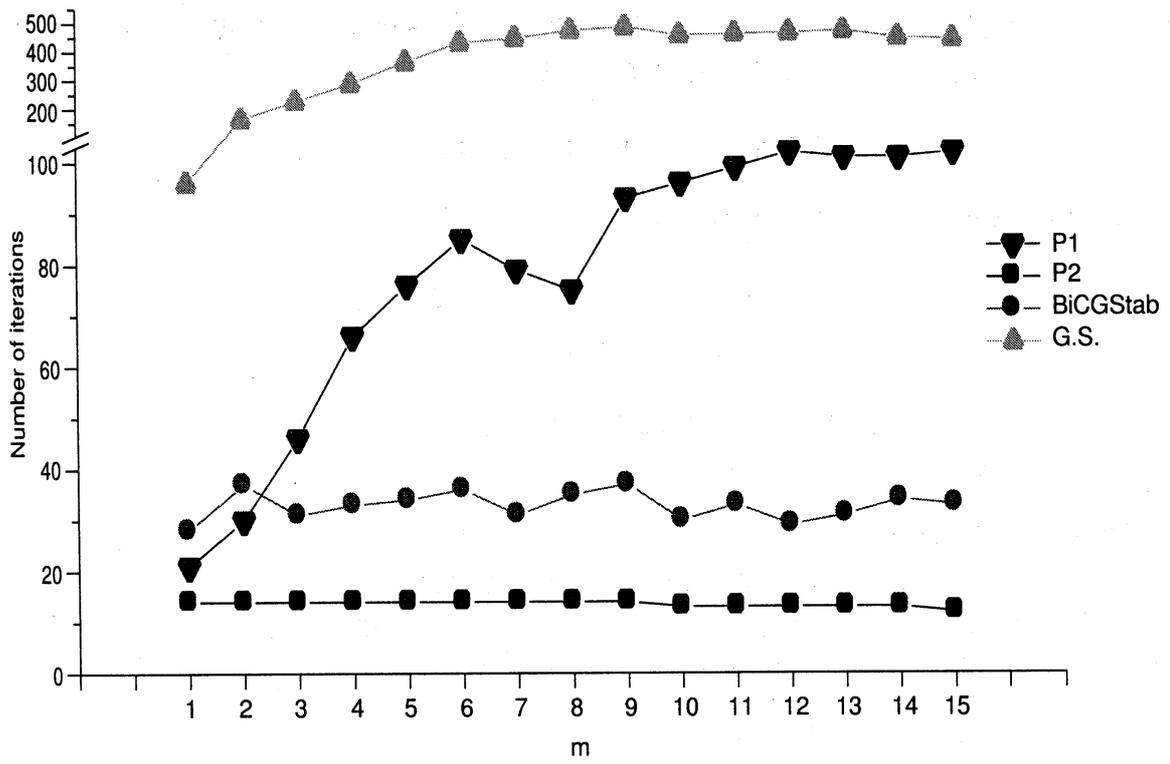


図 2: $v_x = 0, v_y = 0, \kappa = 0$ の場合

