

Bi-CG STAB 法の収束過程の可視化

*藤野 清次 *張 紹良 **森 正武

*計算流体力学研究所 **東京大学 工学部物理工学科

1 概 要

Van der Vorst によって提案された Bi-CG STAB 法^[10]はいろいろな応用分野、例えば流体解析^[3]や半導体のデバイス解析^[1,7]の問題の求解などに使用され始め、高収束性と収束の安定性は従来の他の反復解法を凌ぐものがある。本研究では、従来の解法との違いを明かにするために、Bi-CG STAB 法の収束までの反復過程を可視化し、得られる近似解の履歴や残差の振舞いなどを自乗共役勾配法 (CG Squared) 法^[8]などのそれらと比較する。

2 はじめに

VTR などを使ったアニメーション (可視化) は、流体解析などの応用分野では盛んに利用され、それによって我々は非定常 3 次元流れの複雑なメカニズムに対する理解を深めることができる。一方、数値解析、特に反復解法の研究において可視化または図形化できるものは非常に限られている。例えば、残差ノルムの収束過程の図などが挙げられる。これはノルムという 1 つの視点あるいは尺度で収束性を評価したものであるが、物理空間において近似解はどのように求まっていくのだろうか？

あるいは波数平面において残差多項式はどのように変化しているのだろうか？ という素朴な問いに対して何も答えてくれない。また、反復解法は何故そのような収束過程をたどり収束するのか？

あるいは何故発散するのか？ というより本質的な疑問に対して答えるには残差ノルムのプロットするだけでは不十分である。

そこで本研究では反復解法の収束過程を可視化することによって、これらの疑問に対して答えるとともに、この可視化によって明らかになってきた現象を報告しその原因を調べる。可視化は大きく 2 つに分かれる。1 つは第 2 章で述べる物理空間における近似解 $u_k(k$: 反復回数) の変化と残差ベクトル $|r_k|$ の変化の様子を可視化したもの、そしてあと 1 つは第 4 章で述べる波数平面における残差多項式 $R_k(\lambda), Q_k(\lambda)$ の変化の様子を可視化したものである。発表当日は VTR を使ったアニメーションを上映したがここではそれらの中から抜粋したフィルムのコピーを掲載する。

3 近似解 u_k と 残 差 ベ ク ト ル $|r_k|$ の 収 束 過 程 の 可 視 化

ここでは CGS 法と Bi-CG STAB 法の収束特性を調べるために、表 1 に示すような 2 つの問題を取り上げる。表中の $(\cdot)_x$ は x で偏微分することを意味する。2 つの問題ともに境界条件は全周 Dirichlet 条件を課した。また離散化は 2 次精度の中心差分を使っておこなった。各解法の前処理としては、不完全 LU 分解 (Incomplete LU, 以下 ILU と略す) と修正不完全 LU 分解 (Modified ILU, 以下 MILU と略す) を施した。また全ての計算は日立 スーパーコンピュータ S-820/80 上で倍精度でおこなった。問題 1 の基礎方程式は非対称、問題 2 のそれは対称である。物性パラメータの値と分布を図 1, 2 に示す。反復計算の収束判定条件は L_2 ノルムで 10^{-8} 、また反復計算の初期値は 0 とした。

表1 基礎方程式と解析条件

	基礎方程式	パラメータ	解析領域	格子点数
問題 1	$-((Au_x)_x + (Au_y)_y) + Bu_x = F$	$B = 2e^{2(x^2+y^2)}$ A, F は図 1 参照	単位正方形	128×128
問題 2	$(Du_x)_x + (Du_y)_y = -1$	D は図 2 参照	単位正方形	202×202

表2 CPU時間(秒単位)と反復回数

前処理	解法	問題 1		問題 2	
		CPU時間	反復回数	CPU時間	反復回数
ILU	C G S	発散	2500	発散	2500
	Bi-CG STAB	.444	136	.899	134
MILU	C G S	.536	170	.583	85
	Bi-CG STAB	.346	103	.465	68

表2にCPU時間(秒単位)と反復回数を示す。なお最大反復回数は2500回とした。これらの結果からBi-CG STAB法の方が収束性が良くかつロバストであることがわかる。図3,4にCGS法とBi-CG STAB法の残差ノルムの履歴を示す。CGS法では残差ノルムが激しく振動しているのに対して、Bi-CG STAB法ではほとんど振動は見られず非常に滑らかに収束しているのがわかる。

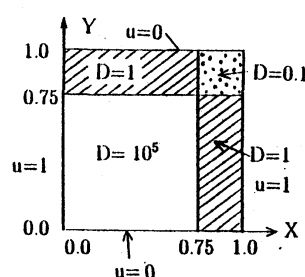
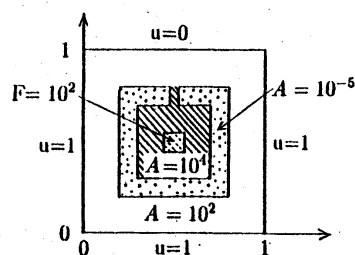
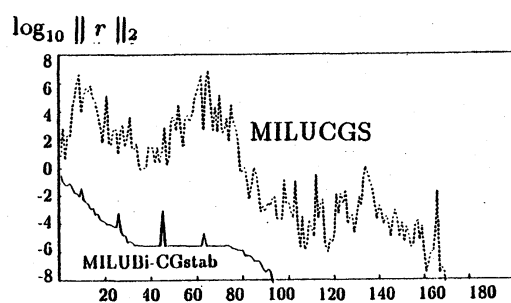
図1 問題1の物性パラメータ A と F の分布図2 問題2の物性パラメータ D の分布

