

ポアソン方程式に対する MGCG 法の収束率

東京大学理学部情報科学科 建部 修見 (Osamu Tatebe)

東京大学理学部情報科学科 小柳 義夫 (Yoshio Oyanagi)

E-mail: {tatebe,oyanagi}@is.s.u-tokyo.ac.jp

要旨

2 次元ポアソン方程式に対し, MGCG 法がロバストであり問題サイズに依存せず非常に早く収束することを証明した. MGCG 法の収束率を解析するためには MG 前処理後の行列の固有値分布を知る必要があるが, 各グリッドにおけるフーリエモードを用いることにより解析的に全固有値を求めることに成功した. 得られた分布は連続しており, その分布の区間による MGCG 法の収束率の評価は非常に良い評価であり, スムービング法に RB-GS 法を用いた場合 0.072 であった.

1 はじめに

MGCG 法はマルチグリッド (MG) 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 [6]. 理論的な収束率の解析のためには MG 前処理後の行列の固有値解析を行なう必要がある. 本研究ではそれぞれのグリッドのフーリエモードを用いることにより拡散係数が一定の 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 (RB-GS) 法をそれぞれスムービング法とする MG 前処理後の行列の固有値を解析的に求め, 収束率の解析を行なう.

2 2 グリッド前処理

MG 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. 実際に解きたい (細かい) グリッドをグリッドレベル 2 のグリッド Ω_2 とし, そのグリッドにおける連立一次方程式を $L_2 u^{(2)} = f^{(2)}$ 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, それぞれプロロンゲーション, レストリクションを表している. $H_1 (= P_1^{-1} Q_1), H_2 (= P_2^{-1} Q_2)$ はそれぞれプレスムービング, ポストスムービングの反復行列, 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; 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, $p = c r^T$ (c は定数), $P_2 = P_1^T, m_1 = m_2 = m (\geq 1)$ の条件を満たす必要がある [5]. この時 2 グリッド前処理後の行列 B は以下ようになる.

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

特に P_1 が対称の場合はこれを P とおいて以下のようになる.

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

表 1. 2 グリッド前処理

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

3 1次元ポアソン方程式

1次元では以下の1次元ポアソン方程式

$$-\frac{d^2 u(x)}{dx^2} = f(x) \quad \text{with} \quad u(0) = 0, \quad \frac{du(1)}{dx} = 0 \quad (3)$$

をモデル問題として MGCG 法の収束率の評価を行なう。このモデル問題では境界条件がノイマン-ディリクレ条件であるが、以下の評価は簡単にディリクレ条件にも適用できる。式(3)について、 Ω を N 等分し離散化すると、

$$\frac{1}{h^2} \begin{pmatrix} 2 & -1 & & \\ -1 & 2 & -1 & \\ & & \ddots & \\ & & & -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_N \end{pmatrix} \quad (4)$$

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 $P = \frac{1}{\omega} \text{diag}(L_2)$ とおき、反復式 $P\mathbf{x}^{i+1} = Q\mathbf{x}^i + \mathbf{f}$ を初期ベクトル $\mathbf{x}^0$ より反復することにより構成される。ここで $Q = P - L_2$ 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、 $\alpha_i = (\frac{1}{2} + i)\frac{\pi}{N}$ ($i = 0, 1, 2, \dots, N-1$) と置いた時、

$$P^{-1}Q\boldsymbol{\nu}_i = (1 - \omega + \omega \cos \alpha_i)\boldsymbol{\nu}_i \quad (5)$$

となる。ここで $\boldsymbol{\nu}_i = (\sin \alpha_i \sin 2\alpha_i \dots \sin N\alpha_i)^T$ である。式(5)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。

ディリクレ条件の場合は以下の議論において、 $\alpha_i = (1+i)\frac{\pi}{N}$ ($i = 0, 1, 2, \dots, N-2$) と置き、 $N-i-1$ を $N-i-2$ に置き換える等すればそのまま適用できる。

定理 1 1次元のモデル問題に対し、減速ヤコビ法 m 反復をスムージング法とする MG 前処理後の行列の固有値は 1 と

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

である。ただし 1 は $N/2$ 重の重複固有値である。

証明 行列 P が対称なので、2節の式(2)の行列 M 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(2)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

$$1 - (1 - \omega + \omega \cos \alpha_i)^{2m} \quad (6)$$

となる。また、1次元の場合 r と p のステンシルは $k \in \Omega_1$ の時、 $[r]_k = \frac{1}{4}[1 \ 2 \ 1]$, $[p^T]_k = \frac{1}{2}[1 \ 2 \ 1]$ 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、 $\boldsymbol{\nu}^{(1)} = (\sin \alpha_i^{(1)} \sin 2\alpha_i^{(1)} \dots \sin N\alpha_i^{(1)})^T$, $\alpha_i^{(1)} = (\frac{1}{2} + i)\frac{2\pi}{N}$ ($i = 0, 1, 2, \dots, N/2 - 1$) 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、

$$P_1^{-1}rQ_2\boldsymbol{\nu}_i^{(2)} = 2(1 - \omega + \omega \cos \alpha_i)(1 + \cos \alpha_i)\boldsymbol{\nu}_i^{(1)} \quad (7)$$

