ポアソン方程式におけるマルチグリッド前処理の固有値解析

建 部 修 見[†,††] 小 柳 義 夫[†]

MGCG 法はマルチグリッド前処理を行なう共役勾配法で, 拡散係数が一定のポアソン方程式, 拡散係数に強い非連続性のあるポアソン方程式に非常に有効な解法であるだけでなく, 高い並列性を持ち分散メモリ型並列計算機上への効率的な実装を行なうことができる. 本研究では MGCG 法の理論的な収束率の解析のために, 1 次元, 2 次元のポアソン方程式を離散化して得られる行列に対し, マルチグリッド前処理を行なった後の行列の固有値を解析的に求め, MGCG 法の収束の解析を行なう.

Eigenvalue Analysis of the Multigrid Preconditioner for the Poisson Problem

Osamu Tatebe[†,††] and Yoshio Oyanagi[†]

The MGCG method, which is a conjugate gradient method preconditioned by the multigrid method, is efficient in the Poisson problem with constant or strongly discontinuous diffusion constant, and also has so high parallelism to be implemented efficiently on the distributed memory machines. This study considers the distribution of eigenvalues of the multigrid preconditioned matrix to analyze the rate of convergence of the MGCG method on 1- and 2-dimensional Poisson problem.

1. はじめに

MGCG 法はマルチグリッド前処理を行なう共役勾配法であり, 拡散係数が一定のポアソン方程式, 拡散係数に強い非連続性のあるポアソン方程式に非常に有効であるということを数々の数値実験で示してきた[4]. また, 収束率が良いだけではなく, 高い並列性を持ち分散メモリ型並列計算機上へ効率的に実装を行なうことができる[5]. 理論的な収束率の解析としては, 共役勾配法では 5節でも簡単に説明するが, 固有値の分布によって収束率の解析を行なうことができる[1], 一方マルチグリッド法はスムージング法により誤差の短波長成分を減少させる率を示すスムージング特性と, 粗いグリッドによる修正を表す近似特性により収束率の解析を行なっている[2]. しかしながら MGCG 法の収束率の解析をより精密に行なうためにはマルチグリッド前処理後の行列の固有値の分布を知ることが必要になる. 本研究では拡散係数が一定の 1 次元, 2 次元のポアソン方程式に対し, 減速 (damped) ヤコビ法, レッドブラックガウスザイデル法をそれぞれスムージング法とするマルチグリッド前処理後の行列の固有値を解析的に求め, 収束率の解析の手がかりとすることを目的とする. またその固有値の分布による収束率の解析はまだ成功していないが, その行列の条件数により MGCG 法の収束率を解析的に示す.

† 東京大学理学部情報科学科
Department of Information Science, Faculty of Science, University of Tokyo
†† 日本学術振興会特別研究員
JSPS Research Fellow

表 1 2 グリッド前処理

$$
\begin{aligned}
&\boldsymbol{u} = H_1^{m_1}\boldsymbol{u} + \textstyle\sum_{i=0}^{m_1-1} H_1^i P_1^{-1}\boldsymbol{f} && \text{// pre-smoothing}\\
&\boldsymbol{u} = \boldsymbol{u} - p\,L_1^{-1}\,r\,(L_2\,\boldsymbol{u} - \boldsymbol{f}) && \text{// coarse grid correction}\\
&\boldsymbol{u} = H_2^{m_2}\boldsymbol{u} + \textstyle\sum_{i=0}^{m_2-1} H_2^i P_2^{-1}\boldsymbol{f} && \text{// post-smoothing}
\end{aligned}
$$

2. 2 グリッド前処理

マルチグリッド前処理のもっとも簡単な形はグリッドを 2 つ使う 2 グリッド前処理であり, 以降の解析ではこの 2 グリッド前処理を用いる. グリッドレベル 2 のグリッド Ω_2[☆]における連立一次方程式を $L_2\boldsymbol{u}^{(2)} = \boldsymbol{f}^{(2)}$ とおく. グリッドレベルを表す添字は明らかな場合は省略する. この時, 2 グリッド前処理は表 1で書き表すことができる. ここで, L_2, L_1 は対称正定値行列, p, r はグリッド間の変換を行なう行列であり, それぞれ prolongation, restriction を表している. $H_1(=P_1^{-1}Q_1)$, $H_2(=P_2^{-1}Q_2)$ はそれぞれプレスムージング, ポストスムージングの反復行列, m_1, m_2 は反復回数である. L_1 は粗いグリッド Ω_1 の係数行列であり, 離散近似 (Discretization coarse grid approximation;

☆ 最も細かい, 解きたいグリッド.

DCA) により作るものとする．共役勾配法の前処理としての条件を満たすため，$p = cr^T$ (c は定数) とし，次のいずれかの条件を満たす必要がある[3),4)]．

(1)　$P_1 = P_2 = P = P^T$, $m_1 = m_2 = m$.

(2)　$P_2 = P_1^T$, $m_1 = m_2 = 1$.