図3 問題1の残差ノルムの履歴

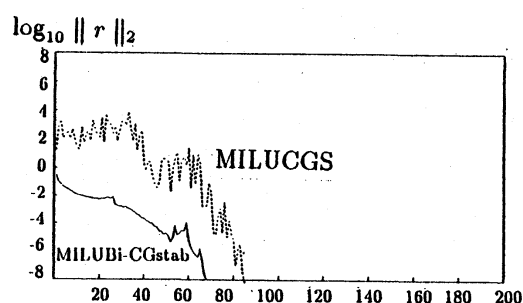


図4 問題2の残差ノルムの履歴

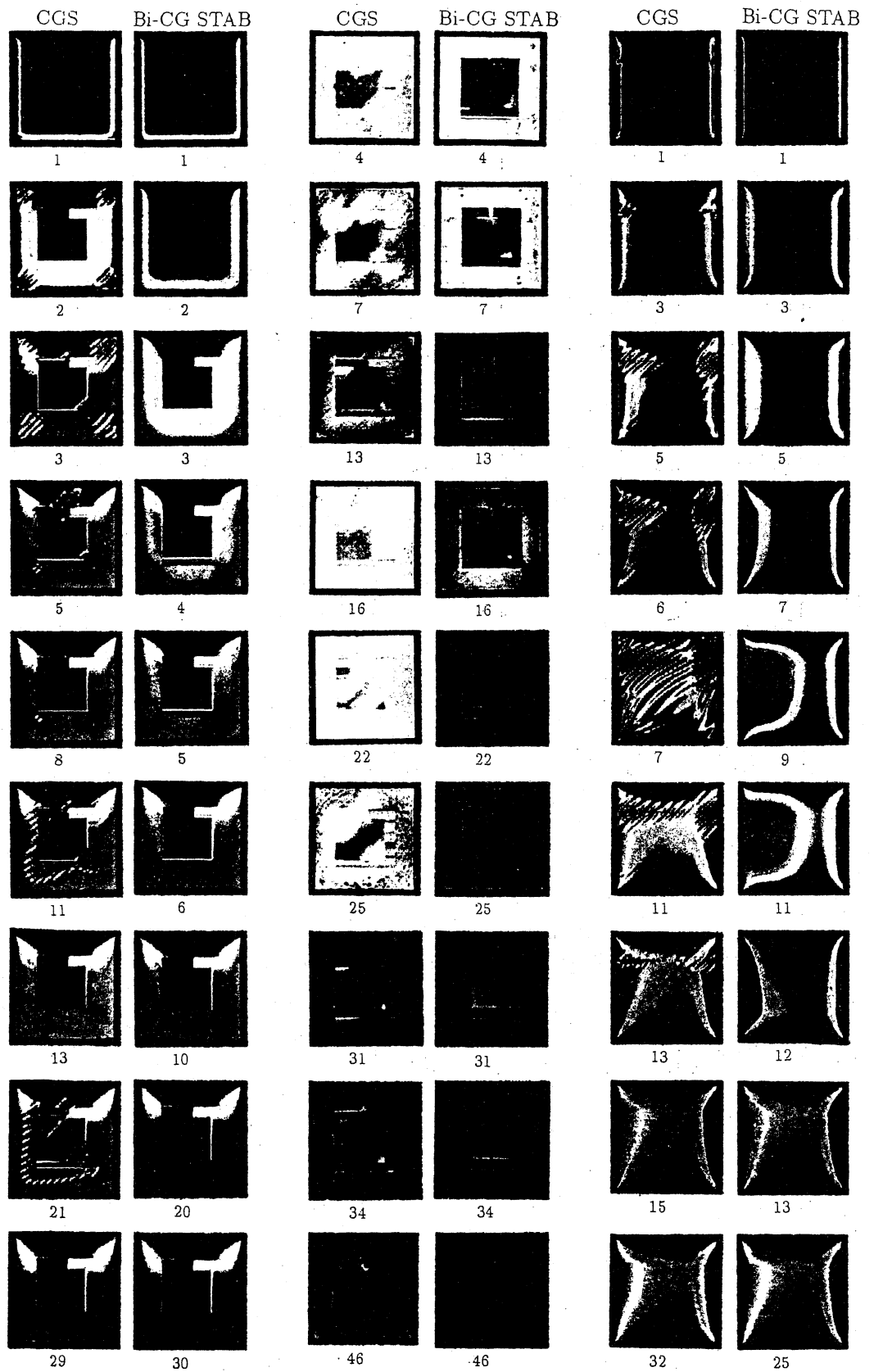


図5 問題 1 の近似解の変化 図6 問題 1 の残差ベクトル $|r|$ の分布 図7 問題 2 の近似解の変化

図5~7にCGS法とBi-CG STAB法における収束過程の可視化結果を示す。図5,7は問題1と問題2の解析領域 $[0, 1] \times [0, 1]$ におけるそれぞれ近似解が変化の様子を表したものである。図6は問題1と問題2の反復計算途中の残差ベクトル $|r_k|$ の分布をそれぞれ表したものである。各図の下に示した数字は反復回数を表す。図5,7では値が $1.0 \rightarrow 0.66 \rightarrow 0.33 \rightarrow 0$ と変わったときに、色合いが赤 $\rightarrow$ 黄 $\rightarrow$ 緑 $\rightarrow$ 青に変化する。また、図6では値が $10^0 \rightarrow 10^{-3} \rightarrow 10^{-6} \rightarrow 10^{-10}$ に変わったときに、赤 $\rightarrow$ 黄 $\rightarrow$ 緑 $\rightarrow$ 青に変化する。

これらの図からCGS法では物理定数が変わる部分(特にパラメータ $A = 10^{-5}$ の周辺)で値が大きく変動し、場全体でも細かな亀裂が多数見られるのに対して、Bi-CG STAB法では物理定数が変化する境界では比較的大きな値が残るものの、場全体としては大変なめらかな(幾何学的な模様は観察される)様相をしていることがわかる。これらの可視化結果から、問題1,2のような物性パラメータが境界ごとに変わるような、より実際的な問題に対して、Bi-CG STAB法はCGS法より効率的で安定な解法であることがわかった。

この事実は、Bi-CG STAB法を有効な解法の1つとして利用する人にとって重要な知見である。さらに、もっと問題を複雑にしてより実際に起こるようなレベルの問題に対して各解法の収束性を調べることも大切である。しかしながら、何故そのような違いが現れるのか? どこにその原因があるのか? といった本質的なことをもっと深く知るためにはこのような物理平面上の可視化では自ずと限界がある。そこで、もっと理論的な考察をするために、次章で述べるような波数平面を考え、その平面上で残差多項式の収束過程の様子を可視化することにする。

4 残差多項式の収束過程の可視化

4.1 残差多項式と固有値

ここでは、Helmholtz方程式^[6]を前処理をしないCGS法とBi-CG STAB法で解き、反復過程におけるいろいろな残差多項式の収束までの様子を可視化して調べる。次の大きさ $n^2 \times n^2$ の連立1次方程式、