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

$$\sin j\alpha_{N-i-1}^{(2)} = \begin{cases} \sin j\alpha_i^{(2)}, & j \text{ が奇数の時} \\ -\sin j\alpha_i^{(2)}, & \text{それ以外} \end{cases} \quad (8)$$

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、

$$\begin{aligned} p\boldsymbol{\nu}_i^{(1)} &= \frac{\cos \alpha_i^{(2)}}{2}(\boldsymbol{\nu}_i^{(2)} + \boldsymbol{\nu}_{N-i-1}^{(2)}) + \frac{1}{2}(\boldsymbol{\nu}_i^{(2)} - \boldsymbol{\nu}_{N-i-1}^{(2)}) \\ &= \frac{1 + \cos \alpha_i}{2}\boldsymbol{\nu}_i^{(2)} - \frac{1 - \cos \alpha_i}{2}\boldsymbol{\nu}_{N-i-1}^{(2)} \end{aligned} \quad (9)$$

となる。従って、式(6), (7), (9)等を使うと、

$$\begin{aligned} B\boldsymbol{\nu}_i &= \left(1 - \frac{1 - \cos \alpha_i}{2}(1 - \omega + \omega \cos \alpha_i)^{2m}\right)\boldsymbol{\nu}_i^{(2)} \\ &\quad - \frac{1 - \cos \alpha_i}{2}(1 - \omega + \omega \cos \alpha_i)^m(1 - \omega - \omega \cos \alpha_i)^m\boldsymbol{\nu}_{N-i-1}^{(2)} \end{aligned} \quad (10)$$

となる。また $\cos \alpha_{N-i-1} = -\cos \alpha_i$ より、以下の式を得る。

$$B\nu_{N-i-1} = -\frac{1+\cos \alpha_i}{2}(1-\omega-\omega \cos \alpha_i)^m(1-\omega+\omega \cos \alpha_i)^m \nu_i^{(2)} + \left(1-\frac{1+\cos \alpha_i}{2}(1-\omega-\omega \cos \alpha_i)^{2m}\right) \nu_{N-i-1}^{(2)} \quad (11)$$

従って、 B の固有ベクトルは $\text{Span}(\nu_i, \nu_{N-i-1})$ にあり、その固有ベクトルを $k_1\nu_i + k_2\nu_{N-i-1}$ 、対応する固有値を λ と置けば、

$$B(k_1\nu_i + k_2\nu_{N-i-1}) = \lambda(k_1\nu_i + k_2\nu_{N-i-1}) \quad (12)$$

と表せる。よって、式 (10), (11), (12) より λ に関する以下の方程式を得る。

$$\lambda^2 - \left(2 - \frac{1-\cos \alpha_i}{2}(1-\omega+\omega \cos \alpha_i)^{2m} - \frac{1+\cos \alpha_i}{2}(1-\omega-\omega \cos \alpha_i)^{2m}\right) \lambda + 1 - \frac{1-\cos \alpha_i}{2}(1-\omega+\omega \cos \alpha_i)^{2m} - \frac{1+\cos \alpha_i}{2}(1-\omega-\omega \cos \alpha_i)^{2m} = 0 \quad (13)$$

これより、

$$\lambda = 1, 1 - \frac{1-\cos \alpha_i}{2}(1-\omega+\omega \cos \alpha_i)^{2m} - \frac{1+\cos \alpha_i}{2}(1-\omega-\omega \cos \alpha_i)^{2m} \quad (14)$$

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場合、固有値は 1 と $1 - \cos^{2m} \alpha_i$ となり、 $N \rightarrow \infty$ とすると $1 - \cos^{2m} \alpha_i \rightarrow 0$ となってしまうので robust でないことに注意。ここで $m = 1$ の場合、次の補題が成り立つ。

補題 1 $m = 1$ の時、 MG 前処理後の行列の最適な条件数は $\frac{9}{8}$ であり、この時 $\omega = \frac{2}{3}$ である。

証明 式 (14) より最大固有値は 1 なので、最小の固有値が最大になる時を求めれば良く、

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

である。この時、 $\omega = \frac{2}{3}$ であり、条件数は $9/8$ となる。■

補題 2 $m = 1, \omega = \frac{2}{3}$ の時、2 グリッド前処理を行なう $MGCG$ 法は 2 反復で収束する。

証明 $\omega = \frac{2}{3}$ の時、 $\lambda = \frac{8}{9}, 1$ 。■

この結果はフーリエ解析 [3, 7] 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¹は $1/9$ となり、ここで得られた 2 グリッド反復行列の最大固有値に一致する。

ディリクレ条件の場合は以下の定理が成り立つ。

定理 2 ディリクレ境界条件を持つ 1 次元ポアソン方程式に対して、減速ヤコビ法 m 反復をスムージング法とする 2 グリッド前処理後の固有値は 1 と $1 - (1-\omega)^{2m}$ と

$$1 - \frac{1-\cos \alpha_i}{2}(1-\omega+\omega \cos \alpha_i)^{2m} - \frac{1+\cos \alpha_i}{2}(1-\omega-\omega \cos \alpha_i)^{2m},$$