条件 (1) から，2 グリッド前処理後の行列は以下の行列となる．

$$B = \sum_{i=0}^{2m-1} H^i P^{-1} L_2 + H^m p L_1^{-1} r (H^T)^m L_2 \quad (1)$$

また，条件 (2) では以下のようになる．

$$B = H_2 P_1^{-1} L_2 + P_2^{-1} L_2 + H_2 p L_1^{-1} r H_2^T L_2 \quad (2)$$

この研究では拡散係数一定のポアソン方程式を考えるため，p と r はそれぞれ標準的な線形補間を用いる．

3. 1 次元ポアソン方程式

1 次元ポアソン方程式

$$-\frac{\mathrm{d}^2 u(x)}{\mathrm{d}x^2} = f(x) \quad \text{in} \quad \Omega = [0,1]$$

$$\text{with} \quad u(0) = \frac{\mathrm{d}u(1)}{\mathrm{d}x} = 0$$

について，Ω を N 等分し離散化すると，

$$\frac{1}{h^2}\begin{pmatrix} 2 & -1 & & \\ -1 & 2 & -1 & \\ & & \ddots & \\ & & -1 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_N \end{pmatrix} \quad (3)$$

となる．ここで，$h = \frac{1}{N}$, $u_i = u(\frac{i}{N})$, $f_i = f(\frac{i}{N})$ である．簡単のために N は偶数とする．

3.1 減速ヤコビ法

減速ヤコビ法は

$$P = \frac{1}{\omega}\mathrm{diag}(L)$$

とおき，反復式

$$P\boldsymbol{x}^{i+1} = Q\boldsymbol{x}^i + \boldsymbol{f}$$

を初期ベクトル $\boldsymbol{x}^0$ より反復することにより構成される．ここで $Q = P - L$ であり，反復行列は $P^{-1}Q$ である．この反復行列の固有値，固有ベクトルは簡単に求めることができ，$\alpha_i = (\frac{1}{2} + i)\frac{\pi}{N}$ ($i = 0, 1, 2, \cdots, N-1$) と置いた時，

$$P^{-1}Q\boldsymbol{\nu}_i = (1 - \omega + \omega\cos\alpha_i)\boldsymbol{\nu}_i \quad (4)$$

となる．ここで $\boldsymbol{\nu}_i = (\sin\alpha_i \ \sin 2\alpha_i \ \cdots \ \sin N\alpha_i)^T$ である．式 (4) より減速ヤコビ法の収束条件は $0 < \omega \leq 1$ であることが分かる．

行列 P が対称なので，2節の条件 (1) が満たされている．従って，式 (1) の固有値を解析すれば良い．$P^{-1}L = P^{-1}(P - Q) = I - P^{-1}Q$ より，式 (1) の第 1 項の固有ベクトルは $\boldsymbol{\nu}_i$ となり，対応する固有値は

$$1 - (1 - \omega + \omega\cos\alpha_i)^{2m} \quad (5)$$

となる．また，1 次元の場合 r と p のステンシルは

$$r = \frac{1}{4}[1 \ 2 \ 1], \quad p = [\frac{1}{2} \ 1 \ \frac{1}{2}]$$

であり，

$$r\boldsymbol{\nu}_i^{(2)} = \frac{1 + \cos\alpha_i}{2}\boldsymbol{\nu}_i^{(1)}$$

である．ここで $\boldsymbol{\nu}^{(2)}$, $\boldsymbol{\nu}^{(1)}$ はそれぞれ Ω_2, Ω_1 上のベクトルで，$\boldsymbol{\nu}^{(1)} = (\sin\alpha_i^{(1)} \ \sin 2\alpha_i^{(1)} \ \cdots \ \sin N\alpha_i^{(1)})^T$, $\alpha_i^{(1)} = (\frac{1}{2} + i)\frac{2\pi}{N}$ ($i = 0, 1, 2, \cdots, N/2 - 1$) である．ここで $\boldsymbol{\nu}_{N-i-1}^{(1)} = -\boldsymbol{\nu}_i^{(1)}$ となることに注意．これより，

$$P_1^{-1} r Q_2 \boldsymbol{\nu}_i^{(2)} = 2(1 - \omega + \omega\cos\alpha_i)(1 + \cos\alpha_i)\boldsymbol{\nu}_i^{(1)} \quad (6)$$

となる．また，$\alpha_{N-i-1} = -\alpha_i + \pi$ より，

$$\sin j\alpha_{N-i-1} = \begin{cases} \sin j\alpha_i, & j\text{は奇数} \\ -\sin j\alpha_i, & \text{それ以外} \end{cases}$$

となるため，$\boldsymbol{\nu}_i^{(2)} + \boldsymbol{\nu}_{N-i-1}^{(2)}$ で $\Omega_2 - \Omega_1$ のグリッド上の点のみ表すことができる．これを用いると，

$$\begin{aligned} p\boldsymbol{\nu}_i^{(1)} &= \cos\alpha_i \frac{\boldsymbol{\nu}_i^{(2)} + \boldsymbol{\nu}_{N-i-1}^{(2)}}{2} + \frac{\boldsymbol{\nu}_i^{(2)} - \boldsymbol{\nu}_{N-i-1}^{(2)}}{2} \\ &= \frac{1 + \cos\alpha_i}{2}\boldsymbol{\nu}_i^{(2)} - \frac{1 - \cos\alpha_i}{2}\boldsymbol{\nu}_{N-i-1}^{(2)} \quad (7) \end{aligned}$$