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

ただし、

$$A = \begin{pmatrix} D_n & -I_n & & & \\ -I_n & D_n & -I_n & & \\ & \cdots & \cdots & \cdots & \\ & & \cdots & \cdots & \cdots \\ & & & \cdots & \cdots & \cdots \\ & & & & -I_n & D_n & -I_n \\ & & & & & -I_n & D_n \end{pmatrix}, \quad (2)$$

$$D_n = \begin{pmatrix} 4 - \sigma h^2 & -1 & & & \\ & -1 & 4 - \sigma h^2 & & \\ & & -1 & \cdots & \\ & & & \cdots & \\ & & & & -1 \\ & & & & 4 - \sigma h^2 & -1 \\ & & & & -1 & 4 - \sigma h^2 \end{pmatrix}$$

$$i = 1, 2, \dots, n, \quad \sigma = \text{定数} \quad (3)$$

を考える。ただし、 I_n は単位行列とする。このような行列は、5点差分近似によって単位正方形領域における Helmholtz 方程式を離散化したときに現れる。境界条件は全周 Dirichlet 条件を課した。また n は領域内部の1辺の格子点数、すなわち

$$n = \frac{1}{h} - 1 \quad (4)$$

であり、格子幅は $h = 1/(n+1)$ である。ここではすべて $n=25$ とした。行列 A は対称行列であるが必ずしも正定値ではない。右辺項 b は厳密解が3になるように決定した。行列 A の固有値は、

$$\lambda_{i,j} = 4 - \sigma h^2 - \frac{2(4 - \sigma h^2)}{|4 - \sigma h^2|} (\cos(i\pi h) + \cos(j\pi h)),$$

$$i, j = 1, 2, \dots, n, \quad (5)$$

で与えられる [9]。また $\cos \theta = 1 - 2 \sin^2 \frac{\theta}{2}$ の関係を使うと次のように表せる。

$$\lambda_{i,j} = 4 - \sigma h^2 - \frac{2(4 - \sigma h^2)}{|4 - \sigma h^2|} \left\{ 2 - 4 \left(\sin^2 \left(\frac{i\pi h}{2} \right) + \sin^2 \left(\frac{j\pi h}{2} \right) \right) \right\},$$

$$i, j = 1, 2, \dots, n \quad (6)$$

$\frac{i\pi h}{2} = \frac{i\pi}{2(n+1)} < \frac{\pi}{2} (i = 1, 2, \dots, n)$ であるので、固有値 $\lambda_{i,j}$ の値は、 i, j 方向それぞれに単調に増加することがわかる。(図 9(a) 参照) また各固有値に対応する固有ベクトル $\vec{u}_{i,j}$ は次のように示される。

$$\vec{u}_{i,j} = \{ 4h^2 \sin(i\pi k h) \sin(j\pi l h) \}_{k,l=1}^n,$$

$$i, j = 1, 2, \dots, n \quad (7)$$

Bi-CG 法^[2] の第 k 番目の残差多項式を $R_k(\lambda)$ で表す。このとき、 $R_k(\lambda)$ は次の3項漸化式を満たす。ここで α_k, β_k は Bi-CG 法の中に現れるパラメータである。

$$R_0(\lambda) = 1, \quad (8)$$

$$R_1(\lambda) = 1 - \alpha_0 \lambda, \quad (9)$$

$$R_k(\lambda) = \left(1 - \alpha_{k-1} \lambda + \frac{\alpha_{k-1} \beta_{k-2}}{\alpha_{k-2}} \right) R_{k-1}(\lambda) - \frac{\alpha_{k-1} \beta_{k-2}}{\alpha_{k-2}} R_{k-2}(\lambda)$$

$$k = 2, 3, \dots \quad (10)$$

いま CGS 法の残差ベクトルを r_k^{CGS} , Bi-CG STAB 法の残差ベクトルを r_k^{STAB} とすると次の式が成り立つ。

$$r_k^{\text{CGS}} = R_k(A)R_k(A)r_0, \quad (11)$$

$$r_k^{\text{STAB}} = Q_k(A)R_k(A)r_0 \quad (12)$$

ここで $r_0 (= b - Ax_0)$ は初期残差ベクトルを表す。一方、Bi-CG STAB 法で新たに導入された残差多項式 $Q_k(\lambda)$ はパラメータ $\omega_k (k = 1, 2, \dots)$ を使って次のように表せる。

$$Q_k(A) = (1 - \omega_k \lambda)(1 - \omega_{k-1} \lambda) \cdots (1 - \omega_1 \lambda) = (1 - \omega_k \lambda)Q_{k-1}(A) \quad (13)$$

初期残差ベクトル r_0 を行列 A の固有ベクトル $\vec{u}_{i,j}$ を使って展開すると、

$$r_0 = \sum_{i,j=1}^n c_{i,j} \vec{u}_{i,j} \quad (14)$$

と表される。ここで、固有ベクトルの係数 $c_{i,j}$ は $c_{i,j} = (\vec{u}_{i,j}, r_0) = (\vec{u}_{i,j}, b - Ax_0)$ から計算される。これらを (11), (12) 式に代入すると、

$$r_k^{\text{CGS}} = \sum_{i,j=1}^n c_{i,j} R_k(\lambda_{i,j}) R_k(\lambda_{i,j}) \vec{u}_{i,j}, \quad (15)$$

$$r_k^{\text{STAB}} = \sum_{i,j=1}^n c_{i,j} Q_k(\lambda_{i,j}) R_k(\lambda_{i,j}) \vec{u}_{i,j} \quad (16)$$

が得られる。したがって、固有ベクトル $\vec{u}_{i,j}$ の直交性から r_k^{CGS} と r_k^{STAB} のノルムは次のように表せる。

$$\|r_k^{\text{CGS}}\|^2 = \sum_{i,j=1}^n c_{i,j}^2 \{R_k(\lambda_{i,j})\}^4, \quad (17)$$

$$\|r_k^{\text{STAB}}\|^2 = \sum_{i,j=1}^n c_{i,j}^2 \{Q_k(\lambda_{i,j})\}^2 \{R_k(\lambda_{i,j})\}^2. \quad (18)$$

