

# 航空宇宙技術研究所報告

TECHNICAL REPORT OF NATIONAL AEROSPACE LABORATORY

TR-1139

多元連立1次方程式に対する反復計算法の改良  
について

西村英明

1992年2月

航空宇宙技術研究所  
NATIONAL AEROSPACE LABORATORY

# 多元連立1次方程式に対する反復計算法の改良 について\*

西村英明<sup>\*1</sup>

## Improvements for Obtaining Iterative Solutions of Large Linear Systems

Hideaki NISHIMURA

### Abstract

Improvements are presented for three iterative methods used for obtaining solutions of large sets linear equations having symmetric, positive definite, yet sparse coefficient matrices. The investigated iterative methods are the incomplete approximate factorization procedure, conjugate gradient method and Chebyshev semi-iterative method.

Boundary-value problems of three-dimensional discretized elliptic differential equations are solved with these methods, with the calculated results being subsequently compared using the resultant convergent rate.

**Keywords** : Sparse Matrix, Incomplete Approximate Factorization Procedure, Conjugate Gradient Method, Chebyshev Semi-iterative Method, Elliptic Differential Equation

### Улучшение итерационных решений для больших линейных систем

Нисимура Хидэаки

### Реферат

Матрицы коэффициента, построенные большими системами линейных уравнений, которые получатся при дискретизации для эллиптических уравнений, имеют такие основные свойства, как разрежённость, структурная симметрия и положительное определение.

Способ разрешить эти большие системы линейных уравнений не всегда единствен, но зависит от типа матрицы, поэтому важно установить целесообразнейший метод

---

\*平成3年11月11日 受付 (received 11 November 1991)  
\*1原動機部 (Aeroengine Division)

для заданных систем уравнений.

В настоящей статье изложено усовершенствование описанного ниже три итерационных метода решить системы линейных уравнений с большой, симметрической, положительно-определённой но разрежённой матрицей коэффициента;

- 1) улучшение метода неполной факторизации,
- 2) улучшение метода сопряжённого градиента,
- 3) улучшение итерационного метода Чебишева

Применим эти итерационные методы к численному решению для задач предельных краевых значений эллиптических уравнений и их взаимное сравнение вычисленных результатов было сделано с учётом скорости сходимости.

**слова ключа:** разрежённая, симметрическая, положительно-определённая матрица, метод неполной факторизации, метод сопряжённого градиента, Чебишев итерационный метод, эллиптическое дифференциальное уравнение

## 概 要

楕円型偏微分方程式の差分近似により得られた多元連立 1 次方程式の行列表示式は、行列の要素数が非常に少なく、対称性を有し、線形正定値であることが特徴である。この多元連立 1 次方程式の解法は、唯一つ存在するわけではなく、行列の特性に依存することが多い。したがってどの方法が最善であるかということを決めることは非常に重要である。

ここでは、より個性的な問題には、個性的特徴をもつ解法が著しい効果を発揮するという事に注目して、行列の要素数が非常に少なく、対称性を有し、線形正定値であることを特徴とする多元連立 1 次方程式を対象として下に示す三種の解法の改良法を述べる。

- 1) 不完全近似分割法,
- 2) 共役勾配法,
- 3) Chebyshev 準反復法。

さらに、これらの三種の方法によって解が得られる共通の三次元境界値問題をとりあげ計算を行い、これらの方法に特徴的な性質に注目して計算結果の比較、考察を行った。

## 1. 緒 言

多元連立 1 次方程式を計算機を利用して解く場合、係数行列の性質によっては収束が著しく遅いことや、さらには解が得られないことなどが生ずる。現在では解を得るための種々の方法が考えられており、かつ、その性質もかなり詳しく研究されている。したがって、どの方法を採用すれば良いかは事前にかなり詳しく検討できる。しかし、実際に計算を実行してみるとある方法では理論通

りには収束しないこと、また、解法が適していない場合には、計算が途中で発散し解が得られないこともある。一方、同じ係数行列にたいして別の方法を採用すると、容易に収束解が得られることがある。実際、ある特性を持つ係数行列にたいしては、その特性を反映する解法が最適となり威力を発揮することが期待できる。

ここでは、解法にたいする基本的な概念が、互いに異なる特徴を有する代表的な三種の反復計算法

- 1) 不完全近似分割法
- 2) 共役勾配法
- 3) Chebyshev 準反復法

を対象としてとりあげた。係数行列はその特徴として、疎、対称、正定値であるとする。

これらの反復法は、主に、楕円型偏微分方程式の解を求める場合に生じる多元連立1次方程式を対象としており、内部領域において

$$\begin{aligned} \Sigma d(A_i(x) dU/dx_i) / dx_i \\ + b_i(x) dU/dx_i + q(x) \cdot U = F(u, x), \\ i = 1, 3 \end{aligned} \quad (1.1)$$

で、境界では、Dirichlet, Neumann 型の条件を満足する解を求める場合に利用できる。

本報告では、多元連立1次方程式の係数行列の構成法の改良法を述べた、収束速度、誤差解析について述べる。また、改良した方法に基づいて数値計算を実行しその結果を収束速度について比較、検討を行った。

## 2. 不完全近似分割法

三次元楕円型偏微分方程式の差分化により得られた差分方程式の係数行列は、一行に最大七個の要素を有する sparse matrix である。この対称、正定値、正方行列を上、下の三角行列の積として近似し、反復計算を実行すると元の差分方程式の解が得られる。この方法は、Gauss 法など直接除去法<sup>1)</sup>、また緩和法、Gauss-Seidel 法、ADI 法等の反復計算法と比較しても遜色ない。

### 2.1 基本概念

与えられた多元連立1次方程式の行列表示を

$$A \cdot U = F \quad (2.1)$$

とする。ここで行列  $A$  は、 $n$ 次元の unitary 空間において自己共役、正定値とする。

さて、行列  $B$  を導入し、行列  $A$  とあまり異なる行列  $(A+B)$  を考える。この行列  $B$  の役割は、次の多元連立1次方程式

$$(A+B) \cdot U = F \quad (2.2)$$

が簡単に解けるようにすることである。すなわち  $B$  は逆行列  $(A+B)^{-1}$  が簡単に求めることができる形の行列であることが望ましい。

いま、反復計算用の式として

$$\begin{aligned} (A+B) \cdot U^{m+1} = (A+B) \cdot U^m \\ - \omega(A \cdot U^m - F) \end{aligned} \quad (2.3)$$

を考える<sup>3)4)</sup>。この反復計算により得られる解が(2.1)の解であることは明らかである。特に、詳細な解析と証明が T. Dupont によってなされている<sup>5)</sup>ので、その結果を以下に引用する。

まず、収束に関する結果を紹介する。

行列  $A, B$  ともに unitary 空間で自己共役であり、行列  $A$  と  $A+B$  は正定値、すなわち、それぞれの固有値は正とする。また、正数  $e_{\max}, e_{\min}$  が存在して零でない  $U$  に対して

$$e_{\min} < (AU, U) / ((A+B)U, U) < e_{\max}$$

を満足するものとする。さらに、自己共役な行列

$$A^{1/2} \cdot (A+B)^{-1} \cdot A^{1/2}$$

の最大固有値  $\lambda_{\max}$ 、最小固有値  $\lambda_{\min}$  は区間  $[e_{\min}, e_{\max}]$  に含まれるものとする。このとき、パラメータ  $\omega$  を

$$0 < \omega < 2/e_{\max}^{-1}$$

であるように選ぶと、(2.3)式の解は、何回かの反復計算後に(2.1)式の解に収束する。

次に、誤差ベクトルを

$$Ei^m = U^m - U$$

で定義し、A-ノルム誤差  $\|Ei^m\|_A$  を、

$$\|Ei^m\|_A = \sup \{ (A \cdot Ei^m, Ei^m)^{1/2} / (Ei^m, Ei^m) \}$$

で定義する。発生する A-ノルム誤差は、一回の計算につき

$$(e_{\max} - e_{\min}) / (e_{\max} + e_{\min})$$

だけ減少する。また、

$$\phi_{i,j,k} = c_0 \cdot h^2 \quad ((2.12) \text{ 式参照})$$

とすると、A-ノルムで誤差を  $Ei$  だけ減少させるために要する反復計算回数は、

$$O(h^{-1/2} \cdot \log Ei^{-1})$$

であり、演算回数は

$$O((h^{-7/2} \cdot \log Ei^{-1}))$$

となる。ここに、 $h$  は計算格子間隔である。

もしパラメータ  $\omega$  の値を固定しないで、各反復計算ごとに変化させるならば、解への収束が速くなる可能性があることが考えられる。この場合、表示式としては (2.3) 式の  $\omega$  を  $\omega^m$  で置き換えるものとする。

収束性の解析は、二段階にわたって行なわれる。まず、Inner iteration には、Chebyshev の解析法を利用しなければならない。しかしながら、この方法を適用するためには、全体の反復回数をあらかじめ仮定することが要求される。Chebyshev の解析法におけるこのような欠点を避けるため、Stiefel が論じた方法<sup>9)</sup>を採用する。

第3章で述べる Chebyshev 準反復法においては、この欠点を取り除いており、全体の計算反復回数とは独立して  $\omega^m$  を決定することができる。

次に、Outer iteration には、次式で表わされる反復作用素  $\mathcal{L}$  を利用する Gunn の方法を適用する。Gunn の解析結果によると反復計算

$$A \cdot U^{m+1} = A \cdot U^m - \rho \cdot \mathcal{L}(U^m) \quad (2.4)$$

により得られる  $U^m$  は、行列  $A$  と  $\rho$ 、 $\mathcal{L}$  に関する適当な仮定のもとに  $\mathcal{L}(U) = 0$  の解に収束する。ここに、 $\rho$  は (2.3) 式の  $\omega$  に対応するパラメータであり、 $\mathcal{L}$  は線形作用素である。

Gunn の解析結果を利用出来るように本方法

$$(A+B) \cdot U^{m+1} = (A+B) \cdot U^m - \omega^m (A \cdot U^m - F) \quad (2.5)$$

との対応関係を求めることによってパラメータ  $\omega^m$  が各計算ごとに変化する場合も (2.3) に

よる反復計算の結果得られる収束解に一致することが証明される。A-ノルムで誤差を  $Ei$  だけ減少させるために要する反復計算回数は、

$$O(h^{-n-1/2} \cdot \log Ei^{-1})$$

となる。

この評価により、収束を速めるためには計算の反復ごとにパラメータ  $\omega$  を変えた方が良いことが分かる。

以上が、T. Dupont 等<sup>34)</sup>によって得られた解析結果である。

## 2.2 行列の分割法

実際の計算にあたっては前項で述べたように、行列  $A$  を  $A+B$  で置き換えて

$$(L \cdot L^T) \cdot U = (A+B) \cdot U \quad (2.6)$$

とする。ここに、 $L^T$  は一般には複素空間で定義された、 $L$  に共役な転置三角行列である。行列  $B$  は、右辺を上下の三角行列  $L$  と  $L^T$  の積として表わすために導入されたものである。より具体的には、

$$B = B_p + B_d \quad (2.7)$$

として取扱われる。ここで、 $B_d$  は  $B_p$  の影響を相殺するために導入された関数と考えることが出来る。この関数については、H.И. Булеев, T. A. Oliphant, H. L. Stone, T. Dupont et al 等により考察されている。ここでは、T. Dupont 等の表示式を利用する。

具体的に (1.1) 式を三次元に適用した問題を考える。数値解法的表示として (2.1) 式を採用する。

いま、領域内の点を  $(i\Delta x_1, j\Delta x_2, k\Delta x_3)$  とし、その点における関数の値を  $U_{i,j,k}$  と記す。ただし、 $\Delta x_1, \Delta x_2, \Delta x_3$  はそれぞれ  $x_1, x_2, x_3$  方向の計算格子間隔とする。このとき、Dirichlet 方程式の主要部

$$A \cdot U = d(A_1(x) dU/dx) / dx + d(A_2(x) dU/dy) / dy + d(A_3(x) dU/dz) / dz$$

は三次元で七点差分近似を用いた場合には

$$(A \cdot U)_{i,j,k} = a_{i-1,j,k} \cdot U_{i-1,j,k} + b_{i,j-1,k} \cdot U_{i,j-1,k} + c_{i,j,k-1} \cdot U_{i,j,k-1} + d_{i,j,k} \cdot U_{i,j,k} + e_{i,j,k+1} \cdot U_{i,j,k+1} + f_{i,j,k+1} \cdot U_{i,j+1,k} + g_{i,j,k} \cdot U_{i+1,j,k} \quad (2.8)$$

