

非対称係数連立一次方程式に対する反復解法の概観

岡山理大 仁木 滉 (Hiroshi Niki)
岡山理大 河野敏行 (Toshiyuki Kohno)
順正短大 薄井正孝 (Masataka Usui)

1. はじめに

非対称な行列を係数とする連立一次方程式の反復解法の CG 法系の決定版として Bi-CG STAB 法 [1] が有名であり, 日本では張、藤野氏 [2] が精力的に研究されている. 一方, SOR 系の反復法の研究成果は余り見られない. その理由は加速係数の推定に問題がある. しかしながら, アルゴリズムの簡単さからこの反復法は捨て難い魅力がある. 本論文では SOR 系の反復法として筆者らが興味を持った外挿 SOR 反復法, Parterbed SOR 法, MSOR 法と前処理系の反復法について概観する.

2. 外挿反復法

外挿反復法は W. Niethammer と J. Shade [3], Missirlis と Evans [4], Hadjidimos [5] らによって系統的に研究された. 外挿法は最初, 歪対称線形方程式の反復法として提案された [3]. ここでは行列 A の正則分離を $A = I - L - U = M - N$ とする. このとき M と N に対する設定により種々の反復法が存在する. そこで W. Niethammer [7] からこの分類法を示す.

A の対角行列にパラメータを付加した分離を $M \equiv \frac{1}{\omega}I - L, N \equiv (\frac{1}{\omega} - 1)I + U (\omega \neq 0)$ とすることで,

$$T(\omega) \equiv (I - \omega L)^{-1}((1 - \omega)I + \omega U)$$

となる. これは SOR 演算子である.

また Sisler [8] は下三角行列 L にパラメータを付加した分離を $M \equiv I - \beta L, N \equiv (1 - \beta)L + U$ とすると,

$$S(\beta) = (I - \beta L)^{-1}((1 - \beta)L + U)$$

を導いている. これも SOR 演算子である.

更に Sisler は 2 つのパラメータを用いる分離を考えた. すなわち, $M \equiv \frac{1}{\omega}I - \beta L, N \equiv (\frac{1}{\omega} - 1)I + (1 - \beta)L + U$. このときの反復演算子は次のようになる,

$$V(\psi, \beta) = (I - \psi\beta L)^{-1}((1 - \psi)I + (1 - \beta)\psi L + \psi U)$$

この反復法は Two parametric method と呼ばれている.

ここで $\psi = \alpha\omega, \beta = \frac{1}{\alpha}(\alpha, \beta \neq 0)$ とおくことによって,

$$\begin{aligned} V(\psi, \beta) &= (I - \psi\beta L)^{-1}((1 - \psi)I + (1 - \beta)\psi L + \psi U) \\ &= (I - \omega L)^{-1}((1 - \alpha\omega)I + \alpha\omega(1 - \frac{1}{\alpha})L + \alpha\omega U) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \alpha(I - \omega L)^{-1}((1 - \omega)I + \omega U) + (1 - \alpha)(I - \omega L)^{-1}(I - \omega L) \\
&= \alpha T(\omega) + (1 - \omega)I \equiv Z(\omega, \alpha)
\end{aligned}$$

が得られる. この反復法は Nitharmer によって緩和 SOR 法または外挿 SOR 法と名付けられている.

一方, $\psi \rightarrow \beta, \beta \rightarrow \alpha\omega$ とおく, すなわち, $M \equiv \frac{1}{\omega}I - \alpha\omega L, N \equiv (\frac{1}{\psi} - 1)I + (1 - \alpha\omega)L + U$ とするとき反復行列は次のようになる.

$$\begin{aligned}
V(\psi, \beta) &= V(\omega, \alpha\omega) \\
&= (I - \alpha\omega^2((1 - \psi)I + (\omega - \alpha\omega^2)L + \omega U)).
\end{aligned}$$

この反復法は Hadjidimos によって提案された AOR 法 [5] である.

P.Albrecht と M.P.Klein は外挿 SOR 法 (ESOR 法) について詳細に論究している [6]. 彼らは SOR 法が発散するときでも ESOR 法は収束することを示している. 更に係数行列が非巡回の場合, ESOR 法は SOR 法よりも 2 倍速いことを報告している. また, 4×4 の行列であるが例題で最適 ESOR 法は最適 SOR 法よりも 100 倍速いことを示している. 澤見氏はむしろ SOR 法が遅すぎると主張している. 我々も同感である.