ここに現れたパラメータ α_k と β_k は本来同一のものであるが、反復計算中に発生する丸め誤差等のために CGS 法と Bi-CG STAB 法では違った値になる。したがって、最初に各解法で Helmholtz 方程式を 1 度解き、そのときのパラメータ α_k, β_k を記憶させ、次に (8), (9), (10) 式中の $R_k(\lambda)$ の値は、各解法に対応する $R_k^{\text{CGS}}(\lambda)$ と $R_k^{\text{STAB}}(\lambda)$ によって求めた。各固有値における残差多項式の値は反復計算が進むにつれて減少し、理論的には行列の次元数に相当する回数の反復計算で 0 になるべきものである。

4.2 波数平面

固有値 $\lambda_{i,j}$ に対応した残差多項式は、反復を繰り返すごとに次数が 1 つずつ増加する。したがって、反復を 100 回繰り返すとき、合計 25² 個の固有値に対する 100 次の残差多項式を 1 次元の固有値 λ の軸上に書き表すと大変見難いものになると予想される。

そこで固有値 $\lambda = \lambda_{i,j} (i, j = 1, 2, \dots, n)$ に対応する残差多項式の値をより見やすくするために、図8に示すような波数平面を新たに導入する。すなわち、平面上に正方形を考えてそれを $n \times n$ の格子に分割し、左下隅の格子点から始めてすべての格子点にいわゆる自然な順序で番号を付けた平面のことをここでは波数平面と呼ぶ。そして第 i, j 番目の小さな正方形は(6)式の i, j 番目の固有値にあたる。図9に Helmholtz 方程式中のパラメータ $\sigma = 300$ にしたときの行列 A の固有値の分布を示す。このような順序で固有値を並べると、小さな固有値は図8の左下隅に、大きな固有値は同じく図8の右上隅に集まる。(6)式参照) 固有値は、(6)式より $-0.410 \leq \lambda_{i,j} \leq 7.527 (i, j = 1, 2, \dots, n)$ の関係を満たし、行列 A の最大固有値と最小固有値(0.0144)との比率、すなわち条件数は約 523.1 になる。

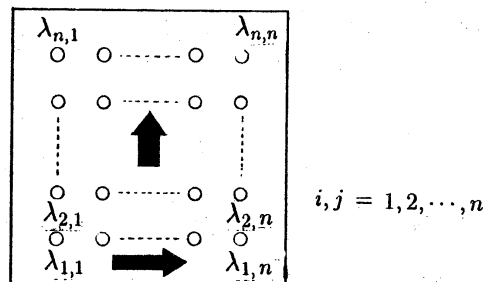


図8 波数平面と固有値分布

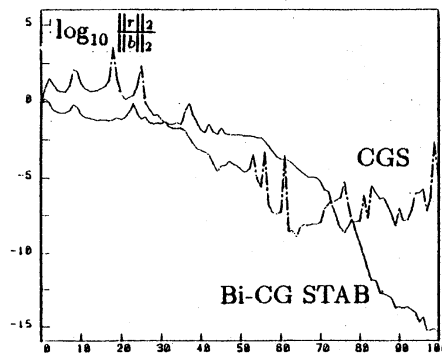


図10(a) 算法中の残差ベクトルの履歴

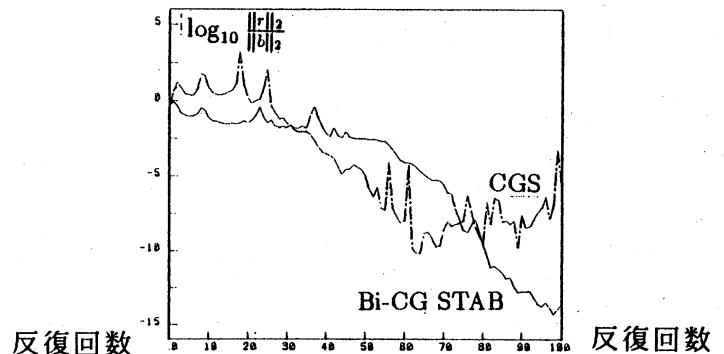


図10(b) (17),(18)式による残差ベクトルの履歴

CGS 法と Bi-CG STAB 法の算法中の残差ノルムの履歴を図10(a)に示す。反復計算の初期値は 0 とした。一方、(17) と (18) 式によって求めた残差ノルムの履歴を図10(b)に示す。これらは、予め計算しておいたパラメータ α_k, β_k の値をもとに、3項漸化式(8)~(10)で求めたものである。図10からわかるように、Bi-CG STAB 法は残差ノルムが 10^{-16} まで減少し収束した。一方、CGS 法は一旦残差ノルムが 10^{-10} ぐらいまで下がるがその後は計算を続行させても結局収束しなかった。また図10(a)と(b)は非常によく一致している。したがって、各算法中の残差ベクトル r_k の代わりに、(15),(16)式で求めた残差多項式 $R_k^{\text{CGS}}(\lambda)$ と $R_k^{\text{STAB}}(\lambda)$ を使って収束性の議論しても、その違いは問題にならない程小さいことがわかる。そこで可視化では(15),(16)式で計算をおこなった。

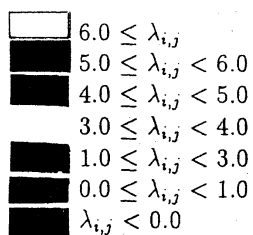
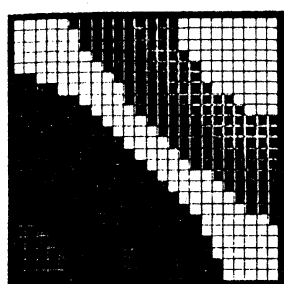