となる．従って，式 (5), (6), (7) 等を使うと，

$$\begin{aligned} B\boldsymbol{\nu}_i = &\left(1 - \frac{1 - \cos\alpha_i}{2}(1 - \omega + \omega\cos\alpha_i)^{2m}\right)\boldsymbol{\nu}_i \\ &- \frac{1 - \cos\alpha_i}{2}(1 - \omega + \omega\cos\alpha_i)^m \\ &(1 - \omega - \omega\cos\alpha_i)^m \boldsymbol{\nu}_{N-i-1} \quad (8) \end{aligned}$$

となる．ここで，B の固有ベクトルを $k_1\boldsymbol{\nu}_i + k_2\boldsymbol{\nu}_{N-i-1}$, 対応する固有値を λ と置けば，

$$B(k_1\boldsymbol{\nu}_i + k_2\boldsymbol{\nu}_{N-i-1}) = \lambda(k_1\boldsymbol{\nu}_i + k_2\boldsymbol{\nu}_{N-i-1}) \quad (9)$$

となる．式 (8), (9) 等より λ を求めると，

$$\begin{aligned} \lambda = 1, \ &1 - \frac{1 - \cos\alpha_i}{2}(1 - \omega + \omega\cos\alpha_i)^{2m} \\ &- \frac{1 + \cos\alpha_i}{2}(1 - \omega - \omega\cos\alpha_i)^{2m} \quad (10) \end{aligned}$$

となる．従って固有値の半分は 1 になることが分かる．$\omega = 1$ の場合，つまりポイントヤコビ法の時，固有値は 1 と $1 - \cos^{2m}\alpha_i$ となり robust でないことに注意．ここで $m = 1$ の場合，最適な ω とその時の条件数を求めることができる．行列 B の最大固有値は 1 なので，最小の固有値が最大になる時を求めれば良く，

$$\begin{aligned} &\max_{\omega}\min_{\alpha_i} \ 1 - \frac{1 - \cos\alpha_i}{2}(1 - \omega + \omega\cos\alpha_i)^2 \\ &\qquad - \frac{1 + \cos\alpha_i}{2}(1 - \omega - \omega\cos\alpha_i)^2 \\ &= \max_{\omega}\min_{\alpha_i} \ 1 - (1 - \omega)^2 - \omega(3\omega - 2)\cos^2\alpha_i \\ &= \frac{8}{9} \quad (11) \end{aligned}$$

となる．この時，$\omega = \frac{2}{3}$ であり，条件数は 9/8 となる．この結果はフーリエ解析[6)] によって短波長成分 (rough wavenumber set) を最小にするように得た最適な ω と

同じであり, またこの時のスムージングファクタ[☆]は $1/9$ となり, これから算出した条件数は $9/8$ となり一致する.

3.2 レッドブラックガウスザイデル法

レッドブラックガウスザイデル法は

$$P = \frac{1}{h^2}\begin{pmatrix} 2 & -1 & & & & & \\ & 2 & & & & & \\ & -1 & 2 & -1 & & & \\ & & & \ddots & & & \\ & & & -1 & 2 & -1 & \\ & & & & & 1 & \end{pmatrix}$$

とおいて構成される. この P は対称行列ではないため, 2節の条件 (2) を満たすように, ポストスムージングでは P^T を用いる. この時ブラックレッドガウスザイデル法となる[☆☆]. この時,

$$P^{-1}Q\boldsymbol{\nu}_i = \frac{\cos\alpha_i(1+\cos\alpha_i)}{2}\boldsymbol{\nu}_i - \frac{\cos\alpha_i(1-\cos\alpha_i)}{2}\boldsymbol{\nu}_{N-i-1} \quad (12)$$

となる, また

$$(P^{-1}L)^{-1}\boldsymbol{\nu}_i = \frac{2-\cos\alpha_i}{2(1-\cos\alpha_i)}\boldsymbol{\nu}_i - \frac{\cos\alpha_i}{2(1+\cos\alpha_i)}\boldsymbol{\nu}_{N-i-1}$$

$$P_{l-1}^{-1}rQ_l\boldsymbol{\nu}_i^{(2)} = \cos\alpha_i(1+2\cos^2\alpha_i)\boldsymbol{\nu}_i^{(1)} - \cos\alpha_i(1-2\cos^2\alpha_i)\boldsymbol{\nu}_{\frac{N}{2}-i-1}^{(1)}$$

などを使うと,

$$B\boldsymbol{\nu}_i = \left(1-\frac{\cos^3\alpha_i}{2}\right)\boldsymbol{\nu}_i - \frac{\cos^3\alpha_i(1-\cos\alpha_i)}{2(1+\cos\alpha_i)}\boldsymbol{\nu}_{N-i-1} \quad (13)$$

となる. ここで前節と同様に B の固有ベクトルを $k_1\boldsymbol{\nu}_i + k_2\boldsymbol{\nu}_{N-i-1}$, 対応する固有値を λ とおけば λ は以下の 2 次方程式

$$\lambda^2 - 2\lambda + 1 = 0$$

の解となる. これより, $\lambda = 1$ となり, レッドブラックガウスザイデル法をスムージング法とした 2 グリッド前処理はもはや前処理ではなく, 直接解法となる.

