

岡山大学工学部 正会員 ○谷口健男
松尾橋梁(株) 松本洋一

1. まえがき

FEM等数値解法においては、大次元疎行列を係数とする連立一次方程式の有効な解法が望まれ、様々な計算法が考察されている。中でも近年注目されているものとして、修正共役傾斜法が挙げられ、計算時間短縮を図る様々な工夫がなされている。共役傾斜法は本来、 n 元の方程式に対して n 回の反復計算で正解に収束するものであるが、係数行列に対して前処理 (Preconditioning) を施すことにより、とくまりはるかに少ない反復回数で良い近似解を得ることができることが知られている¹⁾。本報告では、Preconditioner を具えたCG法 (PCG法) の収束性に関して理論的考察を行い、Preconditioner の違いが反復回数への影響を数値実験により探る。更に構造計算へのPCG法の導入の可能性に関して考察する。

2. CG法とその収束性の向上策

対称・正定値性をもつ n 元連立一次方程式

$$A \cdot x = b$$

(1)

に対するCG法の一般的なアルゴリズムは次のようなものである。 x_0 を初期値とす

Step 1. $r_0 = b - A x_0$

Step 2. $p_0 = r_0$

Step 3. $\alpha_k = \frac{p_k^t \cdot r_k}{p_k^t A p_k}$

Step 4. $x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k$

Step 5. $r_{k+1} = r_k - \alpha_k A p_k$

Step 6. $\beta_k = -\frac{r_{k+1}^t A p_k}{p_k^t A p_k}$

Step 7. $p_{k+1} = r_{k+1} + \beta_k p_k$

Step 8. Go To Step 3.

修正共役傾斜法は、解の収束性を向上させるために、上記アルゴリズムに Step 0. を追加し Newton 法等による初期値の改良を図る²⁾、あるいは Step 2, 6, 7 を次のように改良して反復計算回数の減少を図っている^{2) 3) 4)}。

Step 2'. $p_0 = B \cdot r_0$

Step 6'. $\beta_k = -\frac{r_{k+1}^t B A p_k}{p_k^t A p_k}$

Step 7'. $p_{k+1} = B r_{k+1} + \beta_k p_k$

特に後者は、単に反復回数の減少のみならず、1回の Iteration に要する演算時間の減少にも大いに役立っている。なお、修正アルゴリズム中の行列 B は、次に述べる行列である。この修正法として、行列 A の行列分離 (Matrix Splitting) を利用するものと、行列分解 (Matrix Decomposition) したものに入力される。

(a). 行列分離法 1例を挙げると次のようなものである。²⁾

$$A = L + D + L^t \quad (L: \text{下三角行列}, D: \text{対角行列})$$

と置き、 $D^{-1/2}$ を両側からかけると

$$A' = L' + I + (L')^t \quad (L': \text{単位行列})$$

と置く。

$$C = I + \omega L' \quad (\omega: \text{調整パラメータ}) \text{ とおく}$$

$$B = (C C^t)^{-1}$$

(2)

(b). 行列分解法 1例として Incomplete Cholesky Decomposition を示す。⁶⁾ A を Cholesky 分解すると

$$A = L \cdot L^t$$

この L の替わりに、例えば A の下三角部の非零要素が存在する要素のみ残した下三角行列を $\tilde{L}$ とおくと、 A の近似逆行列として

$$B = (\tilde{L} \cdot \tilde{L}^t)^{-1}$$

(3)

$\tilde{L}$ とし 2 種々の考え方をとることができるとは明らかであり、一義的には決まらない。

(2), (3) 式を上記修正アルゴリズムに導入したのが、修正共役傾斜法である。

3. PCG法の反復回数の理論的予測

反復回数予測の理論的誘導は文献^{1), 2), 3)}を参照されたい。結論のみを示すと、相対誤差 ε ($0 < \varepsilon \leq 1$) とおけば、この精度を得るに必要反復回数の上界 IT は、

$$IT \leq INT \left[\frac{1}{2} \sqrt{\sigma} \ln \left(\frac{2}{\varepsilon} \right) + 1 \right] \quad (4)$$

上式中、 σ は行列の条件数、 INT は小数点以下切り捨てを示す。Chandraは Incomplete Cholesky 分解を用いる時、 σ は $O(n)$ に抑えられることを示している⁷⁾。これを適用すると、

$$IT \leq INT \left[\frac{1}{2} \sqrt{n} \ln \left(\frac{2}{\varepsilon} \right) + 1 \right] \quad (5)$$

即ち、 IT は元行列の平方根に抑えられることがわかる。このことは Preconditioner の使用により行列の条件数が改良され、これにより、Iteration 数が減少する。