図 9

Helmholtz 方程式 ($\sigma = 300$ のとき)
の固有値の波数平面上の分布

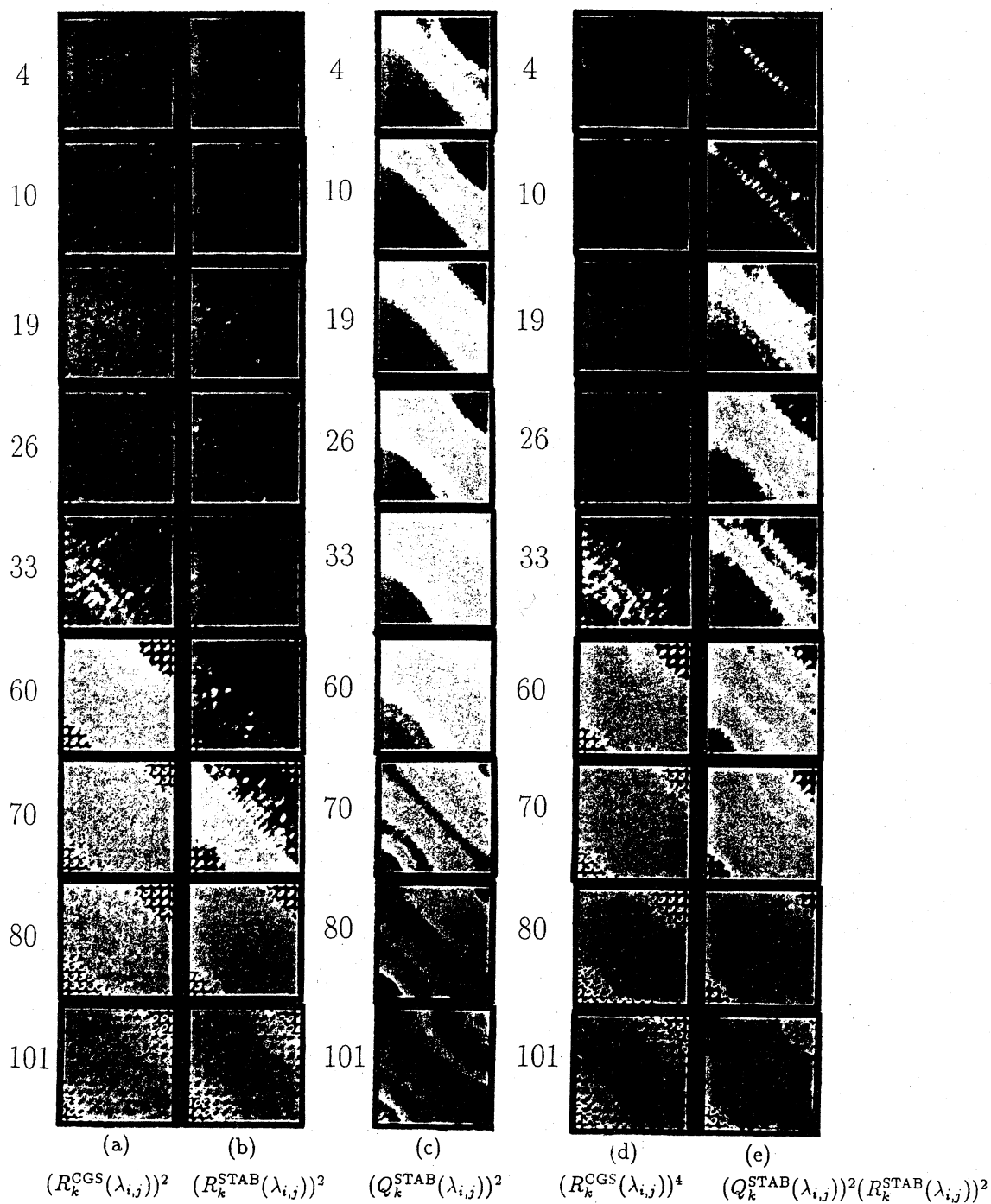


図 11 各種の残差多項式の履歴

4.3 可視化結果

残差多項式に関する可視化は、波数平面上の各固有値 $\lambda_{i,j}$ に対応した、

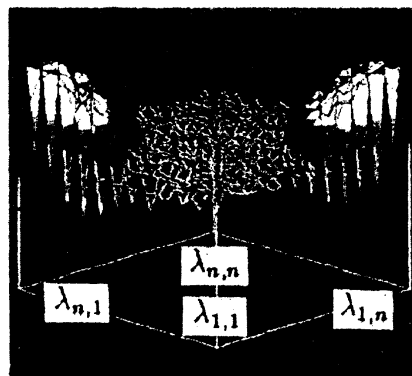
- (a) CGS 法の $(R_k^{\text{CGS}}(\lambda_{i,j}))^2$,
- (b) Bi-CG STAB 法の $(R_k^{\text{STAB}}(\lambda_{i,j}))^2$,
- (c) Bi-CG STAB 法の $(Q_k^{\text{STAB}}(\lambda_{i,j}))^2$,
- (d) CGS 法の $(R_k^{\text{CGS}}(\lambda_{i,j}))^4$,
- (e) Bi-CG STAB 法の $(Q_k^{\text{STAB}}(\lambda_{i,j}))^2 (R_k^{\text{STAB}}(\lambda_{i,j}))^2$

なる5つの値の収束までの履歴を追跡する。 $(R_k^{\text{CGS}}(\lambda))^2$ と $(R_k^{\text{STAB}}(\lambda))^2$ の可視化結果を図11(a)(b)に、 $(Q_k^{\text{STAB}}(\lambda))^2$ の可視化結果を図11(c)に、そして $(R_k^{\text{CGS}}(\lambda))^4$ と $(Q_k^{\text{STAB}}(\lambda))^2 (R_k^{\text{STAB}}(\lambda))^2$ の可視化結果を図11(d),(e)にそれぞれ示す。各図の正方形の左側の数字は反復回数を表す。

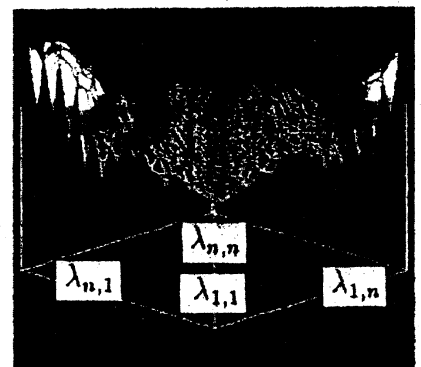
図11(a),(b),(c)の色合いは、たとえば残差多項式 $(R_k^{\text{CGS}}(\lambda))^2$ の値が $10^{-5} \rightarrow 10^{-10} \rightarrow 10^{-15}$ と変わるにつれて、赤 $\rightarrow$ 緑 $\rightarrow$ 青に変化する。同様に、図11(d),(e)の色合いは、たとえば残差多項式 $(R_k^{\text{CGS}}(\lambda))^4$ の値が $10^{-10} \rightarrow 10^{-20} \rightarrow 10^{-30}$ と変わるにつれて、赤 $\rightarrow$ 緑 $\rightarrow$ 青に変化する。また、透視図法による3次元立体図ソフトウェア^[4]を使用して、図12の左側にCGS法の $(R_k^{\text{CGS}}(\lambda))^4$ 、右側にBi-CG STAB法の $(Q_k^{\text{STAB}}(\lambda))^2 (R_k^{\text{STAB}}(\lambda))^2$ の立体図(反復回数 $k=101$ のとき)を示す。