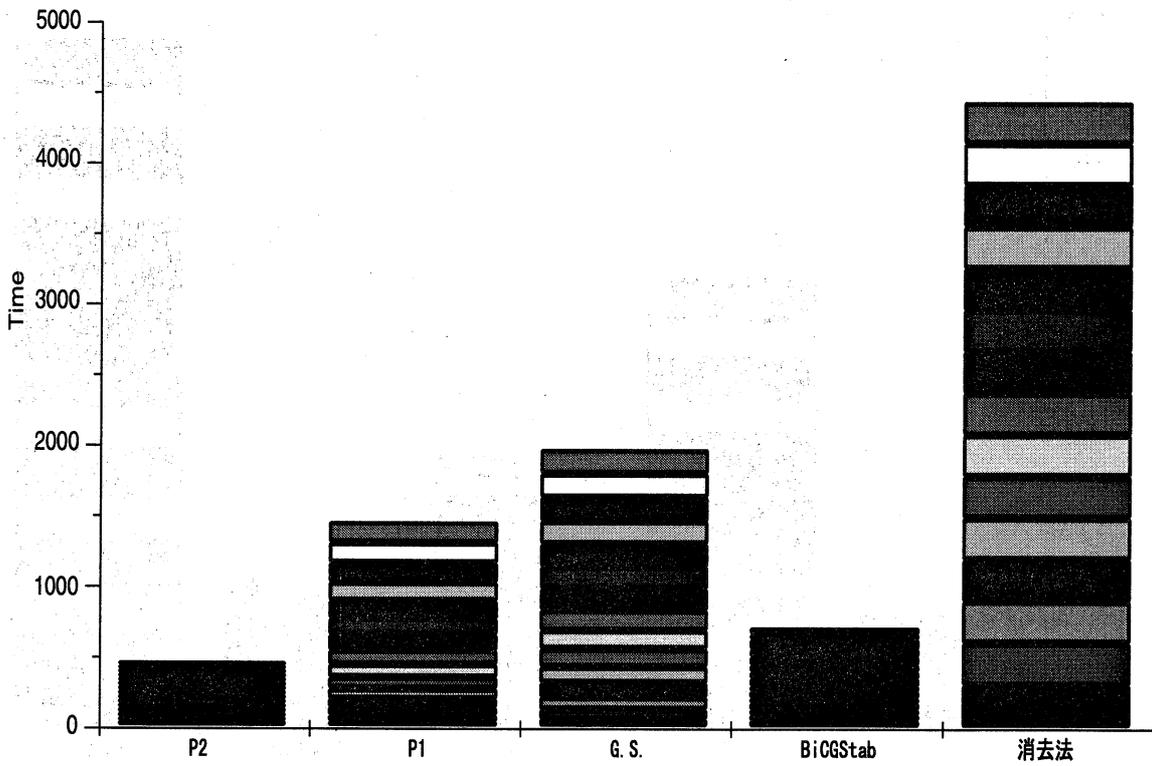
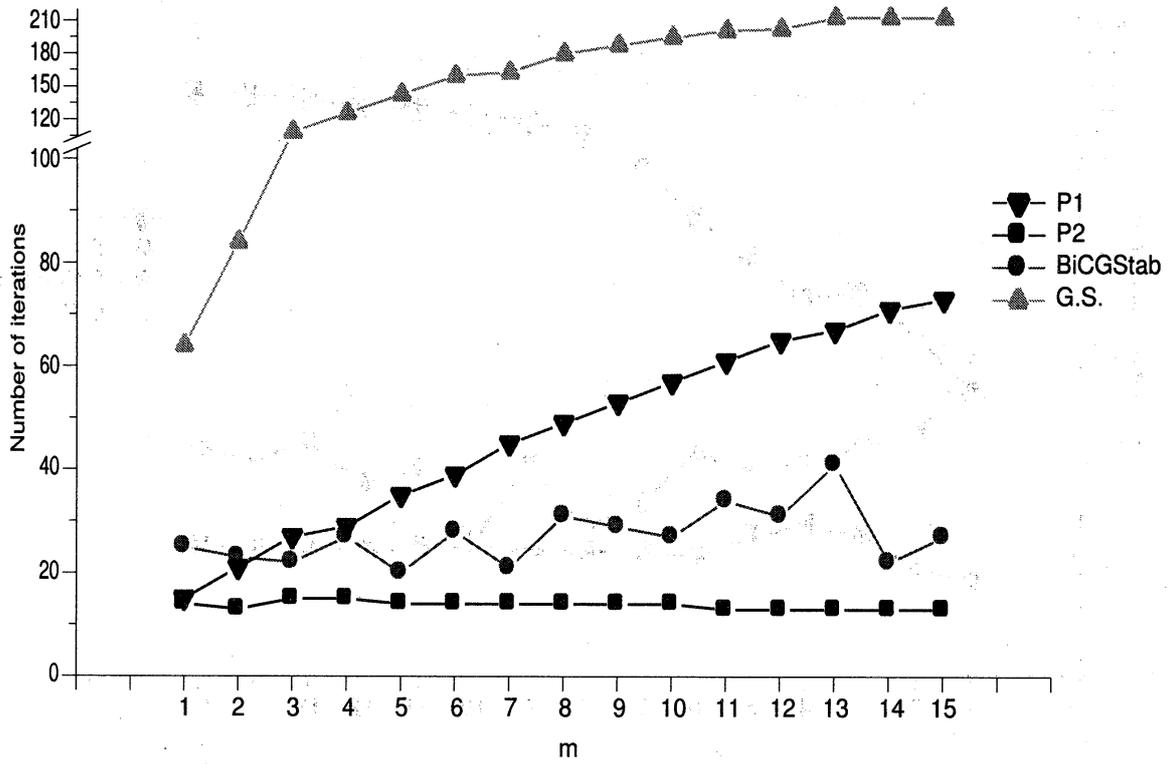