である。ただし $\alpha_i = (i+1)\frac{\pi}{N}$, $i = 0, 1, \dots, \frac{N}{2}-2$, 1 は $N/2$ 重の重複固有値。

証明 $\nu_i = (\sin \alpha_i \sin 2\alpha_i \cdots \sin(N-1)\alpha_i)^T$ とおくと、 $i = 0, 1, \dots, \frac{N}{2}-2$ に対して定理 1 の証明と同様に固有値 1 と

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

を持つ。 $i = \frac{N}{2}-1$ の時、 $\alpha_i = \frac{\pi}{2}$ となり、 $r\nu_i = 0$ である。従って、

$$B\nu_i = \{1 - (1-\omega)^{2m}\} \nu_i \quad (15)$$

となり定理が成り立つ。■

ディリクレ条件の場合も補題 2 は同様に成り立つ。

¹短波長成分における反復行列の最大固有値。

3.2 レッドブラックガウスザイデル法

RB-GS 法は

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

とにおいて構成される。この P は対称行列ではないため、ポストスミージングでは P^T を用いる。この時ブラックレッドガウスザイデル (BR-GS) 法となる。この時、以下の定理が成り立つ。

定理 3 RB/BR-GS 法をそれぞれプレ / ポストスミージング法とする 2 グリッド前処理後の行列の固有値は 1 である。

証明 $\nu_i = (\sin \alpha_i \sin 2\alpha_i \cdots \sin N\alpha_i)^T$ とおくと、

$$P^{-1}Q\nu_i = \frac{\cos \alpha_i(1 + \cos \alpha_i)}{2}\nu_i - \frac{\cos \alpha_i(1 - \cos \alpha_i)}{2}\nu_{N-i-1} \quad (16)$$

$$P^{-T}Q^T\nu_i = \frac{\cos \alpha_i(1 + \cos \alpha_i)}{2}\nu_i + \frac{\cos \alpha_i(1 - \cos \alpha_i)}{2}\nu_{N-i-1} \quad (17)$$

となる、また

$$(P^{-1}L)^{-1}\nu_i = \frac{2 - \cos \alpha_i}{2(1 - \cos \alpha_i)}\nu_i - \frac{\cos \alpha_i}{2(1 + \cos \alpha_i)}\nu_{N-i-1} \quad (18)$$

であり、さらに

$$P_{i-1}^{-1}rQ_i\nu_i^{(2)} = \cos \alpha_i(1 + 2\cos^2 \alpha_i)\nu_i^{(1)} - \cos \alpha_i(1 - 2\cos^2 \alpha_i)\nu_{\frac{N}{2}-i-1}^{(1)} \quad (19)$$

が成り立つ。従って、

$$B\nu_i = \left(1 - \frac{\cos^3 \alpha_i}{2}\right)\nu_i - \frac{\cos^3 \alpha_i(1 - \cos \alpha_i)}{2(1 + \cos \alpha_i)}\nu_{N-i-1} \quad (20)$$

$$B\nu_{N-i-1} = \frac{\cos^3 \alpha_i(1 + \cos \alpha_i)}{2(1 - \cos \alpha_i)}\nu_{N-i-1} \left(1 + \frac{\cos^3 \alpha_i}{2}\right)\nu_i \quad (21)$$

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

$$\lambda^2 - 2\lambda + 1 = 0 \quad (22)$$

の解となる。これより、 $\lambda = 1$ となる。■

定理 3 により、RB-GS 法をスミージング法とした 2 グリッド前処理はもはや前処理ではなく、直接解法となることが分かる。

補題 3 RB/BR-GS 法をそれぞれプレ / ポストスミージング法とした MG 前処理はポアソン方程式の直接解法である。

証明 定理 3 により、2 グリッド前処理は直接解法である。また i グリッドの MG 前処理が直接解法の時、定理 3 により $i+1$ グリッドの MG 前処理も直接解法となる。ゆえに MG 前処理は直接解法となる。■

ここで、ポストスミージング法の BR-GS 法で始めに更新されるブラックポイントは $\Omega_2 \setminus \Omega_1$ に含まれているとして計算していることに注意。

4 2 次元ポアソン方程式

2 次元では以下の 2 次元ポアソン方程式

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

$$\text{with } \begin{cases} u = 0 & \text{on } x = 0 \text{ or } y = 0 \\ \frac{\partial u}{\partial n} = 0 & \text{on } x = 1 \text{ or } y = 1 \end{cases} \quad (23)$$

をモデル問題とする. Ω 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 $P = \frac{1}{\omega} \text{diag}(L)$ とおく. この時 $\nu_{ij} = (\sin \alpha_i \sin \beta_j \sin 2\alpha_i \sin \beta_j \cdots \sin N\alpha_i \sin N\beta_j)^T$ とおくと簡単な計算により

$$P^{-1}Q\nu_{ij} = \left(1 - \omega + \frac{\omega(\cos \alpha_i + \cos \alpha_j)}{2}\right) \nu_{ij} \quad (24)$$