であり、係数 $a_{i,j,k}$ ,  $b_{i,j,k}$ ,  $c_{i,j,k}$ は

$$a_{i,j,k} = -1 / (\Delta x_3)^2 \cdot A_3(i \Delta x_1, j \Delta x_2, (k+1/2) \Delta x_3)$$

$$b_{i,j,k} = -1 / (\Delta x_2)^2 \cdot A_2(i \Delta x_1, (j+1/2) \Delta x_2, k \Delta x_3)$$

$$c_{i,j,k} = -1 / (\Delta x_1)^2 \cdot A_1((i+1/2) \Delta x_1, j \Delta x_2, k \Delta x_3)$$

で表わされる。

境界近傍での係数 $a_{i,j,k}$ ,  $b_{i,j,k}$ ,  $c_{i,j,k}$ の値は、これらの係数を計算するために必要な格子点が計算対象領域から出ている場合には、零とする。この簡単な設定方法により各係数の計算は境界を意識することなしに行える。

(2.6)式において $(i,j,k)$ 点における $L \cdot U$ と $L^T \cdot U$ の要素は、

$$(L \cdot U)_{i,j,k} = \alpha_{i-1,j,k} \cdot U_{i-1,j,k} + \beta_{i,j-1,k} \cdot U_{i,j-1,k} + \gamma_{i,j,k-1} \cdot U_{i,j,k-1} + \delta_{i,j,k} \cdot U_{i,j,k} \quad (2.9)$$

$$(L^T \cdot U)_{i,j,k} = \delta_{i,j,k} \cdot U_{i,j,k} + \gamma_{i,j,k} \cdot U_{i,j,k+1} + \beta_{i,j,k} \cdot U_{i,j+1,k} + \alpha_{i,j,k} \cdot U_{i+1,j,k} \quad (2.10)$$

である。また、同じく(2.7)式において $(i,j,k)$ 点における $B_p \cdot U$ と $B_d \cdot U$ の要素は

$$(B_p \cdot U)_{i,j,k} = \lambda_{i,j,k} (U_{i-1,j+1,k} - U_{i,j,k}) + \lambda_{i+1,j-1,k} (U_{i+1,j-1,k} - U_{i,j,k}) + \mu_{i,j,k} (U_{i,j-1,k+1} - U_{i,j,k}) + \mu_{i,j+1,k-1} (U_{i,j+1,k-1} - U_{i,j,k}) + \nu_{i,j,k} (U_{i-1,j,k+1} - U_{i,j,k})$$

$$+ \nu_{i+1,j,k-1} (U_{i+1,j,k-1} - U_{i,j,k}) \quad (2.11)$$

$$(B_d \cdot U)_{i,j,k} = \phi_{i,j,k} \cdot d_{i,j,k} \cdot U_{i,j,k} \quad (2.12)$$

である。

これらの関係式を(2.6), (2.7)に代入し、それぞれ対応する係数を等値することにより次の関係式を得る。

$$\delta_{i,j,k}^2 = d_{i,j,k} (1 + \phi_{i,j,k}) - (\lambda_{i,j,k} + \lambda_{i+1,j-1,k} + \mu_{i,j,k} + \mu_{i,j+1,k-1} + \nu_{i,j,k} + \nu_{i+1,j,k-1}) - (\alpha_{i-1,j,k}^2 + \beta_{i,j-1,k}^2 + \gamma_{i,j,k-1}^2)$$

$$\alpha_{i,j,k} = a_{i,j,k} / \delta_{i,j,k}, \quad \beta_{i,j,k} = b_{i,j,k} / \delta_{i,j,k}, \quad \gamma_{i,j,k} = c_{i,j,k} / \delta_{i,j,k} \quad (2.13)$$

$$\lambda_{i,j,k} = \alpha_{i-1,j,k} \cdot \beta_{i-1,j,k}$$

$$\mu_{i,j,k} = \beta_{i,j-1,k} \cdot \gamma_{i,j-1,k}$$

$$\nu_{i,j,k} = \gamma_{i,j,k-1} \cdot \alpha_{i,j,k-1} \quad (2.14)$$

(2.13)式の第一式の右辺は正でなければならぬが、そのためには $\phi_{i,j,k}$ が正であることが必要十分条件であることが証明されている<sup>3)4)</sup>。

この方法は一般的には、陽的解法のため陰的解法に比べて収束は速いが、安定性はやや劣る<sup>10)</sup>ことが報告されている。以上が行列の分割法の理論的な説明である。

なお、これらの関係式を導くにあたっては、図1～図4に示す図式表示法を利用すると便利であり、式の正確さも容易に確かめることができる。また、図式表現を用いると本方法の基本的特性を理解出来る、特に、新たな改良法の考察においては、非常に有効な手段と思われる。

### 2.3 行列分割による計算効率の改良

ここに新しく計算の効率化のために工夫を加える。すなわち、与えられた行列 $A+B$ を互いに対称な下三角行列 $L$ と共役転置な上三角行列 $L^T$ の積で表わしたが、ここでは下三角行列 $L_1$ と対

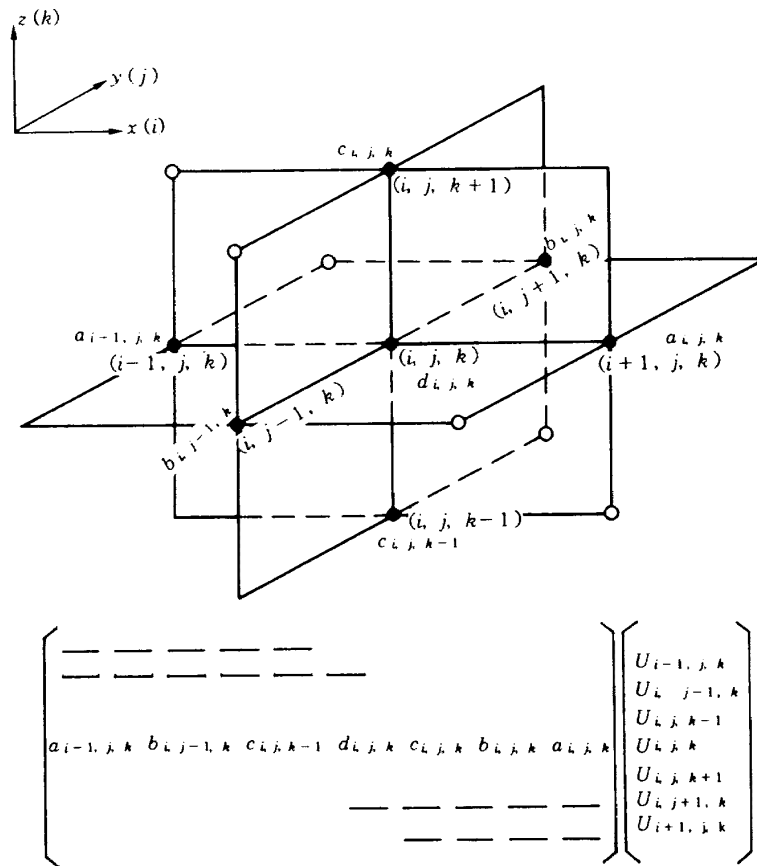


図1 計算格子点と係数の番号名の対応

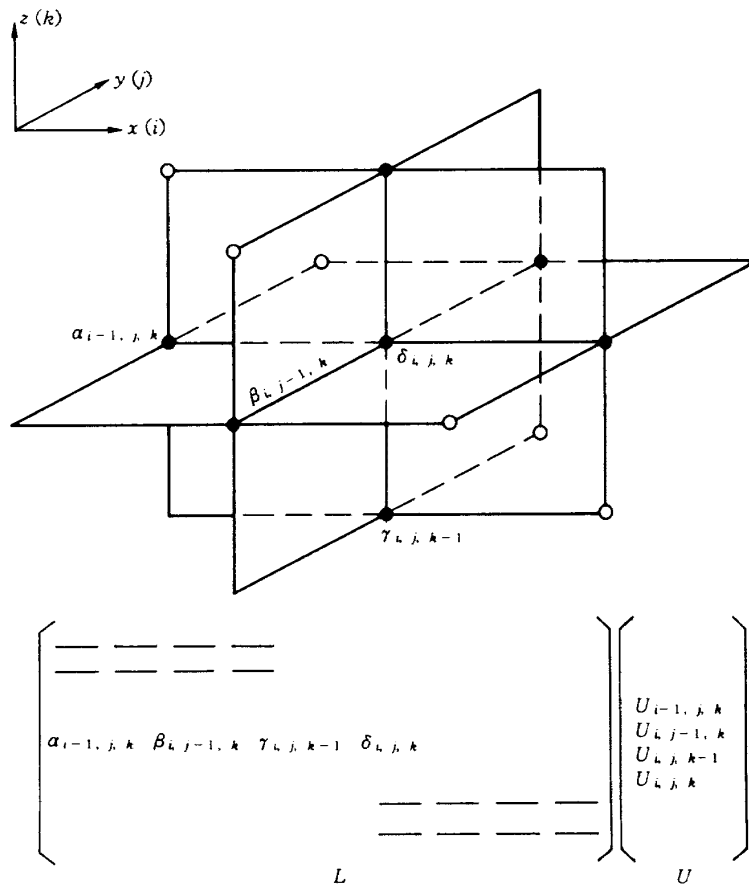


図2 下三角行列L

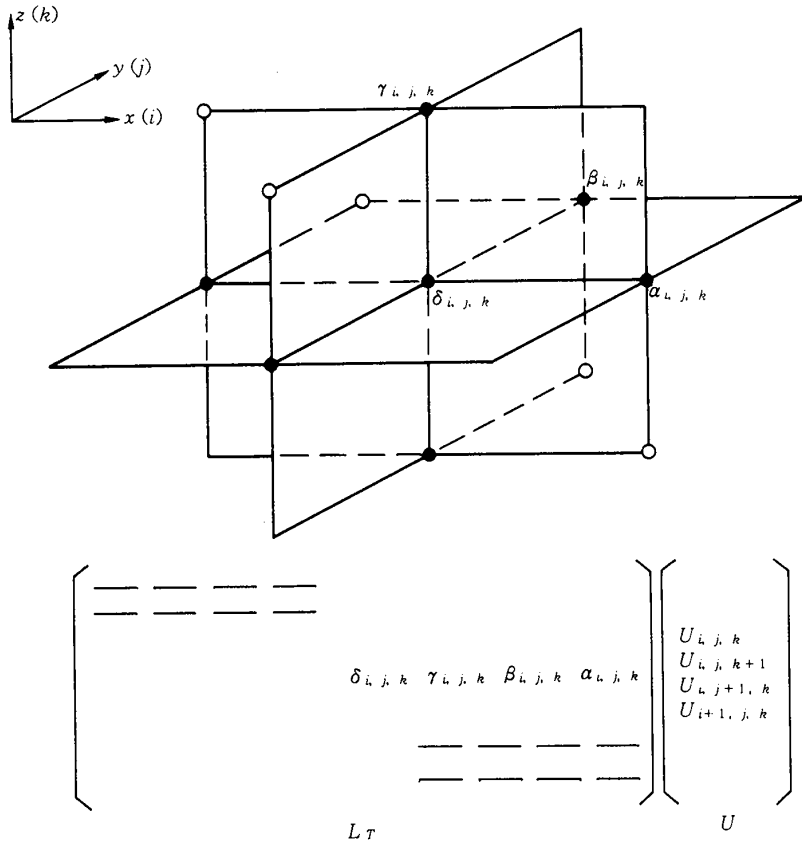
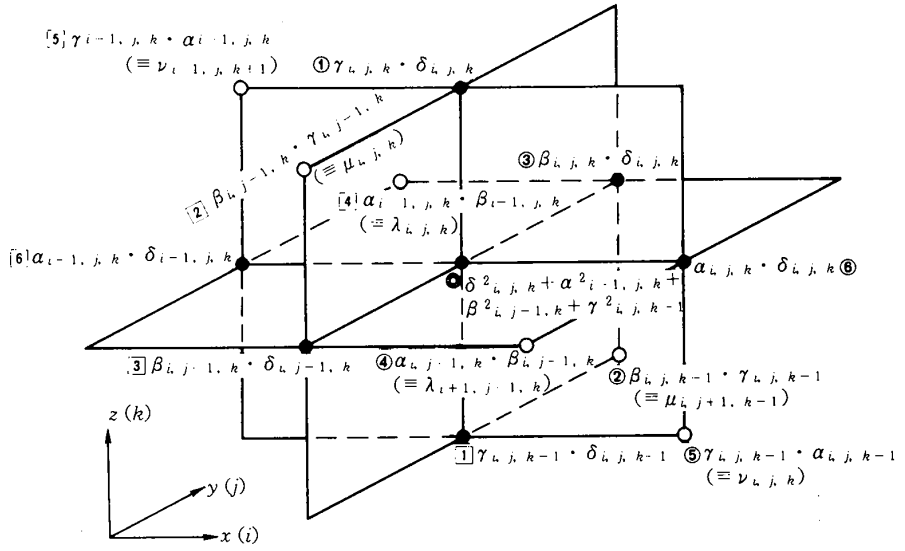