図 3: $v_x = 0, v_y = 0, \kappa = 100$ の場合

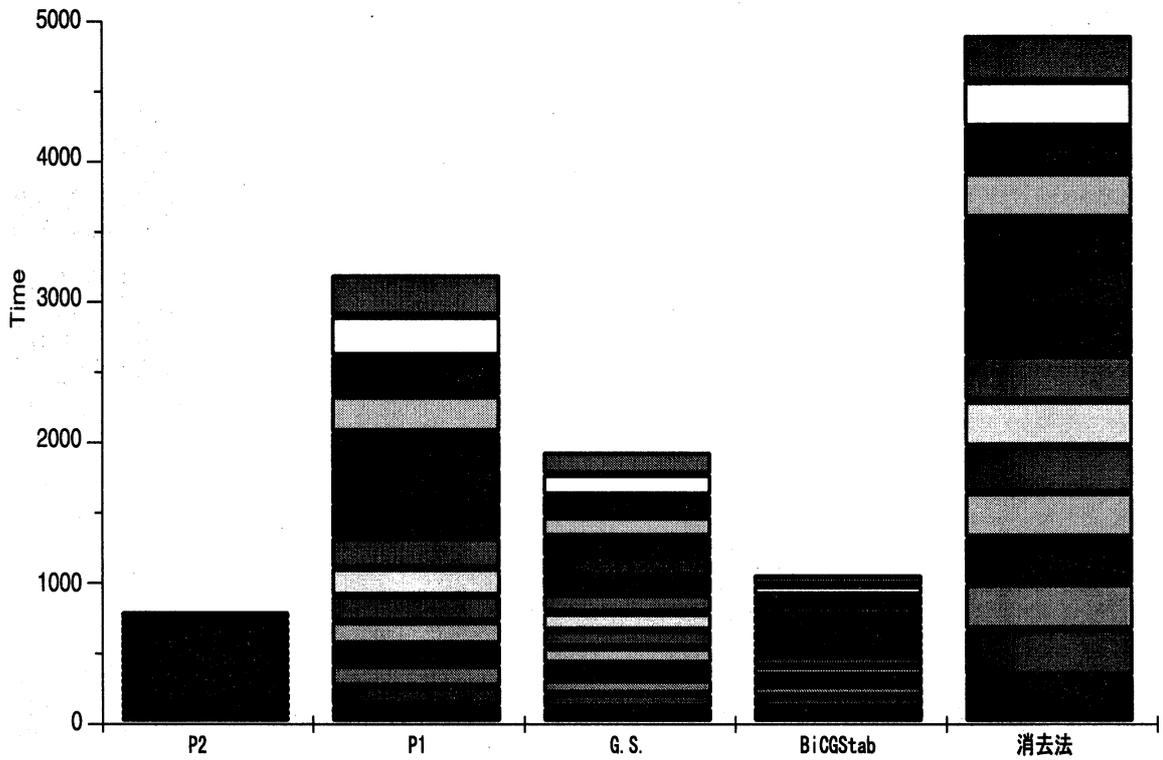
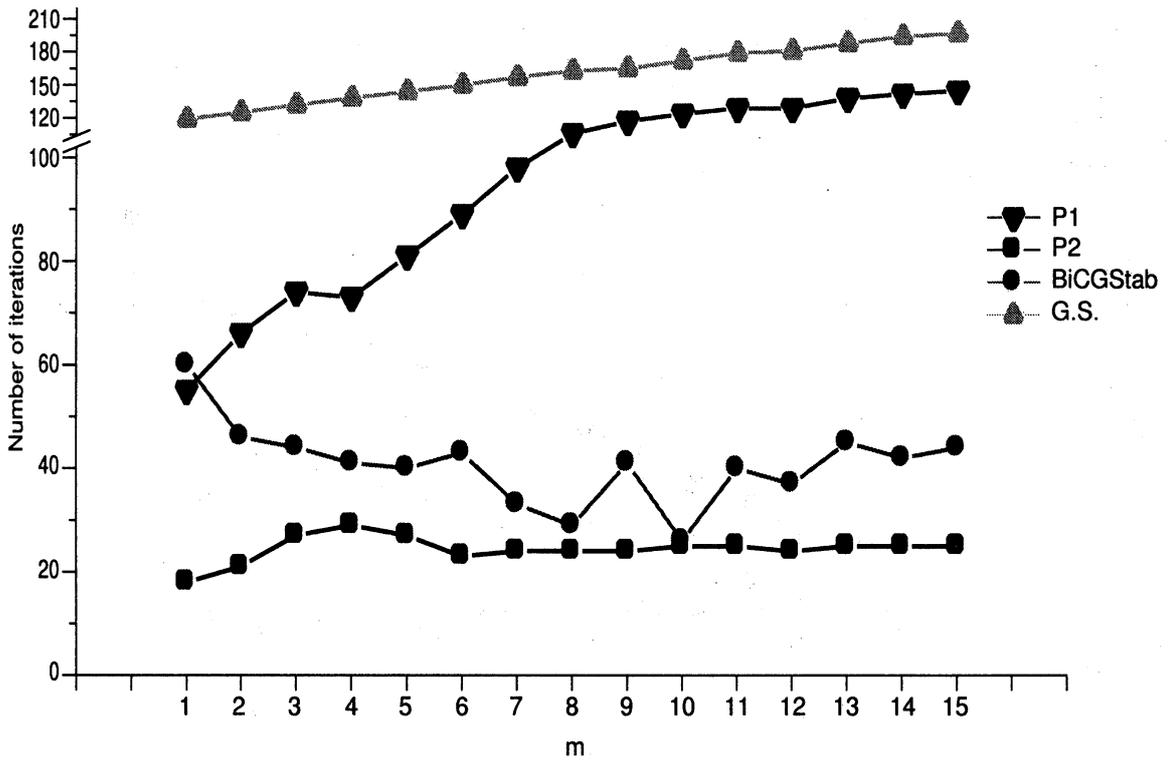