これらの反復法には最適加速係数の推定の問題が残されているが, 最適加速係数を反復計算中に推定する手法が数多く報告されている. この手法の決定版が L.A.Hageman と D.M.Young [9] によって提案されている. 従って, この手法の ESOR 法への適用を奨める. 仁木らは AOR 法の改良版として SAOR 法を提案し, また加速係数の推定に [9] の手法を適用することによって, 良い成果を得た [10] [11].

3. Perturbed SOR 法

大阪女子大学の石原氏が提案した方法で 2 点境界値問題への適用を試みている [12]. 石原氏が研究集会等で紹介しているのでここでは簡単に述べる.

今, 次に示す非対称行列 A を考える,

$$A(\varepsilon) = \begin{pmatrix} 2 & -1 + \varepsilon \\ -1 - \varepsilon & 2 \end{pmatrix}, \quad \rho(T(\varepsilon)) = \frac{\sqrt{|\varepsilon^2 - 1|}}{2}.$$

直接計算することにより次の定理が与えられる.

定理. SOR 反復行列 $H_\omega(\varepsilon)$ のスペクトル半径を $\rho(H_\omega(\varepsilon))$ とする. $\rho(H_\omega(\varepsilon)) < 1$ を満たす必要十分条件は次の (a), (b) のいずれかである.

$$\begin{aligned}
(a) \quad & 0 < \omega < 2, \quad \omega_{opt} = \frac{4}{2 + \sqrt{\varepsilon^2 + 3}} \geq 1 \quad \text{for } \varepsilon^2 \leq 1, \\
(b) \quad & 0 < \omega < \frac{4}{2 + \sqrt{\varepsilon^2 - 1}}, \quad \omega_{opt} = \frac{4}{2 + \sqrt{\varepsilon^2 + 3}} \leq 1 \quad \text{for } \varepsilon^2 \geq 1.
\end{aligned}$$

この手法は最適加速係数の推定が簡単であり実用的であるが, 非対称性が大きいと使用できない欠点と, 係数行列が 3 重対角行列に限定されている.

4. 修正 SOR 法

$$A = \begin{bmatrix} D_1 & K \\ H & D_2 \end{bmatrix}$$

が D.M. Young [13] によって性質 A を持つと定義されている. ここで, A は n 次の行列で D_1 と D_2 はそれぞれ k 次と $n - k$ 次の対角行列である. この係数行列の反復解法として修正 SOR 法 (MSOR 法) が Young によって提案されている. また, 行列 A が非対称であることに着目して, M. M. Martin らが, MSOR 法を用いることを提案している [14]. 彼らは MSOR 法の適用可能な行列を 4 クラスに分類している. なお, 分類するために記号を次のように定義している.

$$\begin{aligned} N &= \{1, 2, \dots, n\}, \\ N(i) &= N \setminus \{i\}, \quad i \in N, \\ N_1 &= \{1, 2, \dots, k\}, \quad k \in N, \\ N_2 &= \{k+1, \dots, n\}, \quad k \in N, \\ P_i(A) &= \sum_{j \in N(i)} |a_{ij}|, \quad i \in N, \\ P_i^*(A) &= \sum_{j \in N(i)} |a_{ji}|, \quad i \in N. \end{aligned}$$

各クラスは $A \in C^{nn}$ に対して, 次のように定義される.

- C_0 クラス: A が狭義優対角である.
- C_1 クラス: A が不等式
 $|a_{ii}| > \alpha P_i(A) + (1 - \alpha) P_i^*(A), \quad i \in N$
 を満たす, $\alpha \in (0, 1]$ が存在する.
- C_2 クラス: A が不等式
 $|a_{ii}| |a_{jj}| > P_i(A) P_j(A), \quad i \in N_1, j \in N_2$
 を満たす.
- C_3 クラス: A が
 $|a_{ii}| (|a_{jj}| - P_j(A) + |a_{ji}|) > P_i(A) |a_{ji}|, \quad j \in N(i)$
 を満たす $i \in N$ が存在する.