図3 上三角行列  $L^T$



但し、 $\begin{cases} \alpha_{i,j,k} = 0 \\ \beta_{i,j,k} = 0 \\ \gamma_{i,j,k} = 0 \end{cases}$

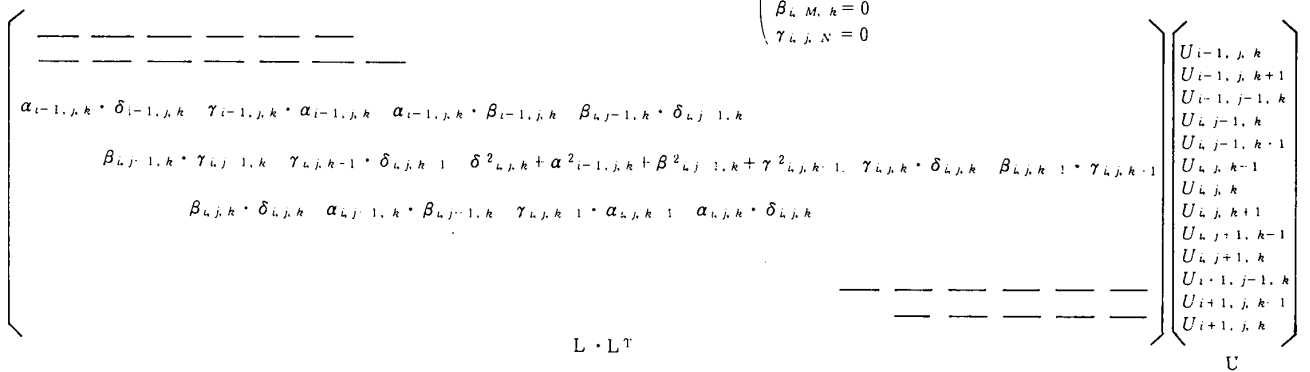


図4 行列積  $L \cdot L^T (= A + B)$



角要素が1である上三角行列  $L_u$  の積で表現する。  
すなわち、対角行列  $L_d$  を導入し、行列の積  $L \cdot L^T$  を

$$L \cdot L^T = (L \cdot L_d) \cdot (L_d^{-1} \cdot L^T) \quad (2.15)$$

と表わす。これにより、(2.13) 式の第二式の中の  $\delta_{i,j,k}$  を求めるために必要な第一式における  $\delta_{i,j,k}^2$  の平方根の計算を避けることができ計算速度が速まる。

$$L_u = L \cdot L_d \quad (2.16)$$

$$L_l = L_d^{-1} \cdot L^T \quad (2.17)$$

とおくと、分割行列表示は

$$(L_l \cdot U)_{i,j,k} = e_{i-1,j,k} \cdot U_{i-1,j,k} + f_{i,j-1,k} \cdot U_{i,j-1,k} + g_{i,j,k-1} \cdot U_{i,j,k-1} + h_{i,j,k} \cdot U_{i,j,k} \quad (2.18)$$

$$(L_u \cdot U)_{i,j,k} = h_{i,j,k} \cdot U_{i,j,k} + t_{i,j,k} \cdot U_{i,j,k+1} + s_{i,j,k} \cdot U_{i,j+1,k} + r_{i,j,k} \cdot U_{i+1,j,k} \quad (2.19)$$

となる。

$L_u$  と  $L_l$  の要素は

$$e_{i-1,j,k} = \alpha_{i-1,j,k} \cdot \delta_{i-1,j,k}$$

$$\begin{aligned} f_{i,j-1,k} &= \beta_{i,j-1,k} \cdot \delta_{i,j-1,k} \\ g_{i,j,k-1} &= \gamma_{i,j,k-1} \cdot \delta_{i,j,k-1} \\ h_{i,j,k} &= \delta_{i,j,k}^2 \\ t_{i,j,k} &= \gamma_{i,j,k} / \delta_{i,j,k} \\ s_{i,j,k} &= \beta_{i,j,k} / \delta_{i,j,k} \\ r_{i,j,k} &= \alpha_{i,j,k} / \delta_{i,j,k} \end{aligned} \quad (2.20)$$

となる。これらの関係式は図5により容易に確認できる。図6～図8は図2～図4に対応するものである。

以上の関係式の準備が完了すると式(2.3)または式(2.5)により計算の実行が可能になる。

### 2.4 計算例

式(2.3)または式(2.5)の左辺に上述の方法を適用し、三角行列の積として表現して計算を実行した結果を述べる。

収束までの反復計算回数の分割係数  $\phi_{i,j,k}/h^2$  に対する依存性を図9に示す。縦軸に収束までの反復回数、横軸に計算格子点に依存しない無次元のパラメータ  $\phi = \phi_{i,j,k}/h^2$  がとってある。収束の判定は、

$$\begin{aligned} |U^{(k)} - U^{(k-1)}| &< 10^{-6}, \\ |U^{(k)} - U^{(k-1)}| &< 10^{-5} \end{aligned}$$