図 4: $v_x = 0, v_y = 40, \kappa = 0$ の場合

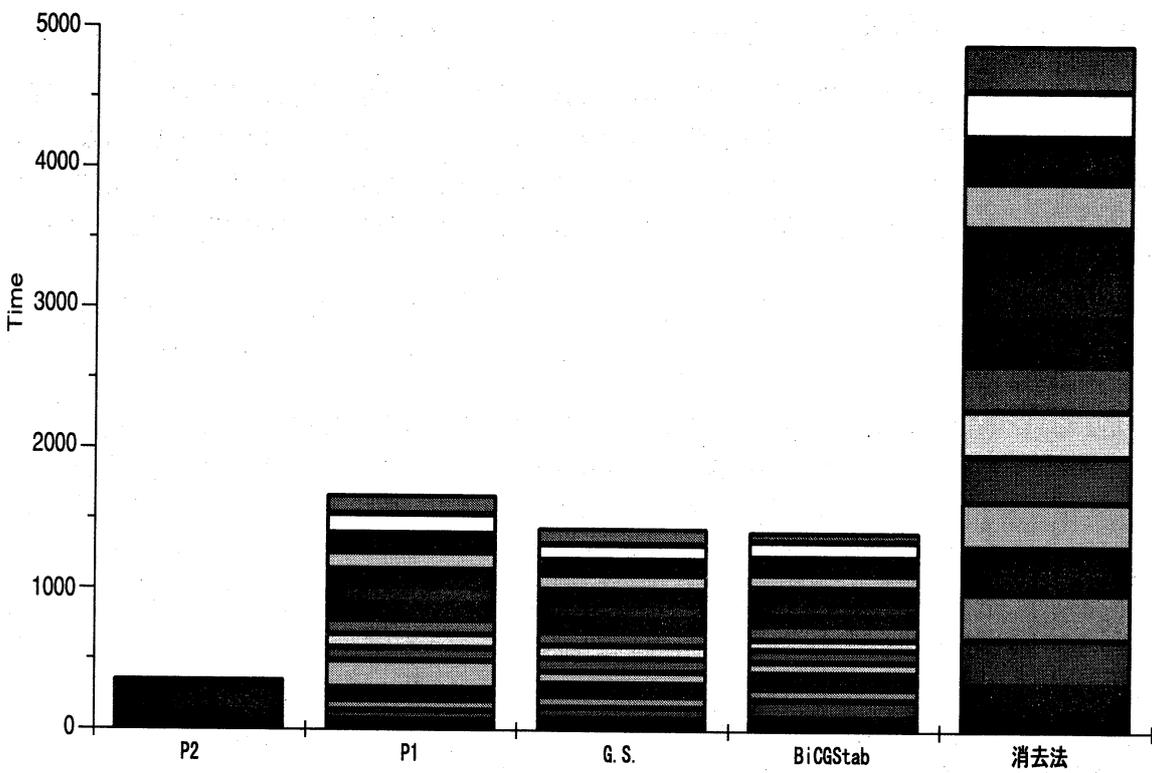
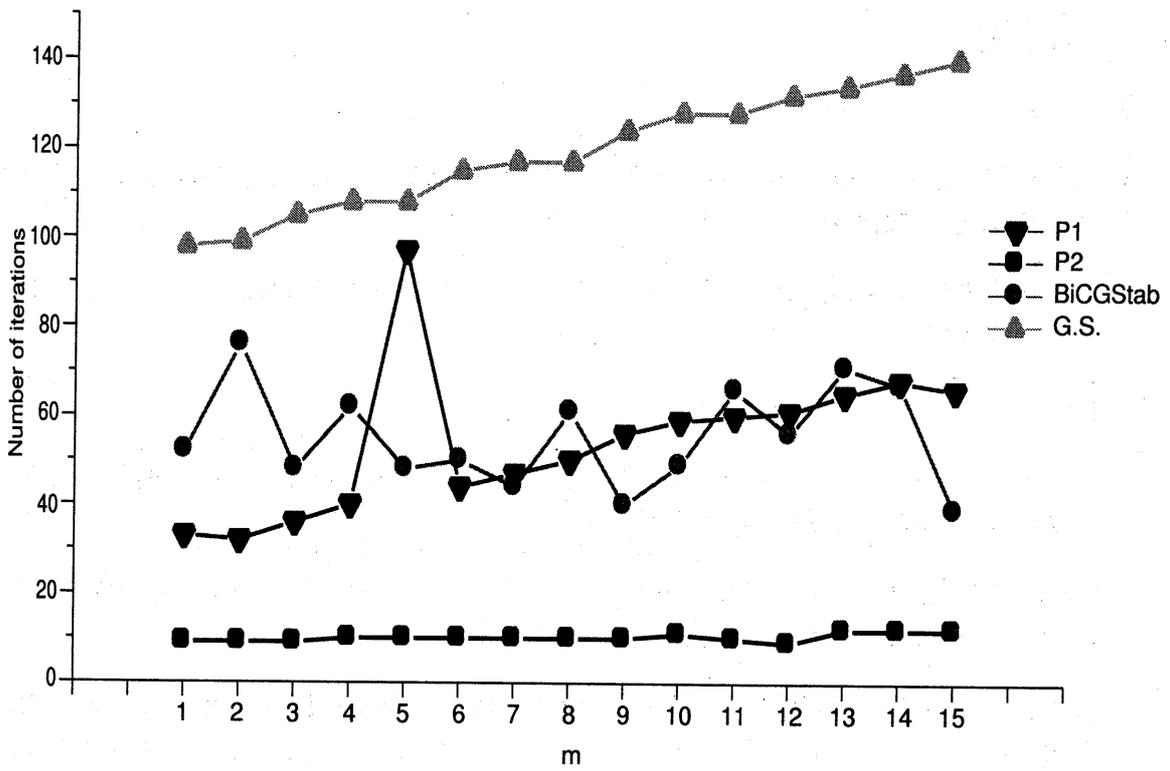


図 5: $v_x = 40, v_y = 40, \kappa = 0$ の場合

4.3 まとめ

図1から以下のことが分かる.

- 2段階前処理付 Gauss-Seidel 法は $I + BU$ 型前処理付 Gauss-Seidel 法で生ずる反復回数の大きな振動を押さえることに成功している.
- 2段階前処理付 Gauss-Seidel 法は, ほとんどの場合 BiCGStab 法よりも少ない反復回数で収束する.

また, 図2~5から以下のことが分かる.

- $I + BU$ 型前処理付 Gauss-Seidel 法と通常の Gauss-Seidel 法は m が増加に比例して反復回数も増加する傾向にある.
- 2段階前処理付 Gauss-Seidel 法は m の増加に無関係にほぼ一定の反復回数であるが, BiCGStab 法は反復回数にばらつきがある.
- 反復法に関する計算時間では $I + BU$ 型前処理付反復法は図2と3では通常の Gauss-Seidel 法よりも少ないが図4と5では逆に多くなっている. しかし, 2段階前処理付 Gauss-Seidel 法は通常の Gauss-Seidel 法よりも約2~9倍も速い.
- 2段階前処理付反復法は従来の手法と比較して安定した手法である.