4. 2 次元ポアソン方程式

2 次元ポアソン方程式

$$-\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)u(x,y) = f(x,y) \quad \text{in } \Omega = [0,1]\times[0,1]$$

$$\text{with} \quad \begin{array}{ll} u = 0 & \text{on } x=0 \text{ or } y=0 \\ \frac{\partial u}{\partial n} = 0 & \text{on } x=1 \text{ or } y=1 \end{array}$$

を $N \times N$ のメッシュで離散化を行なうとブロック 3 重対角行列となり, そのステンシルは

$$\frac{1}{h^2}\begin{bmatrix} & -1 & \\ -1 & 4 & -1 \\ & -1 & \end{bmatrix}$$

となる. ここで $\partial/\partial n$ は境界の外向き法線方向への微分を表し, $h = \frac{1}{N}$ である. 簡単のため N は偶数とする.

4.1 減速ヤコビ法

1 次元の時と同様に

$$P = \frac{1}{\omega}\mathrm{diag}(L)$$

とおく. この時 $\boldsymbol{\nu}_{ij} = (\sin\alpha_i \sin\alpha_j \ \sin 2\alpha_i \sin\alpha_j \ \cdots \ \sin(N-1)\alpha_i \sin(N-1)\alpha_j)^T$ とおくと

$$P^{-1}Q\boldsymbol{\nu}_{ij} = \left(1-\omega+\frac{\omega(\cos\alpha_i+\cos\alpha_j)}{2}\right)\boldsymbol{\nu}_{ij}$$

となる.

4.1.1 セミコースニング

セミコースニングとは粗いグリッドとして x 方向あるいは y 方向だけメッシュを粗くしたグリッドを用いる方法である. x 方向にセミコースニングを行なった場合, Ω_1 上の係数行列のステンシルは

$$L_1 = \frac{1}{4h^2}\begin{bmatrix} & -4 & \\ -1 & 10 & -1 \\ & -4 & \end{bmatrix}$$

となる. p と r のステンシルは 1 次元の時と同様に

$$r = \frac{1}{4}[1\ 2\ 1], \quad p = [\frac{1}{2}\ 1\ \frac{1}{2}]$$

となり,

$$P_1^{-1}rQ_2\boldsymbol{\nu}_{ij}^{(2)} = \frac{4}{5}(1-\omega+\frac{\omega(\cos\alpha_i+\cos\alpha_j)}{2})\times(1+\cos\alpha_i)\boldsymbol{\nu}_{ij}^{(1)} \quad (14)$$

となる. また $p\boldsymbol{\nu}_{ij}^{(1)}$ は $\boldsymbol{\nu}_{ij}^{(2)}$ と $\boldsymbol{\nu}_{N-i-1,j}^{(2)}$ を用い,

$$p\boldsymbol{\nu}_{ij}^{(1)} = \frac{1+\cos\alpha_i}{2}\boldsymbol{\nu}_{ij}^{(2)} - \frac{1-\cos\alpha_i}{2}\boldsymbol{\nu}_{N-i-1,j}^{(2)}$$

となる. 従って,

$$B\boldsymbol{\nu}_{ij} = \left\{1-(A+B)^{2m}+\frac{2}{5}\frac{\left(1-\frac{\cos\alpha_i+\cos\alpha_j}{2}\right)(1+\cos\alpha_i)^2}{1-\frac{\cos 2\alpha_i+4\cos\alpha_j}{5}}(A+B)^{2m}\right\}\boldsymbol{\nu}_{ij} - \frac{2}{5}\frac{\left(1-\frac{\cos\alpha_i+\cos\alpha_j}{2}\right)(1-\cos^2\alpha_i)}{1-\frac{\cos 2\alpha_i+\cos\alpha_j}{2}}\times(A+B)^m(A-B)^m\boldsymbol{\nu}_{N-i-1,j}$$

となる. ここで, $A = 1-\omega+\frac{\omega}{2}\cos\alpha_j$, $B = \frac{\omega}{2}\cos\alpha_i$ である. 従って固有値は 1 次元の場合と同様に求めることができ, ω を変えた時の固有値分布を図 1に示す. フーリエ解析によって得た最適な $\omega = 4/5$ であり, この時

☆ 短波長成分における反復行列の最大固有値.

☆☆ 簡単のためブレスムージングにレッドブラックガウスザイデル法を用いたが, レッドブラック対称ガウスザイデル法を用いれば条件 (1) が満たされる.