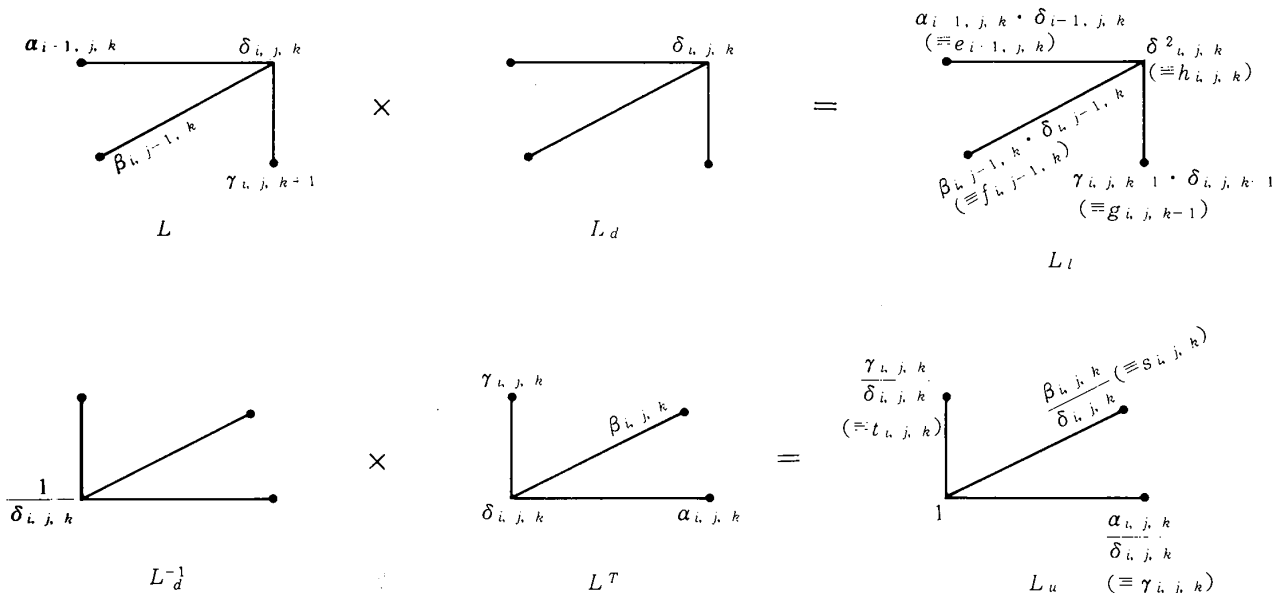


図5 行列  $L$ ,  $L^T$  と行列  $L_l$ ,  $L_u$  の関係

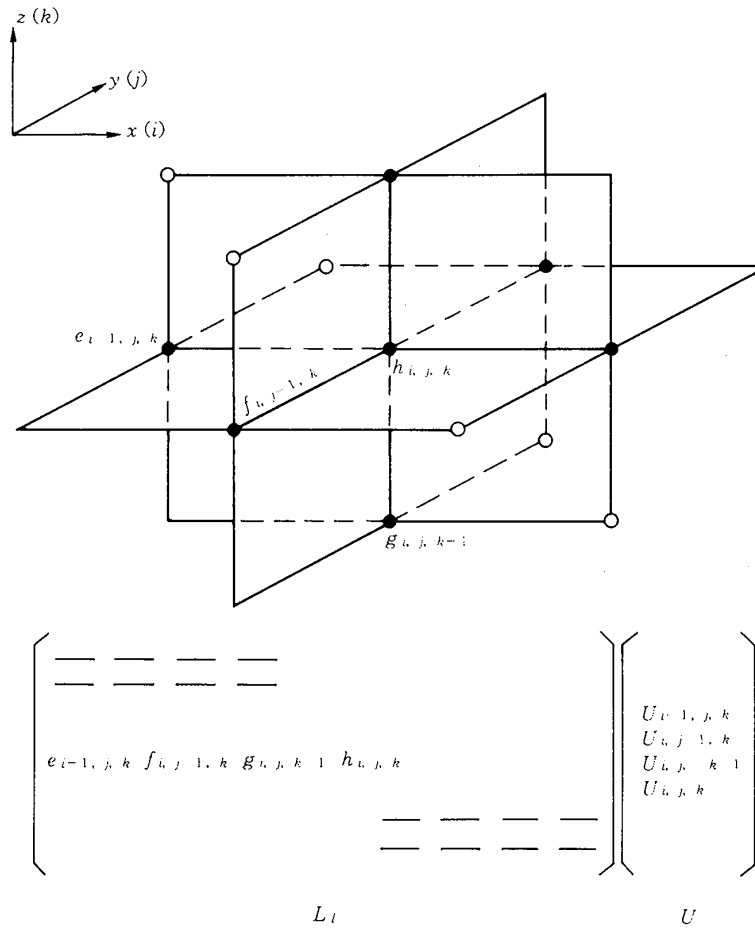


図6 下三角行列  $L_l$

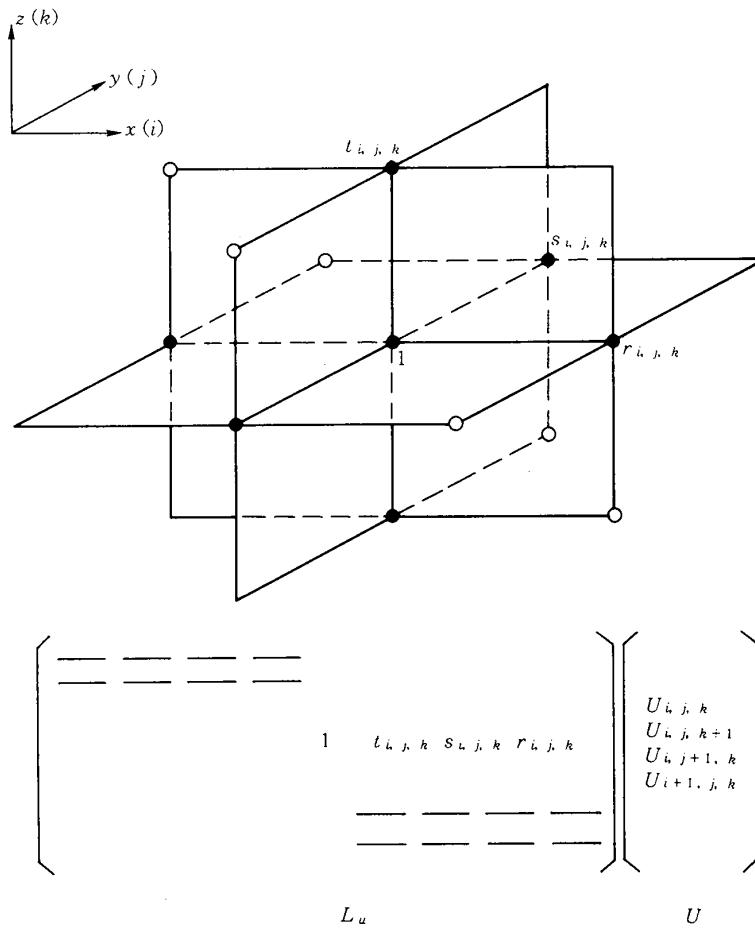


図7 上三角行列  $L_u$

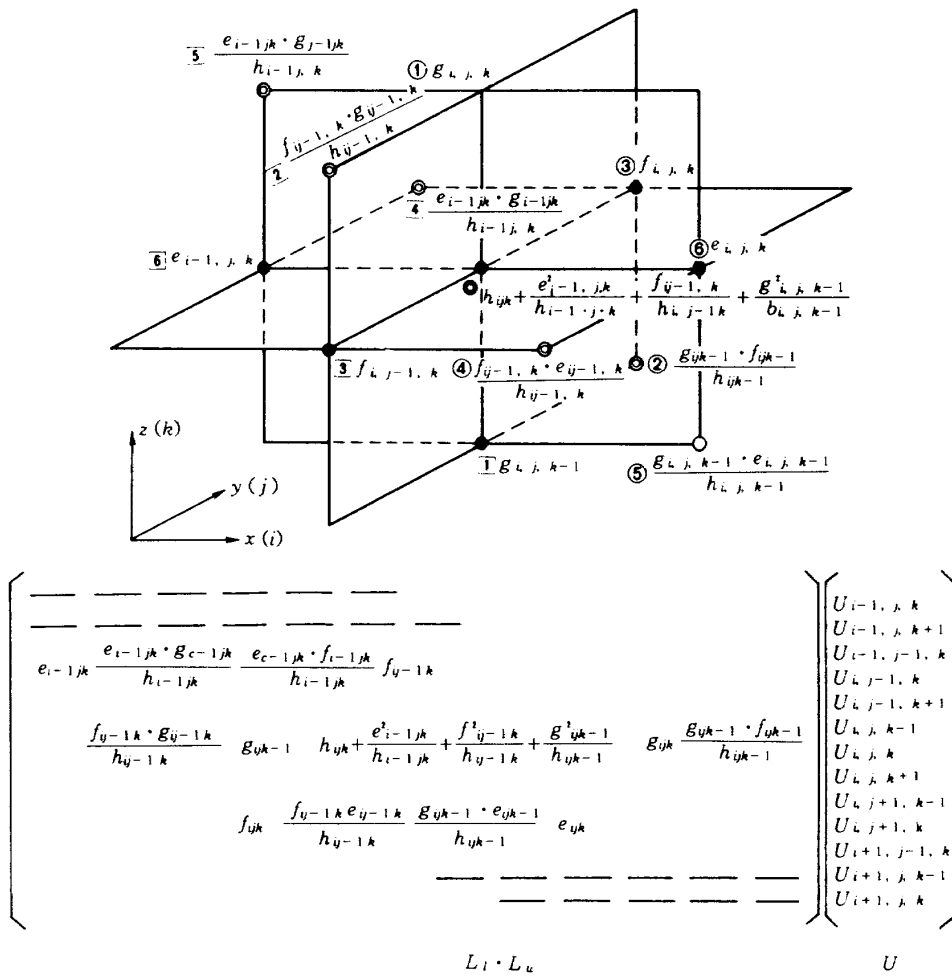


図8 行列積  $L_l \cdot L_u (= A + B)$

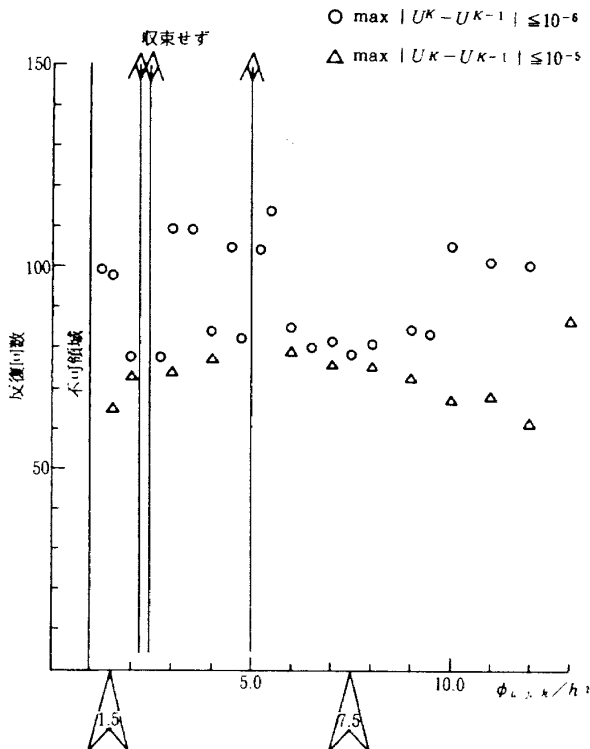


図9 反復回数の係数  $\phi$  に対する依存性 (不完全近似分割法)

の場合について示した。ただし、添字  $k$  は反復回数を意味する。

図から分かるように、ある値の  $\phi$  では収束が非常に悪いという現象が起こる。この場合反復計算のもう一つのパラメータ  $\omega$  に依存することを避けるため、次章で述べる共役勾配法に対する計算効率の改良法を利用した。すなわち、共役勾配法ではパラメータ  $\omega$  は存在しないから、唯一のパラメータ  $\phi$  を変化させて図を描くことができる。この図から  $\phi$  の最適値を 1.5 ないしは 7.5 に決定した。次に、 $\phi = 1.5$  としてパラメータ  $\omega$  を変化させて 3.0 を  $\omega$  の最適値と決めた。

本方法の特徴としては、

- 1) 境界条件の変化に影響されない、
- 2) 反復計算に要するパラメータ  $\phi$  の値は対象となる計算問題によって著しく変わることはない、などがあげられる<sup>2)</sup>。

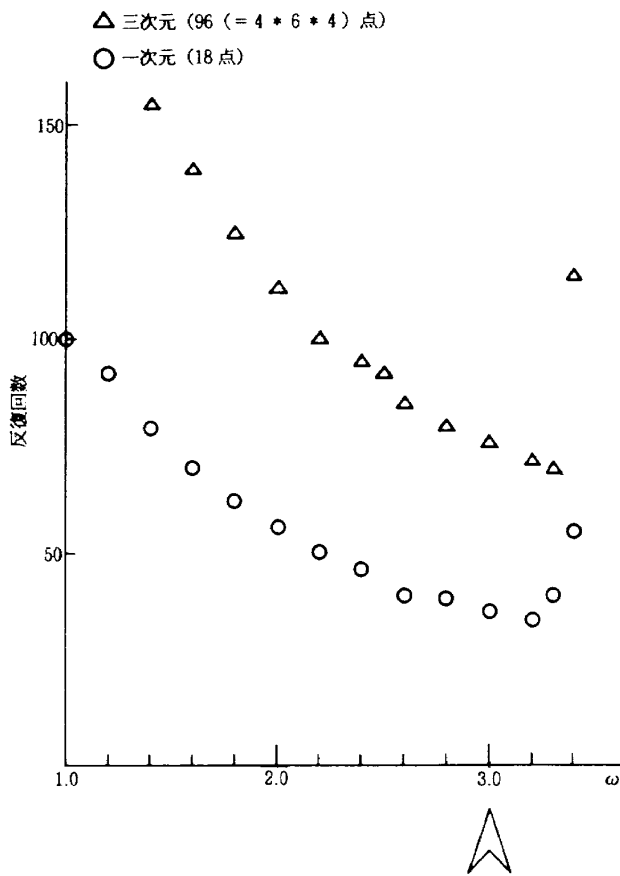


図10 反復回数の加速係数 $\omega$ に対する依存性  
( $\phi = 1.5$ ) (不完全近似分割法)

### 3. 共役勾配法

大型計算機を利用した多元連立1次方程式の解法には、例えば、Холесский法<sup>9)</sup>のように直接に多元連立1次方程式の解を求める方法と、緩和法などによる反復計算によって漸近的に解を得る方法がある。ここで扱う共役勾配法は後者に属する。

数理物理学における境界値問題においては、二次のエネルギー汎関数がよく現れる。この汎関数の極値問題、あるいは停留値問題として得られる線形微分方程式が運動の方程式を表わすことは良く知られている<sup>10)</sup>。このように、微分方程式をエネルギーの極値問題としてとらえて、微分方程式の差分近似により得られる多元連立1次方程式の解法を考えることができる。すなわち、二次関数

$$H(U) = (1/2)(U, A \cdot U) - (U, F) \quad (3.1)$$

を考える。この関数の停留点は、

$$h(U) = A \cdot U - F = 0 \quad (3.2)$$

を満足する点である。ここで、行列 $A$ が正則、対称、正定値であることを仮定する。この場合、停留点 $U$ は、 $H(U)$ が最小となる点である。

#### 3.1 基本概念

一般的に、停留点の求め方によって、Gauss-Seidel法、最急降下法、共役勾配法等の名称が与えられている。すなわち、近似ベクトル値 $U^k$ が与えられた時、パラメータ $\alpha^k$ を導入して、次の近似ベクトル値 $U^{k+1}$ を求めるための式

$$U^{k+1} = U^k + \alpha^k \cdot P^k \quad (3.3)$$

を考える。ここに、 $P^k$ は、次の近似値を求めるための修正ベクトルを意味し、 $\alpha^k$ はその大きさを意味する。この関係式を(3.1)式に代入し $\alpha^k$ に関して微分をとり零に等しいとすると $H(U)$ の極値を示す点までの長さが決まる。

$$\alpha^k = (P^k, F - AU^k) / (P^k, A \cdot P^k) \quad (3.4)$$

修正ベクトルは規定すべき条件が特にあるわけではないので任意に選べる。この修正ベクトルを決定するまえに、 $P^k$ に関する性質を調べる。

剰余ベクトル $R^k$ を

$$R^k = F - A \cdot U^k \quad (3.5)$$

で定義すると

$$\begin{aligned} R^k &= F - A \cdot U^k = F - A \cdot (U^{k-1} + \alpha^{k-1} \cdot P^{k-1}) \\ &= R^{k-1} - \alpha^{k-1} \cdot A \cdot P^{k-1} \end{aligned}$$

であり、修正ベクトル $P^{k-1}$ との内積をとると

$$(R^k, P^{k-1}) = 0 \quad (3.6)$$

となる。すなわち、

「最小点において修正ベクトル $P^{k-1}$ は $n - (k - 1)$ 次切楕円面 (Schnittellipsoid  $n - (k - 1)$ -ten Grades)<sup>9)</sup>上で、剰余ベクトル $R^k$ に直交する」  
(A)

ことがわかる。概念的に図11にこの様子を描いた。

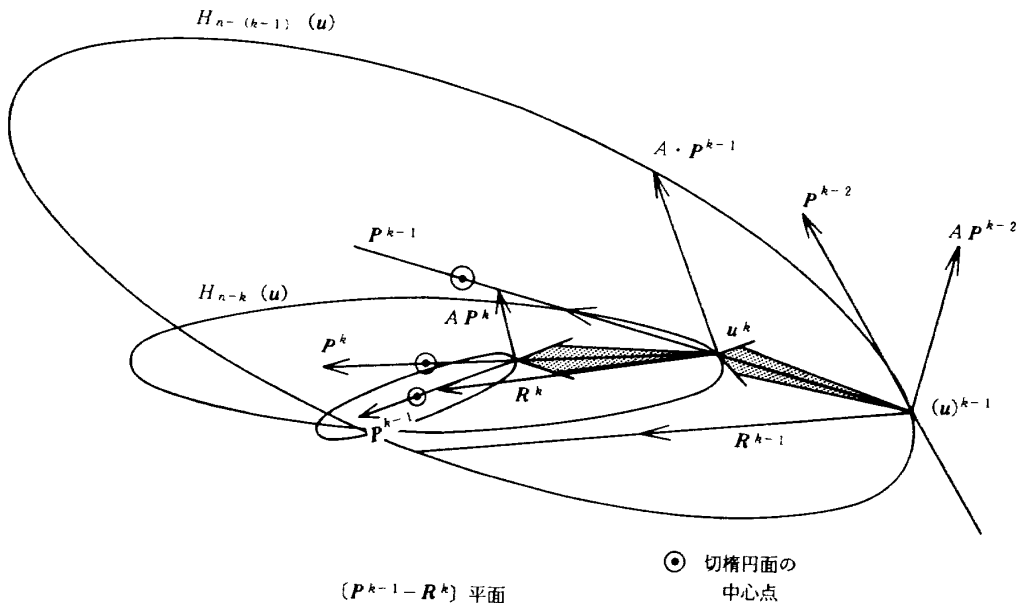


図11 共役ベクトルと修正ベクトル

いま、テンソル楕円面 (Tensorellipsoid)  $H(U) = \text{const.}$  を考える。 $k$  回の反復計算の結果得られる  $(n-k)$  次テンソル楕円 (Tensorellipsoid  $(n-1)$ -ten Grades) を  $H_{n-k}(U)$  とすると、点  $U_k$  における勾配ベクトルは、(3.1) 式により、

$$\text{grad } H_{n-k}(U) \equiv F - A \cdot U^k = R^k$$

であるから

「剰余ベクトル  $R^k$  は  $(n-k)$  次テンソル楕円面上でポテンシャル勾配の局所的に最も減少する方向に向いている」 (B)