これらの図から収束過程の残差多項式の履歴の細かな構造を知ることができる。たとえば、小さい固有値に対応する残差多項式の値、すなわち図の左下隅付近の値はCGS法、Bi-CG STAB法ともに反復計算の最終段階になっても比較的大きな値のままで残っている。一方、大きな固有値に対応する残差多項式の値、すなわち図の右上隅付近の値はCGS法では大きな値を示しているのに対してBi-CG STAB法では小さな値になっている。また、収束過程の途中では、Bi-CG STAB法の残差多項式 $R_k(\lambda)$ の値がCGS法のそれに比べて値が大きい(図では赤色の占める割合が大きい)時期(たとえば図11の $k=33, 60, 70$ のとき)があることに気付く。

これらの違いが起こる原因を次の章で理論的に考察してみよう。



$$(R_k^{\text{CGS}}(\lambda))^4$$



$$(Q_k^{\text{STAB}}(\lambda))^2 (R_k^{\text{STAB}}(\lambda))^2$$

図12 反復回数 $k=101$ のときの残差多項式 $R_k(\lambda)$ の分布の立体図

5 考察

5.1 残差多項式の幾何学的解釈

ここでは、残差多項式 $R_k(\lambda)$, $Q_k(\lambda)$ の意味を、文献 [5] に沿って幾何学的な立場から考える。残差多項式 $R_k(\lambda)$ は (10) 式に示す 3 項漸化式で表されるが、これの固有値 λ に着目し各項の順番を入れ換えると、(λ に関する 1 次式) + (前のステップまでの残差多項式 $R_{k-1}(\lambda)$ と $R_{k-2}(\lambda)$ の和) とみなせる。

$$R_k(\lambda) = (1 - \alpha_{k-1}\lambda) R_{k-1}(\lambda) - \frac{\alpha_{k-1}\beta_{k-2}}{\alpha_{k-2}} (R_{k-1}(\lambda) + R_{k-2}(\lambda)) \quad (19)$$

一方、Bi-CG STAB 法の残差多項式 $Q_k(\lambda)$ は、もともと固有値 λ の 1 次式と前のステップの $Q_{k-1}(\lambda)$ の単純な積の形をしているので、そのまま以下の形で考える。

$$Q_k(\lambda) = (1 - \omega_k\lambda) Q_{k-1}(\lambda) \quad (20)$$

Bi-CG STAB 法の残差多項式 $Q_k(\lambda)$ は、2 点 $(0, 1)$ と $(\frac{1}{\omega_k}, 0)$ を通る直線 $(1 - \omega_k\lambda)$ と直前の第 $(k-1)$ ステップの残差多項式 $Q_{k-1}(\lambda)$ の単純積と考えられる。

一方、第 k ステップの残差多項式 $R_k(\lambda)$ は、2 点 $(0, 1)$ と $(\frac{1}{\alpha_{k-1}}, 0)$ を通る直線 $(1 - \alpha_{k-1}\lambda)$ と直前の第 $(k-1)$ ステップにおける残差多項式 $R_{k-1}(\lambda)$ の積に、 R_{k-1} , R_{k-2} の和の定数倍シフトしたものと解釈できる。

このとき、 $\frac{1}{\alpha_{k-1}}$ や $\frac{1}{\omega_k}$ 近傍の固有値に対して、固有値 λ の 1 次式を $R_{k-1}(\lambda)$ や $Q_{k-1}(\lambda)$ に掛けると、前のステップ残差多項式 $R_{k-1}(\lambda)$ や $Q_{k-1}(\lambda)$ の値より小さくする方向に作用する ((19) 式の第 2 番目の項の影響も加わる)。一方、原点近傍の固有値や、 $\frac{2}{\omega_k}$ または $\frac{2}{\alpha_{k-1}}$ より大きな固有値に対して、固有値 λ の 1 次式を $R_{k-1}(\lambda)$, $Q_{k-1}(\lambda)$ に掛けると、直前のステップの残差多項式 $R_{k-1}(\lambda)$, $Q_{k-1}(\lambda)$ の値より逆に大きくする方向に作用する。