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, 減速ヤコビ法の反復行列のステンシルは $k \in \Omega_1$ の時それぞれ

$$[L_1]_k = \frac{1}{4h^2} \begin{bmatrix} & -4 & \\ -1 & 10 & -1 \\ & -4 & \end{bmatrix}, \quad [P_1^{-1}Q_1]_k = \omega \begin{bmatrix} & \frac{2}{5} & \\ \frac{1}{10} & \frac{1}{\omega} - 1 & \frac{1}{10} \\ & \frac{2}{5} & \end{bmatrix} \quad (25)$$

となる. p と r のステンシルは 1 次元の時と同様である.

定理 4 $A = 1 - \omega + \frac{\omega}{2} \cos \beta_j$, $B = \frac{\omega}{2} \cos \alpha_i$ とする. セミコースニングを行ない減速ヤコビ法をスムージング法とする 2 グリッド前処理後の行列の固有値は以下の 2×2 行列の固有値と等しい.

$$C_{ij} = \begin{pmatrix} c_{00} & c_{01} \\ c_{10} & c_{11} \end{pmatrix} \quad (26)$$

ここで, $i = 0, 1, \dots, \frac{N}{2}-1$, $j = 0, 1, \dots, N-1$,

$$\begin{aligned} c_{00} &= 1 - (A+B)^{2m} + \frac{2 \left(1 - \frac{\cos \alpha_i + \cos \beta_j}{2}\right) (1 + \cos \alpha_i)^2}{1 - \frac{\cos 2\alpha_i + 4 \cos \beta_j}{5}} (A+B)^{2m} \\ c_{10} &= -\frac{2 \left(1 - \frac{\cos \alpha_i + \cos \beta_j}{2}\right) (1 - \cos^2 \alpha_i)}{1 - \frac{\cos 2\alpha_i + 4 \cos \beta_j}{5}} (A+B)^m (A-B)^m \\ c_{01} &= -\frac{2 \left(1 - \frac{\cos \alpha_i + \cos \beta_j}{2}\right) (1 - \cos^2 \alpha_i)}{1 - \frac{\cos 2\alpha_i + 4 \cos \beta_j}{5}} (A+B)^m (A-B)^m \\ c_{11} &= 1 - (A-B)^{2m} + \frac{2 \left(1 - \frac{\cos \alpha_i + \cos \beta_j}{2}\right) (1 - \cos \alpha_i)^2}{1 - \frac{\cos 2\alpha_i + 4 \cos \beta_j}{5}} (A-B)^{2m} \end{aligned}$$

である.

証明 $i = 0, 1, \dots, \frac{N}{2}-1$, $j = 0, 1, \dots, N-1$ について, $r\nu_{ij}^{(2)} = \frac{1+\cos \alpha_i}{2} \nu_{ij}^{(1)}$ である. これより

$$P_1^{-1}rQ_2\nu_{ij}^{(2)} = \frac{4}{5} \left(1 - \omega + \frac{\omega(\cos \alpha_i + \cos \beta_j)}{2}\right) (1 + \cos \alpha_i) \nu_{ij}^{(1)} \quad (27)$$

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

$$\sin k\alpha_{N-i-1} \sin l\beta_j = \begin{cases} \sin k\alpha_i \sin l\beta_j, & k \text{ が奇数の時} \\ -\sin k\alpha_i \sin l\beta_j, & \text{それ以外の時} \end{cases} \quad (28)$$