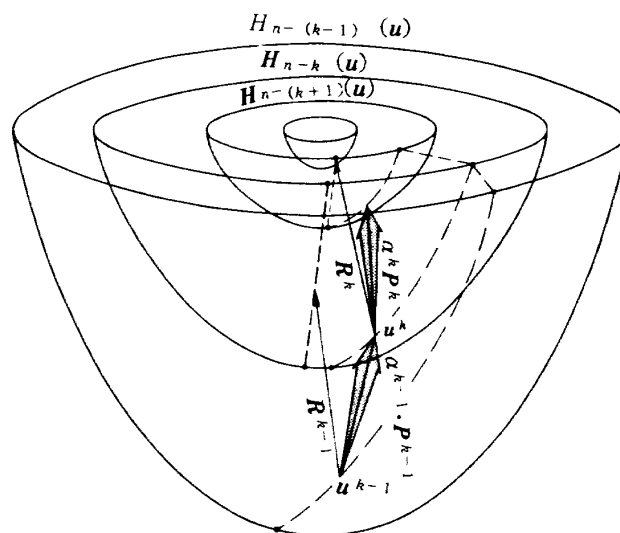
ことがわかる。このことを図12に概念的に描いた。この方向に修正ベクトルをとるのが、最急降下法とよばれる方法である。

しかし、さらに有力な方法として、修正ベクトル  $P^k$  と共役な関係にあるベクトル  $A \cdot P^{k-1}$  を考える。

$$(P^k, A \cdot P^{k-1}) = (A \cdot P^k, P^{k-1}) = 0 \tag{3.7}$$

幾何学的に言うならば、 $(n-k)$  次楕円面上でベクトル  $P^k$  とベクトル  $A \cdot P^{k-1}$  は点  $U^{k-1}$  において接している切楕円面に関して共役方向にあると言える。このとき、

「ベクトル  $P^k$  は点  $U^{k-1}$  における切楕円面の中



$H_{n-(k+1)}(u) < H_{n-k}(u) < H_{n-(k-1)}(u)$

図12 テンソル楕円面上での修正ベクトル

心点の方向に向かっている」<sup>8)</sup> (C)

図11にこの様子を概念的に示した。

なお、修正ベクトルを座標軸方向にとったのが、いわゆる Gauss-Seidel 法とよばれる方法である。修正ベクトル  $P^{k+1}$  としてはポテンシャルの勾配の最も急な方向  $R^{k+1}$  と同様に  $A \cdot P^{k-1}$  に共役なベクトル  $P^k$  も考慮に入れて

$$P^{k+1} = R^{k+1} + \beta^k \cdot P^k \tag{3.8}$$

とする。

係数  $\beta^k$  は (3.7) の関係を満足することにより決定できる。

$$\begin{aligned} \beta^k &= (R^{k+1}, A \cdot P^k) / (P^k, A \cdot P^k) \\ &= (R^{k+1}, R^{k+1}) / (R^k, R^k) \quad (3.9) \end{aligned}$$

(3.3)式を利用すると(3.5)式で定義される残差ベクトル $R^k$ は、

$$R^{k+1} = R^k - \alpha^k A \cdot P^k \quad (3.10)$$

であることがわかる。

ここで、以上述べた各々のベクトル間について、より一般的にまとめて記述する<sup>8)10)</sup>。

性質(A)によると修正ベクトル $P^{k-1}$ と残差ベクトル $R^k$ は修正ベクトル $P^{k-1}$ のテンソル楕円面上のエネルギー最小点で直交するから

$$\begin{aligned} (P^i, R^j) &= 0 \quad (i < j) \\ &= |R^i|^2 \quad (i \geq j) \quad (3.11) \end{aligned}$$

なる関係式が成立する。

次に $(P^{k-2}, R^{k-1})$ 平面内にある修正ベクトル $P^{k-1}$ を考える。この修正方向におけるテンソル楕円面上のエネルギー最小点における残差ベクトル $R^k$ は修正ベクトル $P^{k-1}$ に直交するから、 $R^{k-1}$ と $R^k$ は直交する、よって

$$(R^i, R^j) = 0 \quad (i \neq j) \quad (3.12)$$

となる。また、修正ベクトル $P^{k-1}$ と $P^k$ は共役方向を向いているから

$$(P^i, A \cdot P^j) = 0 \quad (i \neq j) \quad (3.13)$$

である。

$R^k$ と $A \cdot P^{k-1}$ 、 $R^{k-1}$ と $A \cdot P^{k-1}$ は直交しないことはその構成法からわかる。一般に

$$(R^i, A \cdot P^j) = 0 \quad (i \neq j, j+1) \quad (3.14)$$

また、同様に、

$$(P^i, A \cdot P^i) = (R^i, A \cdot P^i) \quad (3.15)$$

が成立する。

以上に関して、より厳密な証明は通常、帰納法を用いて行う。その際、修正ベクトル $P^k$ と残差ベクトル $R^k$ の間になりたつ関係式

$$P^k = \sum |R^k|^2 / |R^i|^2 \cdot R^i \quad (i=0, k) \quad (3.16)$$

は非常に有用な式である。

なお、係数行列 $A$ が正定値であることにより $(P^k, A \cdot P^k) > 0$ であり、(3.11)により $(R^k, R^k) > 0$ であるから、(3.4)式の $\alpha^k$ は

$$\begin{aligned} \alpha^k &= (P^k, R^k) / (P^k, A \cdot P^k) \\ &= (R^k, R^k) / (P^k, A \cdot P^k) > 0 \quad (3.17) \end{aligned}$$

であることがわかる。

ここで三次元Dirichlet問題での誤差解析<sup>13)</sup>によると、 $A$ -ノルムで誤差を $E_i$ だけ減少させるのに要する計算反復回数は $O(h^{-1} \cdot \log E_i^{-1})$ であり演算回数は $O(h^{-4} \cdot \log E_i^{-1})$ であることが得られる。

### 3.2 幾何学的考察

幾何学的考察が計算の過程をより良く理解するための助けとなり、従って、今後の計算法の改良にも役にたつとを念頭に置き新しく解釈を加えて述べる。

共役勾配法は、対象とする多元連立1次方程式(3.2)の解を求めるために、それに対応する汎関数方程式(3.1)の停留点を連続的に求めていくのと同様であることを利用する。したがって、幾何学的には、(3.1)式で表されるテンソル曲面上での解への接近の様子を描くことである。

いま、 $H(U) = H_{n-k}$ とおき、関数 $H(U)$ の第 $k$ 近似を、

$$H_{n-k} = (1/2) (U^k, A \cdot U^k) - (U^k, F) \quad (3.18)$$

で表わすと、このテンソル楕円面は $(n-k)$ 次楕円面である。係数行列 $A$ は正定値であることを考慮すると容易に

$$H_{n-(k+1)}(U) < H_{n-k}(U) \quad (3.19)$$

が得られる。

計算反復回数を増すこと、つまり、 $k$ を増やす

と  $(n-k)$  次楕円面

$$H_{n-k}(U) = \text{const}(n-k). \quad (3.20)$$

はその度に次元を減少させて、次元零のある一点に限りなく近づくということが分かる。楕円面の最大次元数は、計算の始まる最初の状態の多元連立1次方程式の次数  $n$  に等しい。このとき、(3.5) 式で定義される誤差ベクトルの様子は、いま  $S^k \equiv A^{-1}R^k = A^{-1}F - U^k$  とし、解に収束するまでの計算反復回数を  $p$  とすると  $U^p = A^{-1}F$  である。さらに、(3.3) 式を連続的に利用すると、 $S^{k+1} = S^k - \alpha^k P^k$  が得られる。ただし、

$$S^{k+1} = \sum \alpha^i P^i, \quad (i=k+1, l-1),$$

$$S^k = \sum \alpha^i P^i, \quad (i=k, l-1)$$

である。

$S^{k+1}$  と  $S^k$  の絶対値を比較すると、

$$|S^{k+1}|^2 > |S^k|^2 \quad (3.21)$$

が得られる。

この関係式は、計算反復回数を増すごとに誤差ベクトルは減少し、連続的に解に収束していくことを意味している。また、残差ベクトルは(3.12)の関係式により相互に直交しており一回の反復計算によりテンソル楕円面の次元は一次元減少するので、 $n$ 次元空間では  $n$ 回の反復計算により零ベクトルとなる。すなわち解が得られることを意味する。しかし、またある形状のテンソル楕円面の場合には  $n$ 回の計算反復が完了する前に収束することもあり得る。

### 3.3 計算の手順

幾何学的な考察を行いながら図13にしたがって述べる。計算の出発は、初期近似ベクトルとして

1)  $U = U^0$  を適当に選ぶ。

初期の残差ベクトルとして、

2)  $R^0 = F - A \cdot U^0$  とする。

修正ベクトルとして

3)  $P^0 = R^0$

をとるとする。この様な初期データから出発して、

$U^k$  が得られたとする (図13のB点)、すなわち  $P^k, AP^k, R^k$  が決定されているとする。次に  $U^{k+1}$  を得るために係数  $\alpha^k$  を求める。

$$4) \alpha^k = (P^k, R^k) / (P^k, A \cdot P^k) \quad (3.4)$$

$$5) U^{k+1} = U^k + \alpha^k \cdot P^k \quad (3.3)$$

これによって  $U^{k+1}$  が得られる。同様に、ベクトル  $U^{k+2}$  を計算するために必要な  $R^{k+1}, P^{k+1}$  は次の式により容易に計算できる。

$$6) R^{k+1} = R^k - \alpha^k A \cdot P^k \quad (3.10)$$

$$7) \beta^k = (R^{k+1}, A \cdot P^k) / (P^k, A \cdot P^k) \\ = (R^{k+1}, R^{k+1}) / (R^k, R^k) \quad (3.9)$$

$$8) P^{k+1} = R^{k+1} + \beta^k \cdot P^k \quad (3.8)$$

$$9) A P^{k+1} = A * P^{k+1}$$

この様子の詳細は同じく図13に示されている。

もし、ここまでの段階で収束したと判定出来なかった場合は、4)にもどってさらに十分な精度が得られるまで繰返す。

### 3.4 行列分割による計算効率の改良

先に述べた不完全近似分割法を適用して計算の高速化が出来ることに着目して改良を試みたので以下に詳しい内容を述べる。

共役勾配法では、理論的には  $n$ 元連立1次方程式は、 $n$ 回の反復計算により正解が得られる。しかし、実際には丸め誤差の影響を受け  $n$ 回の反復計算では解が得られないことが多いという欠点がある。ところで、共役勾配法の収束の速さは、係数行列  $A$  の固有値の分布と深い関わりがあり、係数行列  $A$  の固有値が重複、または、密集していると収束が速くなる<sup>19)</sup>。そこで、固有値の分布を密集化するような前処理の一つの方法として、いわゆる、スケーリングを行う。

すなわち、多元連立1次方程式

$$A \cdot U = F$$

に、 $u = L \cdot U$  なる、座標変換を施し、その結果一つの多元連立1次方程式

$$\tilde{A} \cdot u = f$$

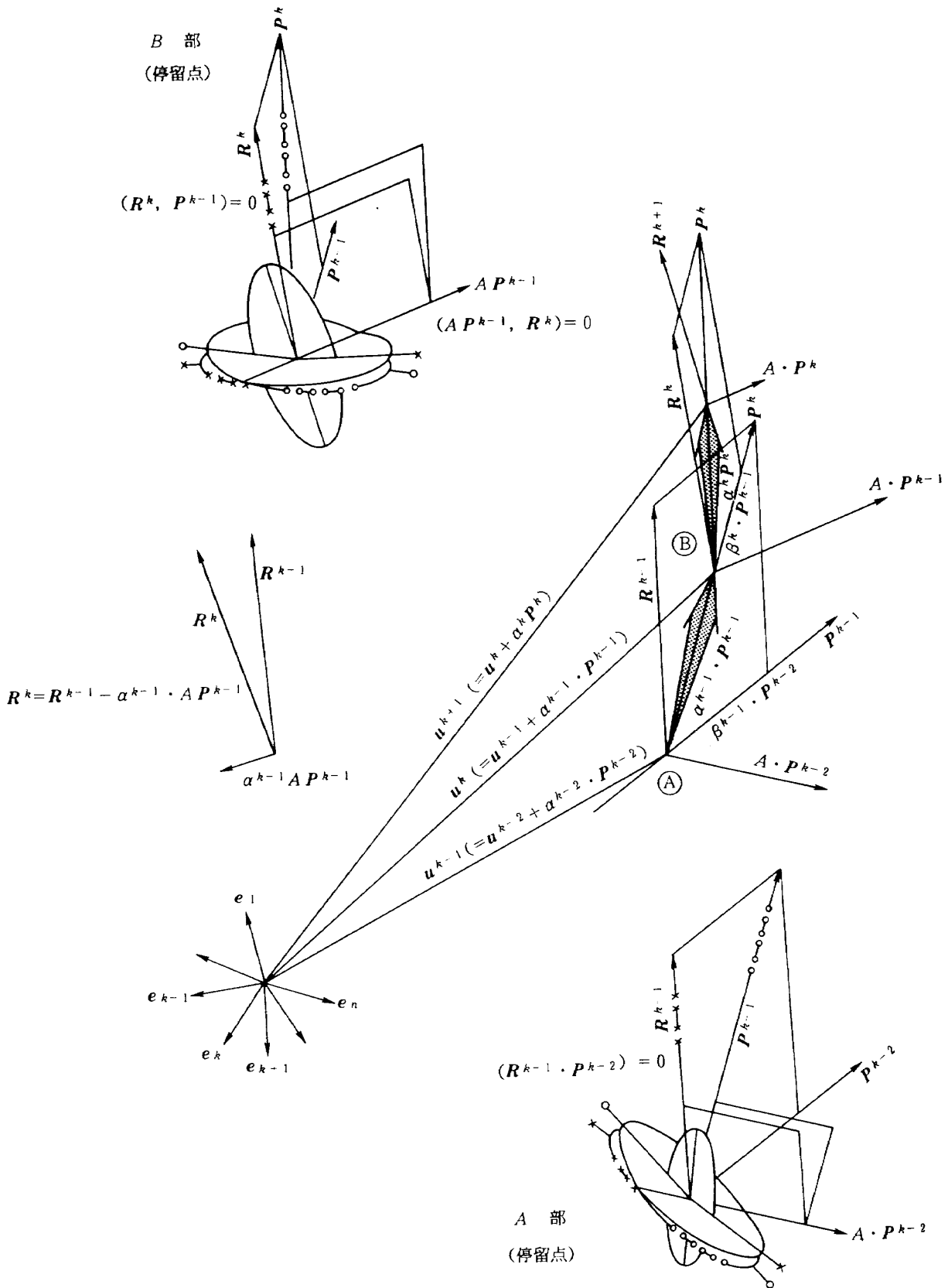


図13 共役勾配法の幾何学的表現



が得られたとする。

ただし、

$$\begin{aligned}\tilde{A} &= (L)^{-1} \cdot A \cdot (L^T)^{-1}, \\ f &= (L)^{-1} \cdot F, \\ L \cdot L^T &= A + B,\end{aligned}$$