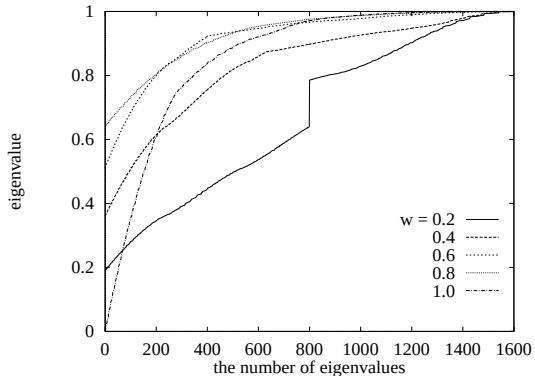


図 1 2 次元ポアソン問題をセミコースニング, 減速ヤコビ法を用いた 2 グリッド前処理後の固有値分布

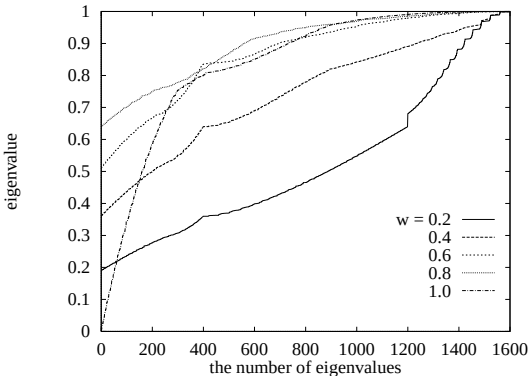


図 2 2 次元ポアソン問題をスタンダードコースニング, 減速ヤコビ法を用いた 2 グリッド前処理後の固有値分布

のスムージングファクタは $9/25$ となる. この値より算出した最小固有値とここで数値的に得た最小固有値は非常に近い値を示している.

4.1.2 スタンダードコースニング

2 次元のスタンダードコースニングでは粗いグリッドとして x 方向, y 方向ともに粗くしたグリッドを用いる. p と r のステンシルは

$$r = \frac{1}{16}\begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 2 & 4 & 2 \\ 1 & 2 & 1 \end{bmatrix}, \quad p = \begin{bmatrix} \frac{1}{4} & \frac{1}{2} & \frac{1}{4} \\ \frac{1}{2} & 1 & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{4} & \frac{1}{2} & \frac{1}{4} \end{bmatrix}$$

である. これより

$$P_{l-1}^{-1} r Q_l \boldsymbol{\nu}_{ij}^{(2)} = (1 - \omega + \frac{\omega(\cos\alpha_i + \cos\alpha_j)}{2}) (1+\cos\alpha_i)(1+\cos\alpha_j)\boldsymbol{\nu}_{ij}^{(1)}$$

となる. また $p\boldsymbol{\nu}_{ij}^{(1)}$ は $\boldsymbol{\nu}_{ij}^{(2)}$, $\boldsymbol{\nu}_{N-i-1,j}^{(2)}$, $\boldsymbol{\nu}_{i,N-j-1}^{(2)}$, $\boldsymbol{\nu}_{N-i-1,N-j-1}^{(2)}$ の 4 本のベクトルを用い,

$$\begin{aligned} p\boldsymbol{\nu}_{ij}^{(1)} = & \frac{1+\cos\alpha_i}{2}\frac{1+\cos\alpha_j}{2}\boldsymbol{\nu}_{ij}^{(2)} \\ & - \frac{1-\cos\alpha_i}{2}\frac{1+\cos\alpha_j}{2}\boldsymbol{\nu}_{N-i-1,j}^{(2)} \\ & - \frac{1+\cos\alpha_i}{2}\frac{1-\cos\alpha_j}{2}\boldsymbol{\nu}_{i,N-j-1}^{(2)} \\ & + \frac{1-\cos\alpha_i}{2}\frac{1-\cos\alpha_j}{2}\boldsymbol{\nu}_{N-i-1,N-j-1}^{(2)} \end{aligned}$$

となる. 従って

$$\begin{aligned} B\boldsymbol{\nu}_{ij} = & \left\{1 - \left(1-\omega+\frac{\omega(\cos\alpha_i+\cos\alpha_j)}{2}\right)^{2m}\right\}\boldsymbol{\nu}_{ij} + \\ & \frac{\left(1-\frac{\cos\alpha_i+\cos\alpha_j}{2}\right)\left(1-\omega+\frac{\omega(\cos\alpha_i+\cos\alpha_j)}{2}\right)^m}{1-\frac{\cos 2\alpha_i+\cos 2\alpha_j}{2}} \\ & \times(1+\cos\alpha_i)(1+\cos\alpha_j) \\ & \times\left\{\frac{1+\cos\alpha_i}{2}\frac{1+\cos\alpha_j}{2}\right. \\ & \quad \times\left(1-\omega+\frac{\omega(\cos\alpha_i+\cos\alpha_j)}{2}\right)^m \boldsymbol{\nu}_{ij} \\ & - \frac{1-\cos\alpha_i}{2}\frac{1+\cos\alpha_j}{2} \\ & \quad \times\left(1-\omega+\frac{\omega(-\cos\alpha_i+\cos\alpha_j)}{2}\right)^m \boldsymbol{\nu}_{N-i-1,j} \\ & - \frac{1+\cos\alpha_i}{2}\frac{1-\cos\alpha_j}{2} \\ & \quad \times\left(1-\omega+\frac{\omega(\cos\alpha_i-\cos\alpha_j)}{2}\right)^m \boldsymbol{\nu}_{i,N-j-1} \\ & + \frac{1-\cos\alpha_i}{2}\frac{1-\cos\alpha_j}{2} \\ & \quad \times\left(1-\omega+\frac{\omega(-\cos\alpha_i-\cos\alpha_j)}{2}\right)^m \\ & \quad \left.\times\boldsymbol{\nu}_{N-i-1,N-j-1}\right\} \end{aligned} \tag{15}$$