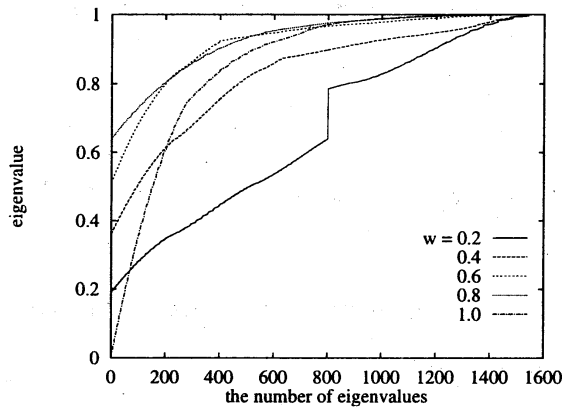


図 1. 2次元ポアソン問題をセミコースニング, 減速ヤコビ法をスムージング法とする 2 グリッド前処理後の固有値分布

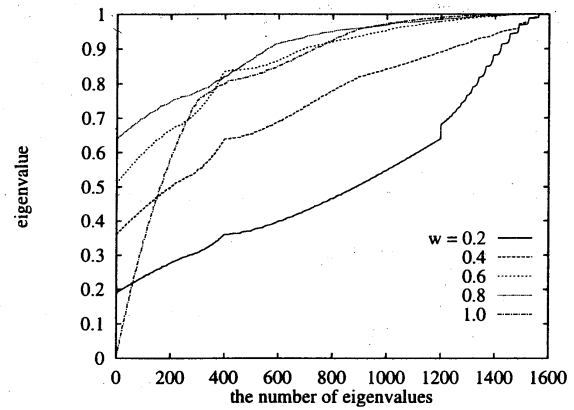


図 2. 2次元ポアソン問題をスタンダードコースニング, 減速ヤコビ法をスムージング法とする 2 グリッド前処理後の固有値分布

となり, $p\nu_{ij}^{(1)}$ は $\nu_{ij}^{(2)}$ と $\nu_{N-i-1,j}^{(2)}$ を用い,

$$\begin{aligned} p\nu_{ij}^{(1)} &= \cos \alpha_i \frac{\nu_{ij}^{(2)} + \nu_{N-i-1,j}^{(2)}}{2} + \frac{\nu_{ij}^{(2)} - \nu_{N-i-1,j}^{(2)}}{2} \\ &= \frac{1 + \cos \alpha_i}{2} \nu_{ij}^{(2)} - \frac{1 - \cos \alpha_i}{2} \nu_{N-i-1,j}^{(2)} \end{aligned} \quad (29)$$

と表すことができる. 従って,

$$\begin{aligned} B\nu_{ij} &= \sum_{k=0}^{2m-1} \left\{ 1 - \omega + \frac{\omega(\cos \alpha_i + \cos \beta_j)}{2} \right\}^k \omega \left(1 - \frac{\cos \alpha_i + \cos \beta_j}{2} \right) \nu_{ij} \\ &\quad + \omega \left(1 - \frac{\cos \alpha_i + \cos \beta_j}{2} \right) \left(1 - \omega + \frac{\omega(\cos \alpha_i + \cos \beta_j)}{2} \right)^m \frac{4}{5} (1 + \cos \alpha_i) \\ &\quad \times \frac{1}{\omega \left(1 - \frac{\cos 2\alpha_i + 4 \cos \beta_j}{5} \right)} \left\{ \frac{1 + \cos \alpha_i}{2} \left(1 - \omega + \frac{\omega(\cos \alpha_i + \cos \beta_j)}{2} \right)^m \nu_{ij} \right. \\ &\quad \left. - \frac{1 - \cos \alpha_i}{2} \left(1 - \omega + \frac{\omega(-\cos \alpha_i + \cos \beta_j)}{2} \right)^m \nu_{N-i-1,j} \right\} \\ &= \left\{ 1 - (A+B)^{2m} + \frac{2}{5} \frac{\left(1 - \frac{\cos \alpha_i + \cos \beta_j}{2} \right) (1 + \cos \alpha_i)^2}{1 - \frac{\cos 2\alpha_i + 4 \cos \beta_j}{5}} (A+B)^{2m} \right\} \nu_{ij} \\ &\quad - \frac{2}{5} \frac{\left(1 - \frac{\cos \alpha_i + \cos \beta_j}{2} \right) (1 - \cos^2 \alpha_i)}{1 - \frac{\cos 2\alpha_i + 4 \cos \beta_j}{5}} (A+B)^m (A-B)^m \nu_{N-i-1,j} \end{aligned}$$

となる. ■

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 $k \in \Omega_1$ とおくとそれぞれ

$$[r]_k = \frac{1}{16} \begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 2 & 4 & 2 \\ 1 & 2 & 1 \end{bmatrix}, \quad [p^T]_k = \begin{bmatrix} \frac{1}{4} & \frac{1}{2} & \frac{1}{4} \\ \frac{1}{2} & 1 & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{4} & \frac{1}{2} & \frac{1}{4} \end{bmatrix} \quad (30)$$

である。これより $i, j = 0, 1, \dots, \frac{N}{2}-1$ について

$$P_1^{-1} \tau Q_2 \nu_{ij}^{(2)} = \left(1 - \omega + \frac{\omega(\cos \alpha_i + \cos \beta_j)}{2}\right) (1 + \cos \alpha_i)(1 + \cos \beta_j) \nu_{ij}^{(1)} \quad (31)$$

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

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

となる。従って

$$B\nu_{ij} = \left\{ 1 - \left(1 - \omega + \frac{\omega(\cos \alpha_i + \cos \beta_j)}{2}\right)^{2m} \right\} \nu_{ij} + \\ \frac{\left(1 - \frac{\cos \alpha_i + \cos \beta_j}{2}\right) \left(1 - \omega + \frac{\omega(\cos \alpha_i + \cos \beta_j)}{2}\right)^m (1 + \cos \alpha_i)(1 + \cos \beta_j)}{1 - \frac{\cos 2\alpha_i + \cos 2\beta_j}{2}} \\ \times \left\{ \frac{1 + \cos \alpha_i}{2} \frac{1 + \cos \beta_j}{2} \left(1 - \omega + \frac{\omega(\cos \alpha_i + \cos \beta_j)}{2}\right)^m \nu_{ij} \right. \\ - \frac{1 - \cos \alpha_i}{2} \frac{1 + \cos \beta_j}{2} \left(1 - \omega + \frac{\omega(-\cos \alpha_i + \cos \beta_j)}{2}\right)^m \nu_{N-i-1,j} \\ - \frac{1 + \cos \alpha_i}{2} \frac{1 - \cos \beta_j}{2} \left(1 - \omega + \frac{\omega(\cos \alpha_i - \cos \beta_j)}{2}\right)^m \nu_{i,N-j-1} \\ \left. + \frac{1 - \cos \alpha_i}{2} \frac{1 - \cos \beta_j}{2} \left(1 - \omega + \frac{\omega(-\cos \alpha_i - \cos \beta_j)}{2}\right)^m \nu_{N-i-1,N-j-1} \right\} \quad (32)$$