である。

ここに、最後の関係式は、(1.6) の関係式、すなわち、行列  $(A+B)$  を  $L$  とその転置行列  $L^T$  の積で表すことを意味している。変換された係数行列  $\tilde{A}$  の固有値は  $(L \cdot L^T)^{-1} A$  の固有値に等しい。したがって、 $(L \cdot L^T) \cdot (A+B)$  は単位行列にはほぼ一致し、スケーリングされた多元連立 1 次方程式の固有値は 1 近傍に集中している。この方法は一般の係数行列に対して適用できる方法である。このような前処理を施すことによって、共役勾配法は現在では大規模三次元問題を解く有力な方法となった。すなわち、スケーリングされた多元連立 1 次方程式の共役勾配法による解法の一部に先に述べた不完全近似分割法を利用することによって収束を速めることを考える。式の導き方については付録 1) を参照するとして、不完全近似分割法を共役勾配法に適用したアルゴリズムを以下に示す。

$$1) U = U^0 \quad (3.22)$$

$$2) R^0 = F - A \cdot U^0 \quad (3.23)$$

$$3) P^0 = (L \cdot L^T)^{-1} \cdot R^0 \quad (3.24)$$

$$(L \cdot L^T) \cdot P^0 = R^0 \quad (3.25)$$

$$\begin{aligned}4) \alpha^k &= (P^k, R^k) / (P^k, A \cdot P^k) \\ &= ((L \cdot L^T)^{-1} R^k, R^k) / (P^k, A \cdot P^k)\end{aligned} \quad (3.26)$$

$$5) U^{k+1} = U^k + \alpha^k \cdot P^k \quad (3.27)$$

$$6) R^{k+1} = R^k - \alpha^k A \cdot P^k \quad (3.28)$$

$$(L, L^T) \cdot r^{k+1} = R^{k+1} \quad (3.29)$$

$$\begin{aligned}7) \beta^k &= -(r^{k+1}, A \cdot P^k) / (P^k, A \cdot P^k) \\ &= (r^{k+1}, R^{k+1}) / (r^k, R^k)\end{aligned} \quad (3.30)$$

$$8) P^{k+1} = r^{k+1} + \beta^k \cdot P^k \quad (3.31)$$

ただし、 $A \cdot P^{k+1} = A * P^{k+1}$ 。

(3.25), (3.29) 式が簡単には解けないことが共役勾配法で最大の欠点の一つであるが、これら

の式の解を不完全近似分割法を適用することにより効率的に解くことができる。

#### 4. Chebyshev 準反復法

(2.1) 式に緩和法を適用する。そのとき、反復計算ごとに得られる解ベクトル  $U^m, U^{m+1}$  等を利用して多項式を作る。この多項式は、総和可能な級数の性質を利用できるように構成する、このことによって収束速度が速まる。この目的に沿って考えだされた方法が Chebyshev 準反復法である。さらに、与えられた係数行列が循環型行列であるとき、この行列を分解可能行列 (reducible matrix) に変形し、得られた分解可能行列に計算の反復ごとに緩和係数を変える Chebyshev 準反復法を適用する。このことによって収束速度の高速化を行った。この方法は本質的には逐次過緩和法と同じであるが反復計算ごとに緩和係数を変えている点においては Richardson 法に類似しているといえる。

##### 4.1 基本概念

反復計算の収束を速める考え方として Cesaro の一次総和法の考えを導入する。

いま、反復計算

$$U^{m+1} = A U^m + F, \quad m \geq 0$$

により得られた  $U^{m+1}$  を利用してあらたに

$$U_c^m = \sum \mu_k(m) \cdot U^k \quad k=0, m, m \geq 0 \quad (4.1)$$

によって定義される級数  $U_c^m$  をつくる。ここで、係数  $\mu_k(m)$  は基本的な条件、

$$\sum \mu_k(m) = 1 \quad k=0, m, m \geq 0. \quad (4.2)$$

を常に満たされなければならない。また、この係数  $\mu_k(m)$  は正確に決定することが要求される。

この方法の目的は、なるべく少数の  $U^{m+1}$  を利用して  $U_c^m$  の収束解を求めるということにある。ここで、Chebyshev 準反復法における総和に関する関数  $U_c^m$  誤差ベクトル

$$E_c^m = U_c^m - U, \quad (4.3)$$

と解  $U^m$  に関する誤差ベクトル

$$E_u^m = U^m - U \quad (4.4)$$

を定義する。ただし、 $U$  は (2.1) 式の解である。

これらの誤差ベクトルの関係は、

$$E_c^m = P_m(A) \cdot E_u^0 \quad m \geq 0 \quad (4.5)$$

を満足する<sup>6)</sup>。ただし、付加条件  $P_m(1) = 1$  を有し、 $P_m(A)$  は Hermit 行列  $A$  の多項式とする。

ベクトルと行列に関する (4.5) 式のノルムをとると、

$$\|E_c^m\| = \|P_m(A)\| \cdot \|E_u^0\| \quad m \geq 0$$

である。

上の式により誤差ノルム  $\|E_c^m\|$  が計算をすすめるごとに減少するためには、行列のノルム  $\|P_m(A)\| < 1$  が要求され、また  $\|P_m(A)\|$  が小さければ小さいほど早く減少することがわかる。

ノルムの定義により、 $P_m(A)$  のノルムは

$$\|P_m(A)\| = \rho(P_m(A)) = \max_{1 \leq i \leq n} |P_m(\lambda_{Ai})|,$$

である。ここに、 $\rho$  はスペクトル半径、 $\lambda_{Ai}$  は行列  $A$  の固有値とする。

したがって、条件  $P_m(1) = 1$  と、

$$-1 < u_{\min} \leq \lambda_{Ai} \leq u_{\max} < 1$$

( $u_{\min}$ ,  $u_{\max}$  は Chebyshev 多項式の根の最小値、最大値である) のもとに、

$$\min \{ \max |P_m(z)| \}$$

を満足する解を見出すことが要求される。

この問題の解は、次式で与えられる<sup>5)6)</sup>。

$$P_m(z) = C_m[(2z - (u_{\max} + u_{\min})) /$$

$$\begin{aligned} & (u_{\max} - u_{\min})] / \\ & C_m[(2 - (u_{\max} + u_{\min})) / \\ & (u_{\max} - u_{\min})] \quad m \geq 0 \end{aligned} \quad (4.6)$$

実際、この式において、 $P_m(1) = 1$  である。

$C_m(z)$  は次式で定義される Chebyshev 多項式

$$\begin{aligned} C_m(z) &= \cos(m \cdot \cos^{-1} z), \\ & \cos \theta = z \quad -1 \leq z \leq 1 \quad m \geq 0 \\ &= \cosh(m \cdot \cosh^{-1} z), \\ & \cosh \theta = z \quad z \geq 1 \quad m \geq 0 \end{aligned}$$

であり、よく知られている

$$C_{m+1}(z) = 2z \cdot C_m(z) - C_{m-1}(z), \quad m \geq 1 \quad (4.7)$$

の関係式が成立つ。ただし、 $C_0(z) = 1$ ,  $C_1(z) = z$  である。

(4.6) 式から  $C_m(z)$  を求め、(4.7) 式に代入し、かつ、 $u_{\max} = \rho(A) = -u_{\min}$  を仮定すると

$$\begin{aligned} C_{m+1}(1/\rho) \cdot P_{m+1}(z) &= \\ & 2 \cdot z/\rho \cdot C_m(1/\rho) \cdot P_m(z) - \\ & C_{m-1} \cdot (1/\rho) \cdot P_{m-1}(z) \end{aligned} \quad (4.8)$$

が得られる。ここで、(4.5) 式の  $E_c^m$  を使って (4.8) 式を表わし、 $z$  の代わりに行列  $A$  を代入すると

$$\begin{aligned} C_{m+1}(1/\rho) \cdot E_c^{m+1}(z) &= 2 \cdot A/\rho \cdot C_m(1/\rho) \\ & \cdot E_c^m(z) - C_{m-1} \cdot (1/\rho) \\ & \cdot E_c^{m-1}(z) \end{aligned} \quad (4.9)$$

を得る。さらに、(4.3) 式の  $E_c^m$  を使い (4.7) 式を利用して、(4.9) を変形すると、いわゆる Chebyshev 準反復法 (semi-iterative method) と呼ばれる次式を得る。

$$U_c^{m+1} = \omega^{m+1} \{A \cdot U_c^m + F - U_c^{m-1}\} + U_c^{m-1}, \quad m \geq 0 \quad (4.10)$$

ただし、

$$\begin{aligned} \omega^{m+1} &= (2/\rho) \cdot C_m(1/\rho)/C_{m+1}(1/\rho) \\ &= 1 + C_{m-1}(1/\rho)/C_{m+1}(1/\rho) \\ m \geq 1, \omega^1 &= 1 \\ &= 1/(1 - (\rho^2 \omega^m/4)), \\ m \geq 2, \omega^1 &= 1 \end{aligned} \tag{4.11}$$

である。

### 4.2 計算効率の改良

ここでは、係数行列が Hermit 型、弱循環行列型 (weakly cyclic form) であり、主対角成分が零の正方行列を作る。すなわち、いままでの係数行列を  $\hat{A}$  とするときあらたに以下に定義する行列  $A$  を定義する。

$$A = \left\| \begin{array}{c|c} 0 & \hat{A} \\ \hline \hat{A}^* & 0 \end{array} \right\| \tag{4.12}$$

この新しい係数行列の要素数は増えるが計算速度が上がるのが解析により分かるのでこの方向に沿って改良を行ったので報告する。

この行列に次の形の Gauss-Seidel 法を適用する。

$$U_1^{(m+1)} = \hat{A} \cdot U_2^{(m)} + h_1 \tag{4.13}$$

$$U_2^{(m+1)} = \hat{A}^* \cdot U_1^{(m)} + h_2, \quad m \geq 0. \tag{4.14}$$

ここで、(4.13), (4.14) 式をひとつにまとめて等価な式

$$U^{(m+1)} = A_L \cdot U^{(m)} + K \tag{4.15}$$

ただし、

$$A_L = \left\| \begin{array}{c|c} 0 & \hat{A} \\ \hline 0 & \hat{A}^* \hat{A} \end{array} \right\|, \quad K = \left\| \begin{array}{c} h_1 \\ \hline \hat{A}^* \cdot h_1 + h_2 \end{array} \right\| \tag{4.16}$$

を作る。

(4.16) 式の固有値を  $\lambda_1(A_L)$  とし、(4.12) 式の固有値を  $\lambda_A(A)$  とし、零でない固有値を較べると

$$0 \leq \lambda_1(A_L) \leq \lambda_{A^2}(A) \tag{4.17}$$

が成立する。この関係式は (4.16) の形の係数行列の場合計算の収束が (4.12) の形の行列よりも速いことを意味している。ここで、さらに (4.12) の形の弱循環式行列よりも、(4.16) 型の分解可能行列の方が反復計算には有利であることを利用する。そのために、ある  $k$  次弱循環行列を  $k$  乗するとその行列は分解可能行列になる、という Frobenius の定理に注目する。