以上のことから, 移流拡散問題の境界要素解析に対しては2段階前処理法の第1段階での前処理 $I + \bar{S}$ は第2段階での前処理 $I + BU^{(1)}$ の β_i の推定法に適合するような係数行列の操作となっていることが分かる. 特に, 1次反応を伴う非定常移流拡散方程式のラプラス変換解法に対しては, 2段階前処理付 Gauss-Seidel 法は有効な方法であることが分かる.

5 結論

1992年に A.D.Gunawardena らによって $I + S$ 型前処理法が提案されてから, 薄井らは $I + S$ 型を改良した $I + U$ 型前処理法を提案した. そして, 我々はそれらの前処理行列にパラメータを付加した $I + BS$ 型と $I + BU$ 型を提案した. 更に, 我々はこれらの前処理を組み合わせた $I + B\hat{U}$ 型2段階前処理法を提案した(図6). これらはすべて反復法として Gauss-Seidel 法を用いている. 今回我々は $I + BU$ 型前処理付 Gauss-Seidel 法に対し従来まではある条件を持つ正則な優対角 Z 行列である収束範囲を H 分離を用いることでこの収束範囲をある条件を持つ H 行列であることに拡張した. 更に, この型の前処理化行列 $A^{(BU)}$ の生成には $O(n^3)$ の演算が必要であるが, この問題点を克服するために, 我々は反復計算実行中に対角項以外の前処理を行うアルゴリズムを開発し, その結果, 演算量を $O(n^2)$ に減少することに成功した.

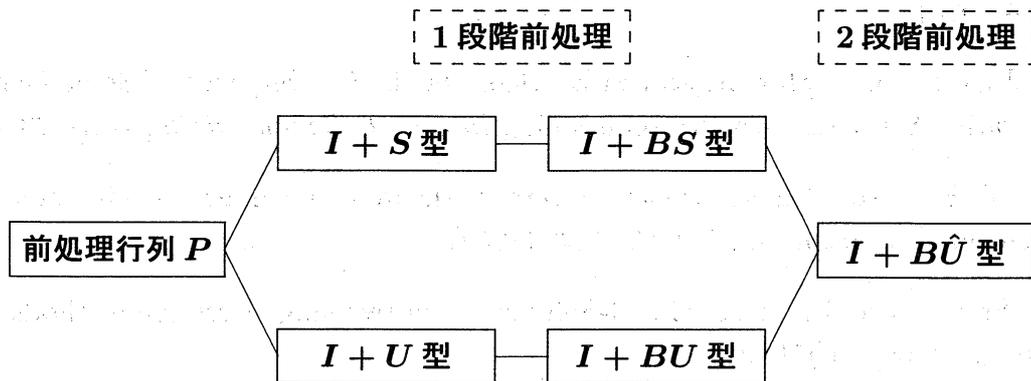


図 6: 前処理法

そして、数値実験によって 1 次反応を伴う定常移流拡散問題の境界要素解法で生じる密な係数行列に対して我々の提案した $I + BU$ 型前処理付 Gauss-Seidel 法は Gauss-Seidel 法よりは良い結果を得ることができた。しかしながら、流速等の値によっては反復回数に大きなばらつきがあることが分かった。そこで、我々はこの問題を克服するために新しい前処理法として従来の前処理行列を組み合わせた $I + B\hat{U}$ 型 2 段階前処理法を提案した。これにより、1 次反応を伴う定常移流拡散問題の境界要素解法に対して我々の 2 段階前処理付 Gauss-Seidel 法は $I + BU$ 型前処理付 Gauss-Seidel 法にあった反復回数の大きなばらつきを押さえることに成功した。

更に、2 段階前処理付 Gauss-Seidel 法をラプラス変換解法による 1 次反応を伴う非定常移流拡散問題の境界要素解法に適用してみたところ、1 つの非定常解を得るために生じる複数個の密な複素行列方程式に対してほぼ一定の反復回数で解くことができた。以上のことから 2 段階前処理付 Gauss-Seidel 法は移流拡散問題の境界要素解法には有効な手法であることが分かった。