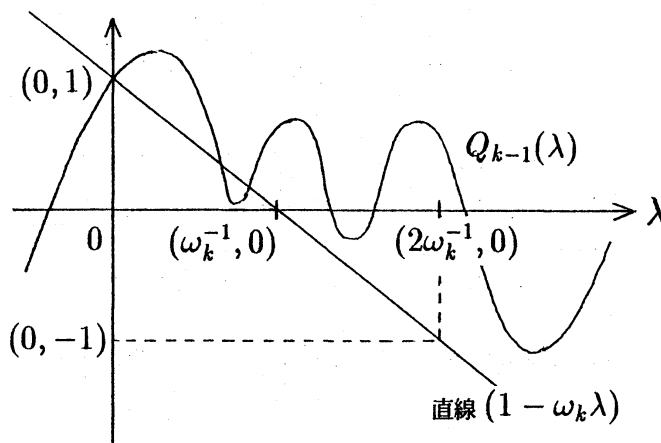


図 13 残差多項式 $Q_k(\lambda)$ の幾何学的解釈

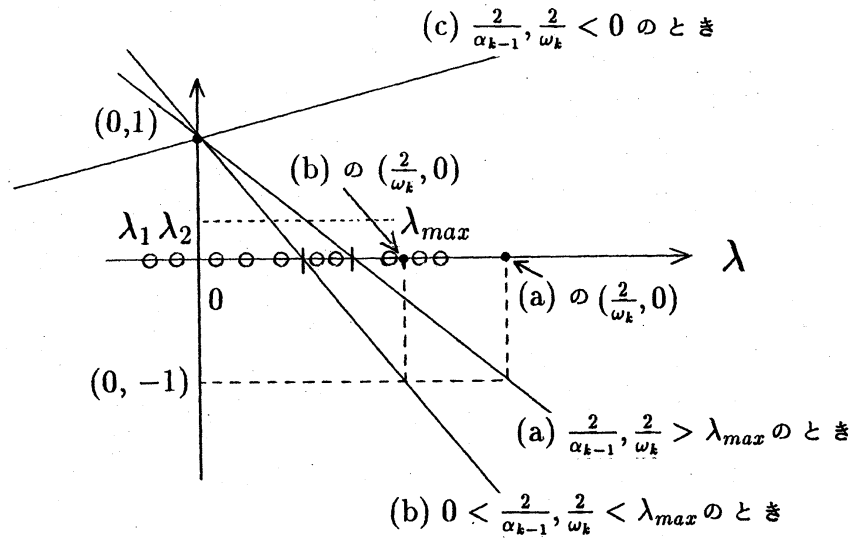


図 14 最大固有値 λ_{max} と $\frac{2}{\alpha_{k-1}}, \frac{2}{\omega_k}$ の関係

図 14(a),(b),(c) に示すように、最大固有値 $\lambda_{max}(=7.527)$ と $\frac{2}{\alpha_{k-1}}, \frac{2}{\omega_k}$ の関係は、固有値 λ に関する 1 次式の働きによって、大きく 3 つに分けられる。

- (a) $\frac{2}{\alpha_{k-1}}, \frac{2}{\omega_k} > \lambda_{max}$ のとき、正の大きな固有値に対する残差多項式の値は、前のステップの残差多項式の値より小さくなる。
- (b) $0 < \frac{2}{\alpha_{k-1}}, \frac{2}{\omega_k} < \lambda_{max}$ のとき、正の大きな固有値に対する残差多項式の値は、前のステップの残差多項式の値より大きくなる。
- (c) $\frac{2}{\alpha_{k-1}}, \frac{2}{\omega_k} < 0$ のとき、負の固有値に対する残差多項式の値を小さく、正の固有値に対する残差多項式の値は大きくする方向に作用する。

5.2 収束過程の分類

この問題に対する CGS 法と Bi-CG STAB 法の収束過程を比較したとき、図 15 に示すように大きく 3 つに分けられる。

- i. 第 1 収束期 ($k=1 \sim k=32$) では、Bi-CG STAB 法の収束性が CGS 法よりも少しよい。
- ii. 第 2 収束期 ($k=33 \sim k=73$) では、逆に CGS 法の方が収束性がよい。
- iii. 第 3 収束期 ($k=74 \sim k=100$) では、Bi-CG STAB 法は収束、しかし CGS 法は収束しなかった。

次に、図 14(a),(b),(c) に示した最大固有値 λ_{max} と、 $\frac{2}{\alpha_{k-1}}, \frac{2}{\omega_k}$ の関係を通して、収束過程を調べてみよう。

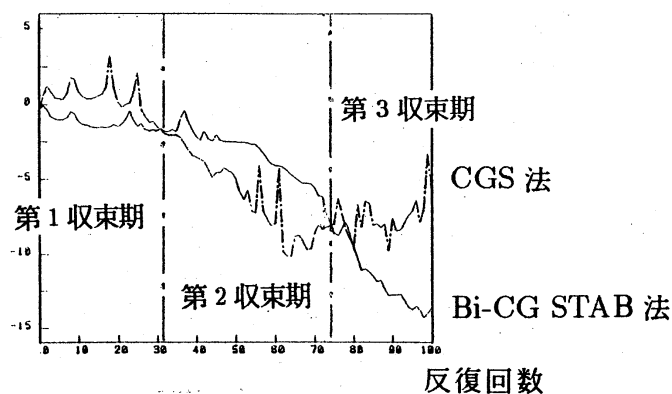


図15 収束過程の分類(図10(b)より)

5.3 収束性とパラメータ α_{k-1} と ω_k の関係

図16(a)~(d)は、収束過程のパラメータの値である。(a),(c)の図の中の実線はCGS法の結果を、点線はBi-CG STAB法の結果を表す。

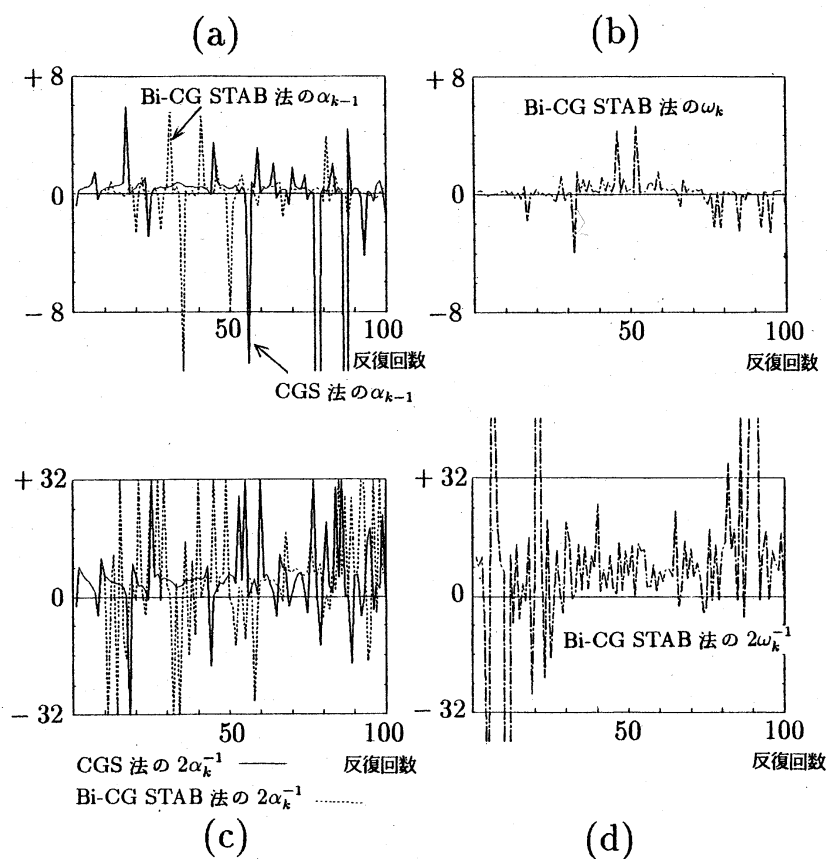


図16 収束過程のパラメータ α_{k-1}, ω_k の変化

表 3-1 は、各収束期におけるパラメータ α_{k-1}, ω_k の値を調べたものである。表 3-2 は、最大固有値 $\lambda_{max} = 7.527$ と $\frac{2}{\alpha_{k-1}}, \frac{2}{\omega_k}$ を比較したものである。表中の数字は各関係を満たす各パラメータの個数である。