係数行列 (4.12) は二次弱循環行列であるから、行列の掛け算を直接 2 回行うことにより分解可能行列が得られる。すなわち、

$$A^2 = \left\| \begin{array}{c|c} \hat{A} \cdot \hat{A}^* & 0 \\ \hline 0 & \hat{A}^* \cdot \hat{A} \end{array} \right\|. \tag{4.18}$$

この行列のスペクトル半径  $\rho(A^2)$  は、やはり  $\rho^2(A)$  より小さい。

$$0 \leq \rho(A^2) \leq \rho^2(A) \tag{4.19}$$

このような係数行列を持つ多元連立 1 次方程式の形式は次のように構成される。

$$\begin{aligned} U_1 &= \hat{A} \hat{A}^* \cdot U_1 + (\hat{A} \cdot h_2 + h_1) \\ U_2 &= \hat{A}^* \hat{A} \cdot U_2 + (\hat{A}^* \cdot h_1 + h_2) \end{aligned} \tag{4.20}$$

ここで、 $(\hat{A}^* \cdot h_1 + h_2)$  は反復計算の開始以前に決定できるし、かつ一度計算すればよい。あきらかに、行列  $\hat{A}^* \hat{A}$  は Hermit 行列であり、非負であるからこの行列は収束しかつ、解が一意に決まる。

この (4.20) の第二式に Chebyshev 準反復法を適用すると収束速度が加速される。

さらに有利なことに (4.20) の第二式により  $U_2$  が決り

$$U_1 = \hat{A} \cdot U_2 + h_1 \tag{4.21}$$

により、 $U_1$  は行列の掛け算のみで直接に求まる。

つぎに誤差について検討する。いま、行列ノルム  $\|q_m(A)\|$  を、次の式によって導入する。

逐次過緩和法に関して

$$\|q_m(A)\| = \|p_m(A)\|_o = (\omega - 1)^{m/2} \times \{1 + m \cdot (1 - \rho^2(A))^{1/2}\} \quad (4.23)$$

Chebyshev 準反復法に関して

$$\|q_m(A)\| = \|p_m(A)\|_c = (\omega - 1)^{m/2} \times \{2 / (1 + (\omega - 1)^m)\} \quad (4.24)$$

循環係数行列 Chebyshev 準反復法に関して

$$\|q_m(A)\| = \|p_m(A)\|_{cc} = (\omega - 1)^{m/2} \times \{2 / (1 + (\omega - 1)^{2m})\}, \quad m \geq 0 \quad (4.25)$$

ただし、 $\omega = 2 / \{1 + (1 - \rho^2(A))^{1/2}\}$ であり、 $\rho(A)$ は、行列  $A$  のスペクトル半径である。

このとき、誤差ベクトルのノルムは  $\|E^{(m)}\|$  として

$$\|E^{(m)}\| = \|q_m(A)\| \cdot \|E^{(0)}\| \quad (4.22)$$

で表わされる。

これらノルムのあいだには次の大小関係が成立する。

$$\|p_m(A)\|_o > \|p_m(A)\|_c > \|p_m(A)\|_{cc} \quad m \geq 0$$

すなわち、循環係数行列 Chebyshev 準反復法のノルムが最小であることがわかる。

得られた方法は循環 Chebyshev 準反復法 (the cyclic Chebyshev semi-iterative method) と呼ばれるものの一種である。また、この方法は逐次過緩和法 (successive overrelaxation iterative method) の一改良型とみなすことができる。

### 4.3 計算法

ここでは、循環 Chebyshev 準反復法について述べる。対象とする多元連立1次方程式は成分  $(n \times n)$  個の係数行列であり、次式で与えられるとする。

$$A \cdot U = f \quad (2.1)$$

ただし、

$$A = \begin{vmatrix} 0 & \widehat{A} \\ \widehat{A}^* & 0 \end{vmatrix} \equiv \begin{vmatrix} 0 & a_{k,j} \\ b_{i,k} & 0 \end{vmatrix}, \quad (4.26)$$

$$f = \begin{vmatrix} h_1 \\ h_2 \end{vmatrix}, \quad (4.27)$$

解ベクトルは、

$$U = \begin{vmatrix} U_1 \\ U_2 \end{vmatrix}. \quad (4.28)$$

計算の手順は、

1) (4.18) 式の第二列成分の計算

$$(\widehat{A}^* \cdot \widehat{A})_{i,j} = \sum b_{i,k} \cdot a_{k,j} \\ i = (n+2)/2, n, \quad j = (n+2)/2, n, \quad k = 1, n$$

2) (4.18) 式右辺の定数ベクトル成分の計算

$$(H)_i = \sum b_{i,j} \cdot (h_1)_j + (h_2)_i \\ i = (n+2)/2, n, \quad j = 1, n$$

ここでの係数の計算は与えられた係数行列の半分の次数でよい。

3) Chebyshev 準反復法を適用する。

$$(U_2)_{i^{m+1}} = \omega^{m+1} \{(\widehat{A}^* \widehat{A})_{i,k} \cdot (U_2)_k^m + H_i - (U_2)_{i^{m-1}}\} + (U_2)_{i^{m-1}}, \\ i = (n+2)/2, n, \quad k = (n+2)/2, n, \quad m \geq 0 \\ \text{ただし、} \omega^{m+1} = 1 / (1 - (\rho^2 \omega^m / 4)), \\ m \geq 2, \quad \omega^1 = 1$$

4) 3) で得られた解  $U_2$  を利用して残りの解ベクトルを求める

$$(U_1)_i = (\widehat{A})_{i,j} \cdot (U_2)_j + (h_1)_i \\ i = 1, (n+2)/2, \quad j = (n+2)/2, n$$

これは単純な行列の掛け算とベクトルの和である。

### 5. 計算モデル

図14に示すように、三次元空間  $(x, y, z)$  において計算を行う基本領域として直方体  $ABCD EFGH$  を考える。この基本領域を立方体で分割し、各立方体の頂点における関数  $u(x, y, z)$  を求める。

偏微分方程式は

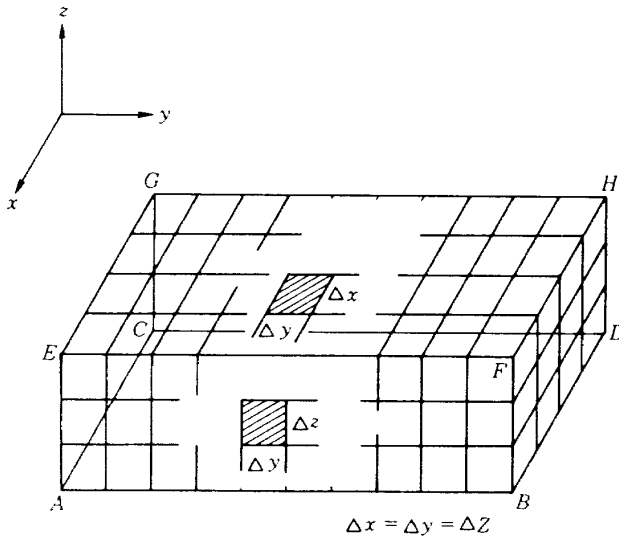


図 14 計算格子

基本領域で,

$$\nabla^2 u = f(x, y, z) \quad (5.1)$$

を満たし,

境界平面  $ABCD$  と  $EFGH$  では,

$$u = 0 \quad (5.2)$$

境界平面  $ACEG$  では,

$$du/dn = 0 \quad (5.3)$$

境界平面  $BDFH$  では,

$$du/dn + u = 0 \quad (5.4)$$

この問題は、境界平面  $ABCD$  と  $EFGH$  では固定されており、境界平面  $ACEG$  では自由、境界平面  $BDFH$  では弾性的に保たれており、強制力  $f(x, y, z)$  が点  $(x, y, z)$  に働いている場合の変形問題を扱っている。計算は、

#### 1) 三次元の場合

格子点間隔,

$$\Delta x = 1, \Delta y = 1, \Delta z = 1,$$

分割点数

$x$ -方向 = 3,  $y$ -方向 = 6,  $z$ -方向 = 3, 合計 96 点,

強制力  $f(x, y, z)$  は強さ 1 で、点  $(2, 2, 1)$   $(2, 3, 1)$   $(3, 2, 1)$   $(3, 3, 1)$  に与える。

#### 2) 二次元の場合

格子点間隔,

$$\Delta x = 1, \Delta y = 1,$$

分割点数

$x$ -方向 = 3,  $y$ -方向 = 6, 合計 18 点,

強制力  $f(x, y)$  は強さ 1 で、点  $(2, 2)$ ,  $(2, 3)$ ,  $(3, 2)$ ,  $(3, 3)$  に与える。

の二つの場合について行った。

実際の計算にあたっては係数行列が、対角ブロック・3-対角的表示(diagonally block-tridiagonal representation)になっていることが望ましい。なお、係数行列が、対角ブロック・3-対角的表示に等価である、いわゆる「性質 A」<sup>5)6)</sup>を有するというだけでは必ずしも計算が妥当な結果をだすとは限らない。

そのために計算格子点の番号の付けかたを工夫するなり、また、Givens 法<sup>8)</sup>, Householder 法<sup>9)</sup>, Sturm 法<sup>9)</sup>やその他の方法を利用して係数行列を対角ブロック・3-対角的表示に変形することが必要である。

## 6. 結 論

それぞれの計算方法による計算結果を解までの収束過程に注目して、許容範囲内(誤差  $< 10^{-6}$ )になるまでの計算反復回数とノルム相対誤差 ( $\|A \cdot u - F\| / \|F\|$ ) を示して比較対照する。

図 15 に縦軸にノルムに関する相対誤差、横軸に反復回数最大の不完全近似分割法を基準とした相対的反復回数のグラフを示す。

結論は以下の二項にまとめられる。

1) 共役勾配法は収束点まで最初と同様な速度で一様に収束する。これは、原理的に妥当であると思われる。

2) 他の二方法は通常反復計算の場合の収束過程と類似している。

ここで示したように性質のよい係数行列の場合には同じようになめらかに収束する傾向を示す。図 16 に二次元の場合の結果も示すがこれも同様な傾向を示している。

なお、改良した方法による計算結果と改良前の方法による計算結果の比較や計算格子点数による計算精度への影響等についての検討は今後の課題

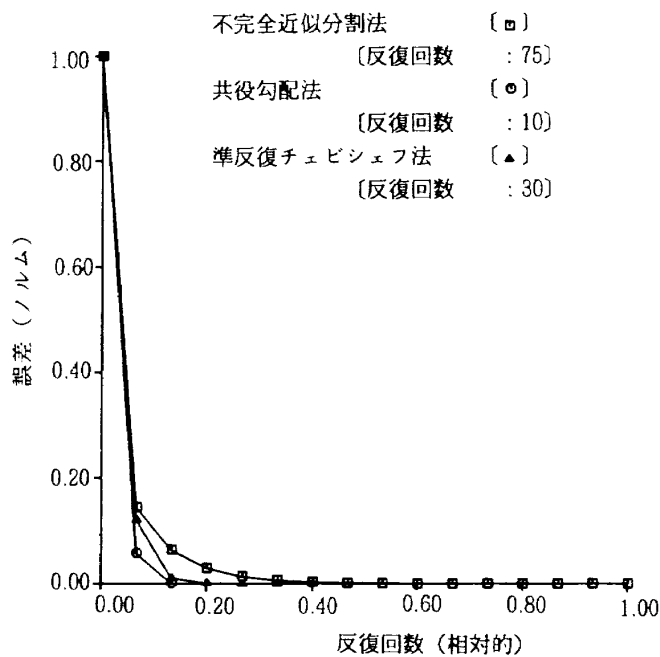


図 15 収束過程  
(格子点数 : 96)

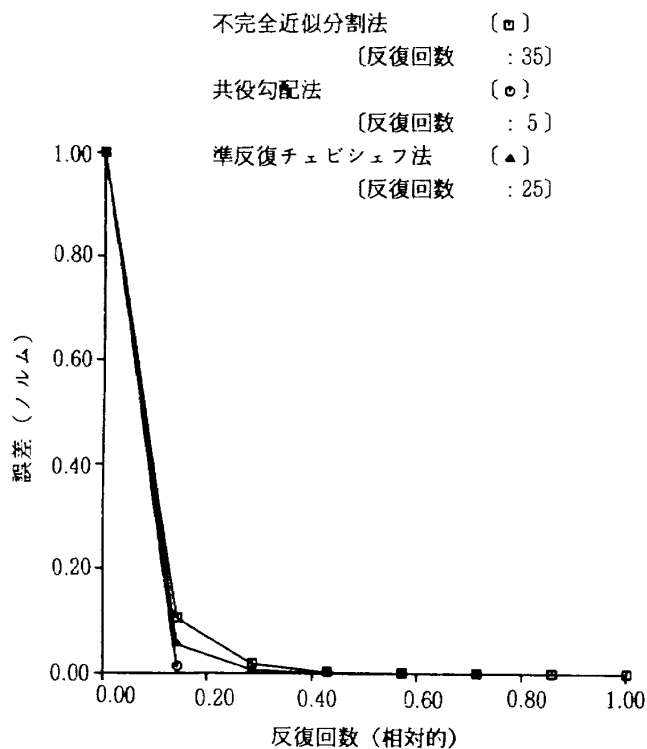


図 16 収束過程  
(格子点数 : 18)