となる. この行列 B の固有値を求めるために, 固有ベクトルを $k_1\boldsymbol{\nu}_{ij} + k_2\boldsymbol{\nu}_{N-i-1,j} + k_3\boldsymbol{\nu}_{i,N-j-1} + k_4\boldsymbol{\nu}_{N-i-1,N-j-1}$ と置き, 固有値を λ とすると

$$\begin{aligned} & B(k_1\boldsymbol{\nu}_{ij} + k_2\boldsymbol{\nu}_{N-i-1,j} + \\ & \quad k_3\boldsymbol{\nu}_{i,N-j-1} + k_4\boldsymbol{\nu}_{N-i-1,N-j-1}) \\ & = \lambda(k_1\boldsymbol{\nu}_{ij} + k_2\boldsymbol{\nu}_{N-i-1,j} + \\ & \quad k_3\boldsymbol{\nu}_{i,N-j-1} + k_4\boldsymbol{\nu}_{N-i-1,N-j-1}) \end{aligned} \tag{16}$$

となる. 式 (15), (16) より, 以下のような 4×4 の行列の固有値問題に帰着される.

$$\begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & c_{14} \\ c_{21} & c_{22} & c_{23} & c_{24} \\ c_{31} & c_{32} & c_{33} & c_{34} \\ c_{41} & c_{42} & c_{43} & c_{44} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} k_1 \\ k_2 \\ k_3 \\ k_4 \end{pmatrix} = \lambda\begin{pmatrix} k_1 \\ k_2 \\ k_3 \\ k_4 \end{pmatrix} \tag{17}$$

ここで, $c_{ij}, (i,j=1,2,3,4)$ は対応する係数である. いくつかの ω に対して, この固有値問題を解いて得た固有値分布を図 2に示す. フーリエ解析によって得た最適な ω, その時のスムージングファクタはセミコースニングの時と等しく, それぞれ $4/5$, $9/25$ となり, スムージングファクタより算出した最小固有値はここで数値的に得た最小固有値と非常に近い値を示している.

4.2 レッドブラックガウスザイデル法

$P^{-1}Q$ をレッドブラックガウスザイデル法の反復行列とした場合,

$$P^{-1}Q\boldsymbol{\nu}_{ij} = \frac{\cos\alpha_i+\cos\alpha_j}{2}\frac{\boldsymbol{\nu}_{ij}+\boldsymbol{\nu}_{N-i-1,N-j-1}}{2} + \left(\frac{\cos\alpha_i+\cos\alpha_j}{2}\right)^2 \frac{\boldsymbol{\nu}_{ij}-\boldsymbol{\nu}_{N-i-1,N-j-1}}{2}$$

となる. また,

$$P_1^{-1}rQ_2\boldsymbol{\nu}_{ij}^{(2)} = \frac{A(1+A^2-B^2)}{2} \times\left(2+\frac{\cos 2\alpha_i+\cos 2\alpha_j}{2}\right)\boldsymbol{\nu}_{ij}^{(1)} - \frac{A(1+A^2-B^2)}{2} \times\frac{\cos 2\alpha_i+\cos 2\alpha_j}{2}\boldsymbol{\nu}^{(1)}_{\frac{N}{2}-i-1,\frac{N}{2}-j-1}$$

である. ここで, $A=\frac{\cos\alpha_i+\cos\alpha_i}{2}$, $B=\frac{-\cos\alpha_i+\cos\alpha_i}{2}$ である. この時,

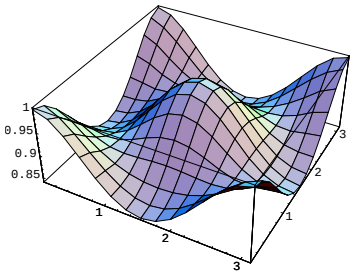
$$\begin{aligned}B\boldsymbol{\nu}_{ij} &= \left\{1-\frac{A^2(1+A)}{2}+\frac{A^2(1-A^2)(1+A)(1+A^2-B^2)^2}{8(1-A^2-B^2)}\right\}\boldsymbol{\nu}_{ij}\\ &-\frac{AB(1-A^2)(1+B)(1+A^2-B^2)(1-A^2+B^2)}{8(1-A^2-B^2)}\boldsymbol{\nu}_{N-i-1,j}\\ &+\frac{AB(1-A^2)(1-B)(1+A^2-B^2)(1-A^2+B^2)}{8(1-A^2-B^2)}\boldsymbol{\nu}_{i,N-j-1}\\ &+\left\{\frac{A^2(1-A)}{2}-\frac{A^2(1-A^2)(1-A)(1+A^2-B^2)^2}{8(1-A^2-B^2)}\right\}\boldsymbol{\nu}_{N-i-1,N-j-1}\end{aligned}$$