今後の課題として、我々は β_i の推定法が適合するように係数行列の操作をする 2 段階前処理法を提案したが、別の方法として β_i の新しい推定法の開発がある。この推定法として係数行列の行列ノルムから推定する方法を現在開発中である。また、前処理法の並列計算機への適用がある。

参考文献

- [1] O.Axelsson and G.Lindskog, On the rate of convergence of the preconditioned conjugate gradient method, *Numer. Math.*,48:499-523(1986).
- [2] D.J.Evans, The Use of Pre-conditioning in Iterative Methods for Solving Linear Equations with Symmetric Positive Definite Matrices, *J. Inst. Maths Applics*, 4:295-

- 314(1968).
- [3] D.J.Evans, M.M.Martins and M.E.Trigo, On the Convergence of Some Generalized Iterative Methods with Preconditioning, *Intern. J. Compt. Math.*, 44:19-28(1992).
 - [4] K. Y. Fan, Topological proofs for certain theorems on matrices with non-negative elements, *Monatsh. Math.* 62:219-237(1958).
 - [5] A. Frommer and D. B. Szyld, H-Splittings and two-stage iterative methods, *Numer. Math.* 63:345-356(1992).
 - [6] A.D.Gunawardena, S.K.Jain and L.Snyder, Modified Iterative Methods for Consistent Linear Systems, *Linear algebra Appl.* 154-156:123-143(1991).
 - [7] L.A.Hageman and D.M.Young, Applied Iterative Methods, *Academic Press*(1981).
 - [8] 細野敏夫, 数値ラプラス変換, 電気学会論文誌 A, 99:494-500(1979).
 - [9] K.R.James, Convergence of Matrix Iterations Subject to Diagonal Dominance, *SIAM J. Numer. Anal.* 10:478-484(1973).
 - [10] K.R.James and W.Riha, Convergence Criteria for Successive Overrelaxation, *SIAM J. Numer. Anal.* 12.2April:137-143(1975).
 - [11] T.Kohno, H.Niki and M.Usui, Multi-step Preconditioned Iteration method for Non-symmetric Linear Systems, *Int. J. Compt. Math.*,56:177-184(1995).
 - [12] T.Kohno, H.Kotakemori, H.Niki and M.Usui, Improving Modified Gauss-Seidel Method for Z-matrices, *Linear Algebra and its Applications*,267:113-123(1997).
 - [13] H.Kotakemori, H.Niki, N.Okamoto, Accelerated iterative method for Z-matrices, *Int. J. Compt. Math.*,75:87-97(1996).
 - [14] H. Kotakemori, H. Niki and N. Okamoto, A generalization of the adaptive Gauss-Seidel method for Z-matrices, *Int. J. Compt. Math.*, 64:317-326(1997).
 - [15] H. Kotakemori, H. Niki and N. Okamoto, Convergence of a preconditioned iterative method for H-matrices , *J. Comput. Appl. Math.* 83:115-118(1997).
 - [16] 仁木 滉, 河野敏行, 楽しい反復法, 共立出版 (1998).
 - [17] 岡本直孝, 川原睦人, ラプラス変換および時間依存の基本解を用いる非定常境界要素解法の比較, 第2回数値流体力学シンポジウム講演論文集, 文部省重点領域研究「数値流体力学」実施グループ, 231-234(1988).

- [18] N. Okamoto and H. Sawami, Transient analysis by Laplace transform and combined finite and boundary element methods for convective diffusion problem, *Int. J. Numerical Method in Fluid Dynamics*, 21:955-966(1995).
- [19] M.Usui, H.Niki and T.Kohno, Adaptive Gauss-Seidel Method for Linear Systems, *Int. J. Compt. Math.*,51:119-125(1994).
- [20] M.Usui, T.Kohno and H.Niki, On the Preconditioned SOR Method,*Intern. J. Compt. Math.*,59:123-130(1995).
- [21] 薄井正孝, 仁木滉, 小武守恒, 河野敏行, $(I + \beta U)$ 型前処理付 Gauss Seidel 法の収束定理, 日本応用数学会論文誌, 6:307-316(1996).
- [22] R.S.Varga, *Matrix Iterative Analysis*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, .J.(1962).
- [23] 山本哲朗, 数値解析入門, サイエンス社、現代数学への入門=14(1976)
- [24] D.M.Young, *Iterative solution of large linear systems*, Academic Press(New York)(1971).