とする。

以上、解法の考えが異なっている三種類の方法および、その方法の改良について論じ、その結論に基づいて計算を実行した。もし基本となる解法において解が得られなければその方法の改良型によっても当然解が得られない。したがって、まず与えられた問題が基本となる解法で解けるかどうかを検討し、その結果、それぞれの解法の改良法を適用することが肝要である。数値解法においては、まず解が得られることが第一でありもし解が得られたならば次に収束の加速等改良法を考えるべきである。また与えられた問題に対してどの解法を適用するかは固有値の分布、対称性、対角型であるか等の行列の性質によっても異なる。これらの係数行列の理論的性質は前もって調べることができるのでこれらの検討を行うのも必要である。もし、係数行列が疎、対称、正定値ならば本報告で述べた改良法を利用することが出来る。

参 考 文 献

- 1) S.C. EISENSTAT, M.H. SCHULTZ, AND A. H. SHERMAN ; Efficient Implementation of Sparse Symmetric Gaussian Elimination. In the Proceedings of the AICA International Symposium on Computer Methods for Partial Differential Equations, (1975) Bethlehem, Pennsylvania
- 2) HERBERT L. STONE ; Iterative Solution of Implicit Approximations of Multidimensional Partial Differential Equations, SIAM J. NUMER. ANAL. Vol. 5 No. 3 September (1968) pp530-558
- 3) TODD DUPONT, RICHARD P. KENDALL and H. H. RACHFORD, Jr.; An Approximate Factorization Procedure for Solving Self-adjoint Elliptic Difference Equation, SIAM J. NUMER. ANAL. Vol. 5 No. 3 September (1968) pp559-573
- 4) TODD DUPONT ; A Factorization Procedure for the Solution of Elliptic Difference Equations, SIAM J. NUMER. ANAL. Vol. 5

- No. 4 December (1968) pp753-782
- 5) G. E. FORSYTHE AND W. R. WASOW ;  
Finite-Difference Methods for Partial Differential Equations, (1960) John Wiley, New York
- 6) R.S.VARGA ; Matrix Iterative Analysis, Prentice-Hall, (1962) Englewood Cliffs, New Jersey
- 7) E.STIEFEL;Einführung in die Numerische Mathematik, (1970) B.G.Teubner Stuttgart
- 8) SCHWARZ, RUTISHAUSER, STIEFEL ;  
Numerik Symmetrischer Matrizen, (1972) B. G.Teubner Stuttgart
- 9) T.A.OLIPHANT ; An Extrapolation Procedure for Solving Linear Systems, Quart. Appl. Math. 20 (1962) pp 257-267
- 10) T. F. CHAN, K. R. JACKSON and B. ZHU ;  
Alternating-Direction Incomplete Factorizations, SIAM J. NUMER. ANAL Vol.20, No. 2, April (1983)
- 11) Н.И. БУЛЕЕВ; Пространственная Модель Турбулентного Обмена, (1989) Издательство Наука.
- 12) МАСЛОВСКАЯ Л.В.; Обобщенный Алгоритм Холесского для Смешанных Дискретных Аналогов Эллиптических Краевых Задач, Ж. вычисл. матем. физи. Т. 29. No. 1. (1989) с. 67-74.
- 13) R. CHANDRA, S. C. EISENSTAT, and M.H. SCHULTZ ; Conjugate Gradient Methods for Partial Differential Equations, In the Proceedings of the AICA International Symposium on Computer Methods for Partial Differential Equations, Bethlehem, Pennsylvania, (1975) pp60-64
- 14) A.DONALD and B. ECKMANN ; Sparse Matrix Techniques, (1976) Springer Verlag
- 15) R. ZURMUHL ; Matrizen, (1950) Springer-Verlag
- 16) F. R. GANTMACHER ; The Theory of Matrices, Vol. 1, (1959) Chelsea Publishing

- Company, New York
- 17) R. COULANT und D. HILBERT; Methoden der Mathematischen Physik, (1931), Berlin
- 18) 戸川隼人 ; 共役勾配法, (1973) 教育出版株式会社
- 19) 村田健郎, 名取亮, 唐木幸比古 ; 大型数値シミュレーション, (1990) 岩波書店

### 付録1 不完全近似分割法の共役勾配法への適用法 ( $\tilde{A} \cdot u = f$ )

いわゆる, 共役勾配法は, 以下に示す通りである。

- 1)  $u = u^0$
- 2)  $r^0 = f - \tilde{A} \cdot u^0$
- 3)  $p^0 = r^0$
- 4)  $\alpha^k = (p^k, r^k) / (p^k, \tilde{A} \cdot p^k)$  (3.4)
- 5)  $u^{k+1} = u^k + \alpha^k \cdot p^k$  (3.3)
- 6)  $r^{k+1} = r^k - \alpha^k \tilde{A} \cdot p^k$  (3.10)
- 7)  $\beta^k = -(r^{k+1}, \tilde{A} \cdot p^k) / (p^k, \tilde{A} \cdot p^k) = (r^{k+1}, r^{k+1}) / (r^k, r^k)$  (3.9)
- 8)  $p^{k+1} = r^{k+1} + \beta^k \cdot p^k$  (3.8)
- 9)  $\tilde{A} \cdot p^{k+1} = \tilde{A} * p^{k+1}$

係数行列  $\tilde{A}$  にある行列  $\tilde{B}$  を加えた行列を  $\tilde{C}$  とし, この行列は二つの行列  $L$  と  $L^T$  の積で表わせるものとする。すなわち,  $\tilde{A} + \tilde{B} \equiv \tilde{C} \equiv L \cdot L^T$ , ただし,  $L$  は下三角行列とし,  $L^T$  は上三角行列とする。

エネルギー式

$$H(u) = (u, \tilde{A} \cdot u) / 2 - (u, f) \quad (\text{A1.1})$$

に, 次の変換式を導入する。

$$U = L^T \cdot u \quad (\text{A1.2})$$

変換されたエネルギー式は

$$H(U) = (U, A \cdot U) / 2 - (U, F) \quad (\text{A1.3})$$

である。両者の対応から,

$$A = (L^T)^{-T} \cdot \tilde{A} \cdot (L^T)^{-1}, \quad (\text{A1.4})$$

$$F = (L^T)^{-T} \cdot f \quad (\text{A1.5})$$

を得る。

ここに、 $A$ の固有値は  $(L \cdot L^T)^{-1} \cdot \tilde{A}$  の固有値に等しい。

もし、 $(L \cdot L^T)$  が  $\tilde{A}$  に近い行列ならば、 $(L \cdot L^T)^{-1} \cdot \tilde{A}$  は単位行列に近くなるから固有値は1近傍に密集する。もしこのように改良がなされたならば、 $H(U)$  に共役勾配法を適用すれば良い。

このような前処理を施すと、

$$A \cdot U = F, \quad \text{ただし, } U = L^T \cdot u$$

なる多元連立1次方程式に対する共役勾配法は以下のようなになる。

- 1)  $U = U^0$
- 2)  $R^0 = F - A \cdot U^0$
- 3)  $P^0 = R^0$
- 4)  $\alpha^k = (P^k, R^k) / (P^k, \tilde{A} \cdot P^k) = (R^k, R^k) / (P^k, \tilde{A} \cdot P^k) \quad (3.4)$
- 5)  $U^{k+1} = U^k + \alpha^k \cdot P^k \quad (3.3)$
- 6)  $R^{k+1} = R^k - \alpha^k \tilde{A} \cdot P^k \quad (3.10)$
- 7)  $\beta^k = -(R^{k+1}, \tilde{A} \cdot P^k) / (P^k, \tilde{A} \cdot P^k) = (R^{k+1}, R^{k+1}) / (R^k, R^k) \quad (3.9)$
- 8)  $P^{k+1} = R^{k+1} + \beta^k \cdot P^k \quad (3.8)$
- 9)  $\tilde{A} \cdot P^{k+1} = \tilde{A} * P^{k+1}$

において、2)の関係式から

$$R = (L^T)^{-T} \cdot r \quad (A 1.6)$$

を得る。

5)の関係式から

$$P^k = L^T \cdot p^k \quad (A 1.7)$$

が得られる。

すなわち、

$$U = (L^T) \cdot u, \quad (A 1.8)$$

$$P = (L^T) \cdot p, \quad (A 1.9)$$

$$R = (L^T)^{-T} \cdot r \quad (A 1.10)$$

を前の関係式に代入して、小文字に関する関係式を導くことができる。

- 1)  $(L^T) \cdot u = (L^T) \cdot u^0$   
 $u = u^0$
- 2)  $(L^T)^{-T} \cdot r^0 = (L^T)^{-T} \cdot f - (L^T)^{-T} \cdot \tilde{A} \cdot (L^T)^{-1} \cdot (L^T) \cdot u^0$   
 $r^0 = f - \tilde{A} \cdot u^0$
- 3)  $(L^T) \cdot p^0 = (L^T)^{-T} \cdot r^0$   
 $p^0 = (L \cdot L^T)^{-1} \cdot r^0 = C^{-1} \cdot r^0$
- 4)  $\alpha^k = ((L^T) \cdot p^k, (L^T)^{-T} \cdot r^k) / ((L^T) \cdot p^k, (L^T)^{-T} \cdot \tilde{A} \cdot (L^T)^{-1} \cdot (L^T) \cdot p^k)$   
 $= (p^k, r^k) / (p^k, \tilde{A} \cdot p^k)$   
 $= ((L^T)^{-T} \cdot r^k, (L^T)^{-T} \cdot r^k) / (p^k, \tilde{A} \cdot p^k)$   
 $= (C^{-1} r^k, r^k) / (p^k, \tilde{A} \cdot p^k) \quad (3.4)$
- 5)  $(L^T) \cdot u^{k+1} = (L^T) \cdot u^k + \alpha^k \cdot (L^T) \cdot p^k$   
 $u^{k+1} = u^k + \alpha^k \cdot p^k \quad (3.3)$
- 6)  $(L^T)^{-T} \cdot r^{k+1} = (L^T)^{-T} \cdot r^k + \alpha^k \cdot (L^T)^{-T} \cdot \tilde{A} \cdot (L^T)^{-1} \cdot (L^T) \cdot p^k$   
 $r^{k+1} = r^k - \alpha^k \tilde{A} \cdot p^k \quad (3.10)$
- 7)  $\beta^k = -((L^T)^{-T} \cdot r^{k+1}, (L^T)^{-T} \cdot \tilde{A} \cdot (L^T)^{-1} \cdot (L^T) \cdot p^k) / ((L^T) \cdot p^k, (L^T)^{-T} \cdot \tilde{A} \cdot (L^T)^{-1} \cdot (L^T) \cdot p^k)$   
 $= -((L, L^T)^{-1} r^{k+1}, \tilde{A} \cdot p^k) / (p^k, \tilde{A} \cdot p^k)$   
 $= -(C^{-1} \cdot r^{k+1}, \tilde{A} \cdot p^k) / (p^k, \tilde{A} \cdot p^k)$   
 $= ((L^T)^{-T} r^{k+1}, (L^T)^{-T} r^{k+1}) / ((L^T)^{-T} r^k, (L^T)^{-T} r^k)$   
 $= ((L, L^T)^{-1} r^{k+1}, r^{k+1}) / ((L, L^T)^{-1} r^k, r^k)$   
 $= (C^{-1} \cdot r^{k+1}, r^{k+1}) / (C^{-1} \cdot r^k, r^k) \quad (3.9)$
- 8)  $(L^T) \cdot p^{k+1} = (L^T)^{-T} \cdot r^k + \beta^k \cdot (L^T) \cdot p^k$   
 $p^{k+1} = (L, L^T)^{-1} \cdot r^k + \beta^k \cdot p^k$   
 $= C^{-1} \cdot r^{k+1} + \beta^k \cdot p^k \quad (3.8)$
- 9)  $\tilde{A} \cdot p^{k+1} = \tilde{A} * p^{k+1}$



---

## 航空宇宙技術研究所報告1139号

平成4年2月発行

発行所 航空宇宙技術研究所  
東京都調布市深大寺東町7-44-1  
電話 三鷹(0422)47-5911(大代表) 千182

印刷所 株式会社 共 進  
東京都杉並区久我山5-6-17

---