表 3-2 の中で特徴的なことは、第 3 収束期において、Bi-CG STAB 法で $\frac{2}{\omega_k} > \lambda_{max}$ を満たす ω_k の個数 (表中*印) がそれ以外よりも多いことである。このことは図 14(a) のように、固有値 λ の 1 次式が、大きい固有値に対する残差多項式の値を小さくする方向に作用し、収束性により影響をもたらすと期待できる。これは第 4.3 章の可視化でわかった事実と合致する。

一方、CGS 法において関係 $\frac{2}{\alpha_{k-1}} > \lambda_{max}$ を満たす α_{k-1} の個数 (表中◆印) は、 $\frac{2}{\alpha_{k-1}} < \lambda_{max}$ を満たす α_{k-1} の個数の約半数しかない。さらに、表 3-1 からわかるように、第 3 収束期における $\alpha_{k-1} < 0$ を満たす α_{k-1} の個数 (表中#印) も第 2 収束期の個数に比べると相対的に多い。したがって、図 14 の (a),(c) より、大きな固有値に対応する残差多項式の値がなかなか小さくならないのではないかと懸念される。これは、可視化結果によっても裏付けされる。このように波数平面上の残差多項式の可視化は、収束過程のパラメータ α_{k-1}, ω_k などの変化と相補って見ていけば、反復解法の収束特性への理解は一層深まるであろう。

表 3-1 収束過程のパラメータ α_{k-1}, ω_k の値の正負の個数

収束過程	反復回数	C G S 法		Bi-CG STAB 法			
		$\alpha_{k-1} < 0$	$\alpha_{k-1} > 0$	$\alpha_{k-1} < 0$	$\alpha_{k-1} > 0$	$\omega_k < 0$	$\omega_k > 0$
第 1 収束期	1 ~ 32	4	28	9	23	12	20
第 2 収束期	33 ~ 73	4	37	11	30	3	38
第 3 収束期	74 ~ 100	#9	18	6	21	9	18

表 3-2 最大固有値 $\lambda_{max} = 7.527$ と $\frac{2}{\alpha_{k-1}}, \frac{2}{\omega_k}$ との大小関係

収束過程	C G S 法		Bi-CG STAB 法			
	$\frac{2}{\alpha_{k-1}} > \lambda_{max}$	$\frac{2}{\alpha_{k-1}} < \lambda_{max}$	$\frac{2}{\alpha_{k-1}} > \lambda_{max}$	$\frac{2}{\alpha_{k-1}} < \lambda_{max}$	$\frac{2}{\omega_k} > \lambda_{max}$	$\frac{2}{\omega_k} < \lambda_{max}$
第 1 収束期	4	28	8	24	15	17
第 2 収束期	7	34	5	36	22	19
第 3 収束期	◆8	19	12	15	*18	9

6 ま と め

Bi-CG STAB 法のような反復解法の収束過程の可視化は、収束特性を調べる上で強力な手段の 1 つである。物理平面における近似解や残差ベクトルの履歴の可視化は、いろいろな反復解法の性質を知るために役立つ。さらに、波数平面における残差多項式の履歴の可視化は、収束性に関する理論的考察に有効である。

7 謝 辞

可視化するにあたり、有益な助言と御協力をいただいた花王 (株) 文理科学研究所 竹内敏己氏に深く感謝致します。

8 参考文献

1. M. Driessen, H.A. van der Vorst, BI-CGSTAB in semiconductor modelling, Simulation of Semiconductor Device and Process Vol.4, Edited by W.Fichtner, D.Aemmer, Zurich (Switzerland), September 12-14, 1991.
2. R. Fletcher, Conjugate gradient methods for indefinite systems, Vol.506 of Lecture Notes Math., Springer-Verlag, Berlin, 1976, pp.73-89.
3. 藤野清次 外, Bi-CG STAB 法の流体解析への応用, 第5回数値流体力学シンポジウム講演論文集, 中央大学理工学部, 1991.12, pp.501-504.
4. 森 正武, FORTRAN 77 図形処理プログラミング, 岩波書店, 1991.
5. M. Mori, Visualization of the residual Polynomials of the CG and the ICCG methods, Proceedings of the International Symposium on Numerical Analysis, O. Celebi and B. Karasozen Ed., Sept., 1-4, 1987, Middle East Technical University, Ankara, pp.257-271.
6. 野寺 隆, INDEFINITE な行列系に対する CGS 法, 京都大学 数理解析研究所, 講究録 No.648, 1988.3.
7. C. Pommerell, W.Fichtner, New Developments in Iterative Methods for Device Simulation, Simulation of Semiconductor Device and Process Vol.4, Edited by W.Fichtner, D.Aemmer, Zurich (Switzerland), September 12-14, 1991.
8. P. Sonneveld, CGS, a fast Lanczos-type solver for nonsymmetric linear systems, SIAM, J. Sci. Stat. Comput., Vol.10, 1989, pp.36-52.
9. R. Varga, *Matrix Iterative Analysis*, Prentice-Hall, 1962, p.204.
10. H.A. van der Vorst, A Fast and Smoothly Converging Variant of Bi-CG for the Solution of Nonsymmetric Linear System, Preprint Nr.633, University Utrecht, Dept. Mathematics, 1990.

〔付録〕 固有ベクトルの重み $c_{i,j}$ ($i, j = 1, 2, \dots, n = 25$) について

重み $c_{n,1}$ 重み $c_{n,n}$ [illegible]重み $c_{1,1}$ 重み $c_{1,n}$ 固有ベクトルの重み $c_{i,j}$ の分布

上の図は、波数平面上の固有値に対応した固有ベクトル $c_{i,j}$ の重みを、ある小さな値 ε をもとに、その値より大きいとき 1、小さいとき 0 で表したものである。 ε としては、 $10^{-8} \times 4h^2$, $h = \frac{1}{n+1}$ とした。全部で $n^2 = 625$ 個ある重みのうち、図の中で 1 で表されたものは 163 個である。