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 $k_1\nu_{ij} + k_2\nu_{N-i-1,j} + k_3\nu_{i,N-j-1} + k_4\nu_{N-i-1,N-j-1}$ と置き、固有値を λ とすると

$$B(k_1\nu_{ij} + k_2\nu_{N-i-1,j} + k_3\nu_{i,N-j-1} + k_4\nu_{N-i-1,N-j-1}) = \\ \lambda(k_1\nu_{ij} + k_2\nu_{N-i-1,j} + k_3\nu_{i,N-j-1} + k_4\nu_{N-i-1,N-j-1}) \quad (33)$$

となる。式 (32), (33) 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。

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

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

2 次元モデル問題に対し、以下の定理が成り立つ。

定理 5 RB -GS 法をスムージング法とする 2 グリッド前処理後の行列の固有値は 1 と以下の方程式の解である。

$$\lambda^2 + \left(-2 + A^2 + B^2 - \frac{A^2(1-A^2)(1+A^2-B^2)^2}{4(1-A^2-B^2)} - \frac{B^2(1-B^2)(1-A^2+B^2)^2}{4(1-A^2-B^2)} \right) \lambda \\ + (1-A^2)(1-B^2) \left\{ 1 + \frac{A^2(1+A^2-B^2)^2}{4(1-A^2-B^2)} + \frac{B^2(1-A^2+B^2)^2}{4(1-A^2-B^2)} \right\} = 0 \quad (35)$$

ここで、 $A = \frac{\cos \alpha_i + \cos \beta_i}{2}$, $B = \frac{-\cos \alpha_i + \cos \beta_i}{2}$, $i, j = 0, \dots, \frac{N}{2} - 1$ である。

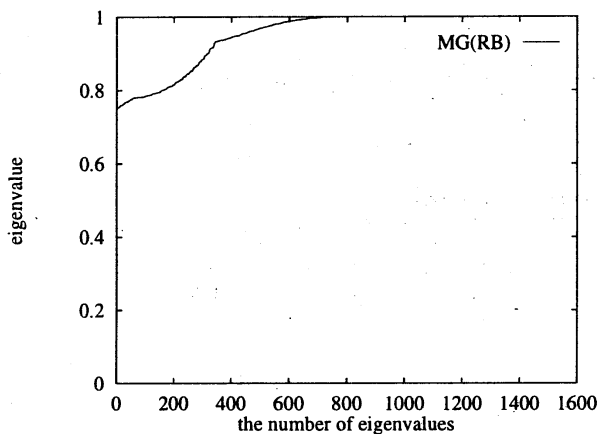


図 3. 2 次元モデル問題における RB-GS 法をスムージング法とする 2 グリッド前処理後の行列の固有値分布.

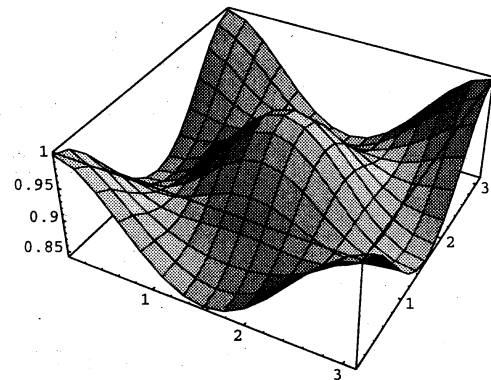


図 4. 軸

証明 $P^{-1}Q$ を RB-GS 法の反復行列とした場合,

$$P^{-1}Q\nu_{ij} = \frac{\cos \alpha_i + \cos \beta_j}{2} \frac{\nu_{ij} + \nu_{N-i-1, N-j-1}}{2} + \left(\frac{\cos \alpha_i + \cos \beta_j}{2} \right)^2 \frac{\nu_{ij} - \nu_{N-i-1, N-j-1}}{2} \quad (36)$$

となる. また,

$$P_1^{-1}rQ_2\nu_{ij} = \frac{A(1+A^2-B^2)}{2} \left(2 + \frac{\cos 2\alpha_i + \cos 2\beta_j}{2} \right) \nu_{ij}^{(1)} - \frac{A(1+A^2-B^2)}{2} \frac{\cos 2\alpha_i + \cos 2\beta_j}{2} \nu_{\frac{N}{2}-i-1, \frac{N}{2}-j-1}^{(1)} \quad (37)$$