となって, 減速ヤコビ法の時と同じように 4×4 の行列の固有値問題に帰着される. ところが, その行列を C, 単位行列を I とおいた時, $\mathrm{rank}(C-I)=2$ となることを示すことが出来, この行列は重複固有値 1 を持つことが分かる. このことを使うと C の特性多項式は図 3で示される. ここで $i,j=0,\cdots,\frac{N}{2}-1$ である. この特性多項式の零点が固有値であり, 固有値の半分が 1 となることが分かる. ここでスタンダードコースニングのため長波長成分は全体の $1/4$ しかないことに注意. これから自明でない二つの固有値について解析を行なう. この二つの固有値は 2 次方程式の解として表される. 前処理後の行列は正定値なのでこの解が実数になるのは明らかである. また $f(\lambda)$ をその 2 次方程式とおくと,

$$f(1)\geq 0$$

を証明することができた. が, 係数が複雑なのでそれ以上の解析が困難であるため, これからの解析ではグラフを用いる. 図 4は軸と $f(3/4)$ の値をグラフにしたものである. これより軸は 1 と 0.85 の間にあり, $f(3/4)\geq 0$ であることが分かる. したがって固有値の範囲は $3/4\leq\lambda\leq 1$ となる[☆]. また図 5は 2 つの解をグラフにしたものである. 以上のことよりこの時の前処理後の行列の条件数は $4/3$ であることが証明された.

[☆] 本当は $f(3/4)>0$ となるため, $3/4<\lambda\leq 1$.



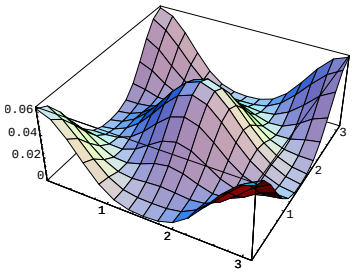


図 4 軸と $f(3/4)$

5. MGCG 法の収束率

解くべき連立一次方程式を $A\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ とする. 共役勾配法の k 反復は, 残差 $\boldsymbol{r}_k=\boldsymbol{b}-A\boldsymbol{x}_k$ をクリロフ空間 $K^k(A;\boldsymbol{r}_0)=\mathrm{Span}(\boldsymbol{r}_0,A\boldsymbol{r}_0,A^2\boldsymbol{r}_0,\ldots,A^{k-1}\boldsymbol{r}_0)$ で $\boldsymbol{r}_k^TA^{-1}\boldsymbol{r}_k$ が最小になるように定めることにより解 $\boldsymbol{x}$ を求める解法である. ここで真の解を $\hat{\boldsymbol{x}}$ とおき誤差を $\boldsymbol{e}_k=\hat{\boldsymbol{x}}-\boldsymbol{x}_k$ とすると, $A\boldsymbol{e}_k=\boldsymbol{r}_k$ から

$$\boldsymbol{r}_k^TA^{-1}\boldsymbol{r}_k=\boldsymbol{e}_k^TA\boldsymbol{e}_k=\|\boldsymbol{e}_k\|_A$$

となる. 従って共役勾配法の k 反復後の誤差 $\boldsymbol{e}_k=P_k(A)\boldsymbol{e}_0$ は

$$\begin{aligned}\|\boldsymbol{e}_k\|_A &= \min_{P_k\in\pi_k^1}\|P_k(A)\boldsymbol{e}_0\|_A\\ &\leq \min_{P_k\in\pi_k^1}\max_{\lambda\in S(A),\lambda\neq0}|P_k(\lambda)|\ \|\boldsymbol{e}_0\|_A\end{aligned}$$

となるように決められることになる. ここで π_k^1 は $P_k(0)=1$ となる k 次多項式の集合で, $S(A)$ は行列 A のスペクトル (固有値の集合) である. ここで $\min_{P_k\in\pi_k^1}\max_{\lambda\in S(A),\lambda\neq0}|P_k(\lambda)|$[☆☆] の評価を行なう必要があるが, この評価は離散点の集合による最適近似問題であり非常に困難である. 従って離散点の集合を区間で置き換え,

$$\begin{aligned}&\min_{P_k\in\pi_k^1}\max_{\lambda\in S(A),\lambda\neq0}|P_k(\lambda)|\\ &\quad\leq\min_{P_k\in\pi_k^1}\max_{\lambda_{\min}\leq\lambda\leq\lambda_{\max}}|P_k(\lambda)|\end{aligned}$$

を用いて評価を行なう. 以後 $a=\lambda_{\min}$, $b=\lambda_{\max}$ とお

[☆☆] $\lambda\neq0$ は A がランク落ちの場合を考慮し入れてあるが, 本研究では必要ない.