4. 数値実験

図1に示した5モデルに対し、 $1/n$ の等分布荷重を載荷し、 $EPS=10^{-7}$ までの反復回数を計測した結果を図2~6に示す。なおモデルは単位領域を $NG1, NG2$ に分割したもので用いている。 $n = NG1 \times NG2$ 。以下(5)式で示されたように $\sqrt{n}$ のオーダーの反復回数で収束していることがわかる。もし $IT = C \cdot INT \left[\frac{1}{2} \sqrt{n} \ln \left(\frac{2}{\varepsilon} \right) + 1 \right]$ と表現すれば、特に、行列分離法では C の幅として3程度であることがわかる。更に、行列分離の方が有効であり、SOR法の加速パラメータと違い、調整パラメータ ω は IT に対して鈍い。これは、利用する立場より言えば非常に都合が良い。

5. おとがき

四周辺固定極の解析等、拘束条件を有する点散が多い場合、PCG法は有効である。反復回数が $\sqrt{n}$ 以下のオーダーに抑えられる。従って、2次元行列に対して他の反復法と違い、非常に有効であると言える。なお、本研究進行に御協力いただいた佐賀県方野口幹展氏に感謝致します。 [参考文献] 1) O. Axelsson, Lecture Note in Math., No. 572, Springer 1-51, 1977, 2) 野寺隆, Seminar Math. Sci., No. 7, Kyoto Univ., 1973, 3) G. Gambolati, Int. J. Num. Meth. Eng., 15, 661-675, 4) M.A. Aziz & A. Jennings, Int. J. Num. Meth. Eng., 20, 949-966, 1984, 5) 梶本洋一, 岡山大学卒業論文, 1984, 6) J.A. Meijerink et al., J. Comp. Phys., 44, 134-155, 1981, 7) P. Chandra, Res. Rep. No. 129, Yale Univ., 1978

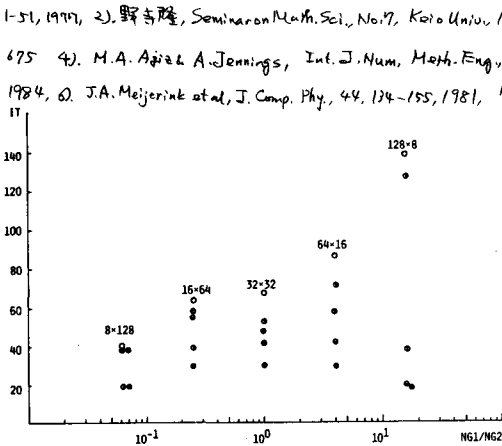


FIG. 2 NG1/NG2 - IT Relation for $EPS=10^{-7}$ (MATRIX DECOMPOSITION)

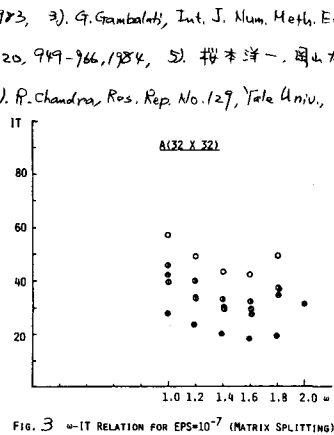


FIG. 3 ω -IT Relation for $EPS=10^{-7}$ (MATRIX SPLITTING)

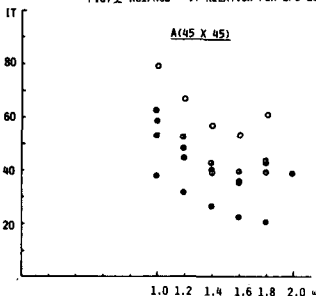


FIG. 4 ω -IT Relation for $EPS=10^{-7}$ (MATRIX SPLITTING)

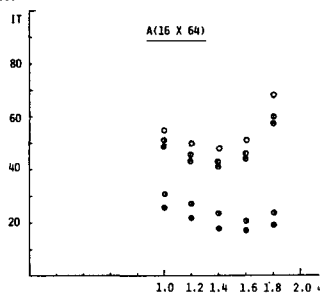


FIG. 5 ω -IT Relation for $EPS=10^{-7}$ (MATRIX SPLITTING)

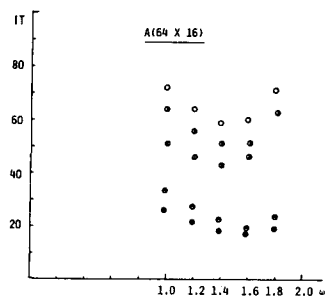


FIG. 6 ω -IT Relation for $EPS=10^{-7}$ (MATRIX SPLITTING)