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,

$$B\nu_{ij} = \left\{ 1 - \frac{A^2(1+A)}{2} + \frac{A^2(1-A^2)(1+A)(1+A^2-B^2)^2}{8(1-A^2-B^2)} \right\} \nu_{ij} - \frac{AB(1-A^2)(1+B)(1+A^2-B^2)(1-A^2+B^2)}{8(1-A^2-B^2)} \nu_{N-i-1, j} + \frac{AB(1-A^2)(1-B)(1+A^2-B^2)(1-A^2+B^2)}{8(1-A^2-B^2)} \nu_{i, N-j-1} + \left\{ \frac{A^2(1-A)}{2} - \frac{A^2(1-A^2)(1-A)(1+A^2-B^2)^2}{8(1-A^2-B^2)} \right\} \nu_{N-i-1, N-j-1} \quad (38)$$

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, $\text{rank}(C - I) = 2$ 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 の固有値は以下の特性方程式の解である.

$$(\lambda-1)^2 \left\{ \lambda^2 + \left(-2 + A^2 + B^2 - \frac{A^2(1-A^2)(1+A^2-B^2)^2}{4(1-A^2-B^2)} - \frac{B^2(1-B^2)(1-A^2+B^2)^2}{4(1-A^2-B^2)} \right) \lambda + (1-A^2)(1-B^2) \left\{ 1 + \frac{A^2(1+A^2-B^2)^2}{4(1-A^2-B^2)} + \frac{B^2(1-A^2+B^2)^2}{4(1-A^2-B^2)} \right\} \right\} = 0,$$

ここで $i, j = 0, \dots, \frac{N}{2} - 1$ である. ■

従って前処理後の行列の固有値の半分が 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. 図 3 に $N = 40$ の時の前処理後の行列の固有値分布を示す.

補題 4 RB-GS 法をスムージング法とする 2 グリッド前処理後の行列の固有値を λ とおくと

$$\frac{3}{4} \leq \lambda \leq 1 \quad (39)$$

が満たされる.

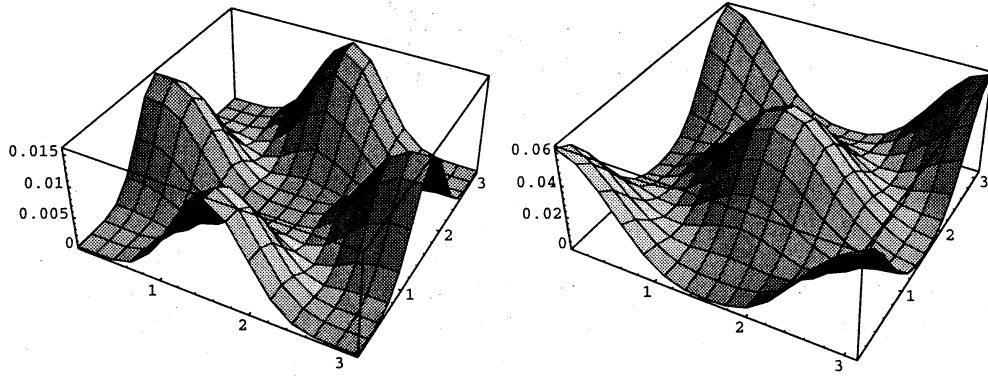


図 5. $f(1)$ と $f(3/4)$

証明 B は対称正定値なので, λ は正の実数である. $f(\lambda)$ を式 (35) の左辺の 2 次式とおく. 図 4 は軸をグラフにしたものであり, この図より軸は 0.85 と 1 の間にあることが分かる. また図 5 より $f(1) \geq 0$, $f(3/4) \geq 0$ である. したがって固有値の範囲は $3/4 \leq \lambda \leq 1$ となる. ■

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.

5 MGCG 法の収束率

解くべき連立一次方程式を $Ax = b$ とする. 共役勾配法の k 反復後の近似値 x^k は, クリロフ空間 $K^k(A; r_0) = \text{Span}(r_0, Ar_0, A^2r_0, \dots, A^{k-1}r_0)$ で $e_k^T A e_k = \|e_k\|_A^2$ (誤差の A -ノルム) が最小になるように決められる. ここで $e_k = \hat{x} - x_k$ であり, $\hat{x} = A^{-1}b$ は真の解である. また, 近似値はクリロフ部分空間に含まれるため, k 反復後の誤差は $e_k = P_k(A)e_0$ と表すことができる. ここで $P_k(A)$ は A の k 次の多項式で $P_k(0) = 1$ を満たしている. 従って,

$$\begin{aligned} \|e_k\|_A &= \min_{P_k \in \pi_k^1} \|P_k(A)e_0\|_A \\ &\leq \min_{P_k \in \pi_k^1} \max_{\lambda \in S(A)} |P_k(\lambda)| \|e_0\|_A \end{aligned}$$