$$(\lambda-1)^2\left\{\lambda^2+\left(-2+A^2+B^2-\frac{A^2(1-A^2)(1+A^2-B^2)^2}{4(1-A^2-B^2)}-\frac{B^2(1-B^2)(1-A^2+B^2)^2}{4(1-A^2-B^2)}\right)\lambda\right.$$
$$\left.+(1-A^2)(1-B^2)\left(1+\frac{A^2(1+A^2-B^2)^2}{4(1-A^2-B^2)}+\frac{B^2(1-A^2+B^2)^2}{4(1-A^2-B^2)}\right)\right\}$$

図 3　C の特性多項式

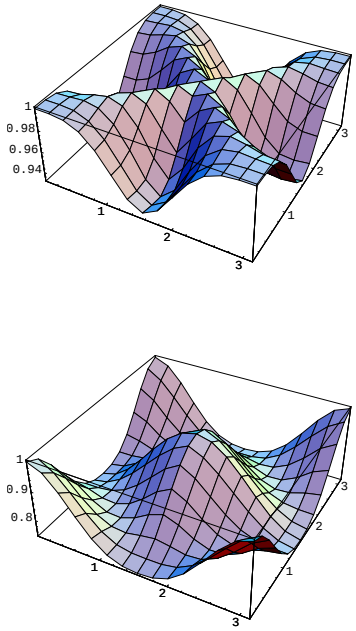


図 5　$f(\lambda)=0$ の 2 解

く. この時 P_k はチェビシェフ多項式 T_k を用いて表すことができる.

$$\min_{P_k\in\pi_k^1}\max_{a\le\lambda\le b}|P_k(\lambda)|=\max\frac{|T_k\left(\frac{b+a-2x}{b-a}\right)|}{T_k\left(\frac{b+a}{b-a}\right)}$$

ここでチェビシェフ多項式は以下のように表せる.

$$T_k(x)=\frac{1}{2}\left\{(x+\sqrt{x^2-1})^k+(x-\sqrt{x^2-1})^k\right\}$$

$|T_k\left(\frac{b+a-2x}{b-a}\right)|=1$ より, $A=\frac{\sqrt{\sigma}-1}{\sqrt{\sigma}+1}$, $\sigma=\frac{b}{a}$ と置くと,

$$\min_{P_k\in\pi_k^1}\max_{a\le\lambda\le b}|P_k(\lambda)|=\frac{2A^k}{1+A^{2k}}$$

である. これより

$$\frac{\|e^k\|_A}{\|e^0\|_A}\le\frac{2A^k}{1+A^{2k}}$$

となるため, 平均収束率は $\left(\frac{2}{1+A^{2k}}\right)^{\frac{1}{k}}A$ であり, 漸近収束率は A となる[1]. 従ってこれらよりそれぞれの問題における MGCG 法の漸近収束率をまとめると表 2になる. 2 次元の時, 減速ヤコビ法をスムージング法に用いる場合, セミコースニングとスタンダードコースニングの 2 通りで固有値分布を求めたが, いずれも条件数は同じだったためまとめてある.

表 2　MGCG 法の漸近収束率

	ヤコビ	RB-GS
1 次元	0.0294	0
2 次元	0.111	0.0718

6. ま と め

この研究では 1 次元, 2 次元のポアソン問題に対して, 減速ヤコビ法, レッドブラックガウスザイデル法をスムージング法とした 2 グリッド前処理を行なった行列の固有値分布の解析を行なった. 1 次元では解析的な解が求まり, 2 次元では代数的であるが固有値を求めることが出来た. 減速ヤコビ法を用いた場合, 条件数はスムージングファクタに依存し, またレッドブラックガウスザイデル法を用いた場合, 2 次元の場合条件数が 4/3 となることが分かった. 本研究では得られた条件数を元に MGCG 法の漸近収束率を示したが, これから固有値分布によるより精密な収束率の評価, 数値実験による検証, 多次元問題の解析, マルチグリッド前処理への拡張等を行なっていきたい.

参 考 文 献

1) Axelsson, O.: *Iterative Solution Methods*, Cambridge University Press (1994).
2) Hackbusch, W.: *Multi-Grid Methods and Applications*, Springer-Verlag (1985).
3) Kettler, R.: Analysis and Comparison of Relaxation Schemes in Robust Multigrid and Preconditioned Conjugate Gradient Methods, *Multigrid Methods*, LNM, Vol. 960, Springer-Verlag, pp. 502–534 (1982).
4) Tatebe, O.: The Multigrid Preconditioned Conjugate Gradient Method, *Proceedings of Sixth Copper Mountain Conference on Multigrid Methods*, NASA Conference Publication 3224, pp. 621–634 (1993).
5) Tatebe, O. and Oyanagi, Y.: Efficient Implementation of the Multigrid Preconditioned Conjugate Gradient Method on Distributed Memory Machines, *Proceedings of Supercomputing '94*, IEEE Computer Society, pp. 194–203 (1994).
6) Wesseling, P.: *An introduction to multigrid methods*, John Wiley and Sons Ltd. (1992).