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 $\min_{P_k \in \pi_k^1} \max_{\lambda \in S(A)} |P_k(\lambda)|$ 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. 3 節, 4 節の解析で分かるように MG 前処理後の固有値は連続的に分布しているため, 離散点の近似を区間における近似と置き換えても比較的良好な評価を与えられと考えられる. この時離散点の近似は区間による近似に押えられ

$$\min_{P_k \in \pi_k^1} \max_{\lambda_{\min} \leq \lambda \leq \lambda_{\max}} |P_k(\lambda)| \quad (40)$$

の評価を行えば良い. 以後 $a = \lambda_{\min}$, $b = \lambda_{\max}$ とおく. 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.

$$\min_{P_k \in \pi_k^1} \max_{a \leq \lambda \leq b} |P_k(\lambda)| = \max \frac{|T_k(\frac{b+a-2x}{b-a})|}{T_k(\frac{b+a}{b-a})}, \quad (41)$$

ここでチェビシェフ多項式は以下のように表せる.

$$T_k(x) = \frac{1}{2} \left\{ (x + \sqrt{x^2 - 1})^k + (x - \sqrt{x^2 - 1})^k \right\} \quad (42)$$

$\max |T_k(\frac{b+a-2x}{b-a})| = 1$ より, $c = \frac{\sqrt{\sigma}-1}{\sqrt{\sigma}+1}$, $\sigma = \frac{b}{a}$ とおくと,

$$\frac{\|e_k\|_A}{\|e_0\|_A} \leq \frac{2c^k}{1+c^{2k}}. \quad (43)$$

表 2. MGCG 法の漸近収束ファクタ

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

となるため、平均収束率 (平均収束ファクタ) は $c(\frac{2}{1+c^2})^{\frac{1}{2}}$ であり、漸近収束率 (漸近収束ファクタ) は c 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. これらより 2 次元モデル問題の場合、MGCG 法の収束ファクタは 14 反復後に 10^{-16} 以下になることが分かり、非常に収束が早く問題サイズに依存しないということが分かる.

6 関連研究

MG 法 (2 グリッド法) の収束率の解析は 80 年前後から行なわれて、ディリクレ境界条件を持つ 2 次元正方領域のポアソン方程式では Stüben と Trottenberg [3] が減速ヤコビ法, RB-GS 法について local Fourier mode を用い求めている. この論文でも, RB-GS 法の場合は 2 グリッド反復行列の半分の固有値が 0 であることを用い, 本研究で求めたように 2 次方程式の解として求めている. プレスムージングとポストスムージングで同じ RB-GS 法を用いているため収束率は違うが, どちらかで 1 反復すればスペクトル半径は $1/4$ になることを証明している. また粗い格子間隔として細かい格子の $\sqrt{2}$ 倍の 45° 回転したグリッドを用いる MGR 法の反復行列は Ries ら [2] により研究されている. MGR 法はプレスムージング法として RB-GS 法を行ない, プロロンゲーションで行列依存のものを用いたものである (ポストスムージングはない). 問題は同じく 2 次元のディリクレ境界問題で反復行列のスペクトル半径は $2/27$ となることを示している.

MG 法の反復行列のスペクトル半径を求めるためフーリエ解析は非常に有用であるが, より多くのグリッド, 3 次元以上問題では非常に複雑になってしまうため, スムージングファクタの解析が行なわれている. スムージングファクタについては Wesseling [7] に良くまとまっている. また Yavneh [8] は RB-GS 法のスムージングファクタは領域の次元によらないことを示している.

7 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, RB-GS 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 RB-GS 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, MG 前処理への拡張等を行なっていきたい.

参考文献

- [1] O. AXELSSON, *Iterative Solution Methods*, Cambridge University Press, 1994.
- [2] M. RIES, U. TROTTEBERG, AND G. WINTER, *A note on mgr methods*, Linear Algebra Appl., 49 (1983), pp. 1-26.
- [3] K. STÜBEN AND U. TROTTEBERG, *Multigrid methods: Fundamental algorithms, model problem analysis and applications*, in Multigrid Methods, Proceedings of the Conference Held at Köln-Porz, W. Hackbusch and U. Trottenberg, eds., vol. 960 of Lecture Notes in Mathematics, Springer-Verlag, 1982, pp. 1-176.
- [4] O. TATEBE, *The multigrid preconditioned conjugate gradient method*, in Proceedings of Sixth Copper Mountain Conference on Multigrid Methods, NASA Conference Publication 3224, April 1993, pp. 621-634.
- [5] ———, *MGCG Method: A Robust and Highly Parallel Iterative Method*, PhD thesis, Univ. of Tokyo, Japan, 1997.
- [6] O. TATEBE AND Y. OYANAGI, *Efficient implementation of the multigrid preconditioned conjugate gradient method on distributed memory machines*, in Proceedings of Supercomputing '94, IEEE Computer Society, November 1994, pp. 194-203.
- [7] P. WESSELING, *An Introduction to Multigrid Methods*, John Wiley and Sons Ltd., 1992.
- [8] I. YAVNEH, *Multigrid smoothing factors for red-black gauss-seidel relaxation applied to a class of elliptic operators*, SIAM J. Numer. Anal., 32 (1995), pp. 1126-1138.