以上の各クラスに対して加速係数の収束範囲を導いているが, 詳細は文献 [14] を参照されたい. 次に Martin らの数値例を示す.

(C_1 クラスの例)

$$A_1 = \begin{bmatrix} 1 & .5 & .4 \\ 1.2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$\frac{2}{3} < \alpha < \frac{3}{7}$ に対して C_1 クラスに属する.

$\alpha = 0.7$ とした場合 MSOR 法は次の収束区間を持つ,

$$0 < \omega \leq 1 \quad \text{かつ} \quad \frac{15}{16}\omega < \omega' < \frac{185}{184}$$

または

$$1 < \omega < \frac{164}{168} \quad \text{かつ} \quad \frac{15}{16}\omega < \omega' < \min \frac{200 - 15\omega}{184}, \frac{200 - 163\omega}{36}$$

(C_2 クラスの例)

$$A_2 = \begin{vmatrix} 1 & .1 & .9 \\ 1.1 & 1 & 0 \\ .9 & 0 & 1 \end{vmatrix}$$

$$\omega \in (0, \frac{2}{2.1}) \quad \text{かつ} \quad \omega' \in (0, \frac{2 - \omega}{1 + 0.05\omega})$$

(C_3 クラスの例)

$$A_3 = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 1.3 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & .5 & .1 & 0 \\ .3 & .5 & 1 & 0 & 0 \\ .2 & .1 & 0 & 1 & 0 \\ .5 & .1 & 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}$$

$$\omega \in (0, 1] \quad \text{かつ} \quad \omega' \in (0, \frac{2}{1.89})$$

または

$$\omega \in (1, \frac{2}{1.975}) \quad \text{かつ} \quad \omega' \in (0, \frac{2 - \omega}{1.5 - 0.555\omega})$$

この方法は性質 A を持った係数行列のみに適用可能である。しかも上述のクラスに属さないときには適用できない。我々がテストした結果は予想以上に反復回数が多く実用的であるとは言い難い。

5. 修正ガウス・ザイデル法

最近、最適加速係数を必要としない修正ガウス・ザイデル法が A. Gunawardena らによって提案されている [15]。この方法は係数行列が非対称の場合に対しても優れた収束比を示している。これは線型方程式 $Ax = b$ を解く際に直接、行列 A に反復法を適用するのでなく、 Z 行列 A に $I + S$ の乗算を行っている。ここで、

$$S = \begin{pmatrix} 0 & -a_{12} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & -a_{23} & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -a_{n-1n} \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}$$

である. この乗算は行列 A の第 1 次上双対角要素を全て 0 にする働きがある. ただし, Z 行列とは $A = (a_{ij})$ に対して $a_{ii} > 0$ かつ $a_{ij} < 0$ である. そして計算を簡単にするために $a_{ii} = 1$ としている. この乗算行列 A_m は

$$A_m = (I + S)A = I - L - SL - (U - S + SU)$$

となる. $i = 1, 2, \dots, n-1$ に対して, $a_{ii+1}a_{i+1i} \neq 1$ であるときは常に, $(I - SL - L)^{-1}$ が存在する. 故に, A_m に対して, ガウス・ザイデル反復行列を適用することが可能である. すなわち, 反復行列は次の式のようになる,

$$T_m = (I - SL - L)^{-1}(U - S + SU).$$

ここで, A が三重対角行列ならば, $T_m = (I - SL - L)^{-1}U^2$ である.

この T_m を Ananda D. Gunawardena らは修正ガウス・ザイデル反復行列と名付けている.

次に, 論文 [15] における例題を示す.

例 1.

$$A = \begin{pmatrix} 1 & -0.2 & -0.1 & -0.4 & -0.2 \\ -0.2 & 1 & -0.3 & -0.1 & -0.6 \\ -0.3 & -0.2 & 1 & -0.1 & -0.6 \\ -0.1 & -0.1 & -0.1 & 1 & -0.01 \\ -0.2 & -0.3 & -0.4 & -0.3 & 1 \end{pmatrix}$$

この場合,

$$\rho(T) = 0.9611 \quad , \quad \rho(T_m) = 0.9505$$

である.

例 2.

$$A = \begin{pmatrix} 1 & -0.0089 & -0.1305 & -0.0679 & -0.0252 \\ -0.2891 & 1 & -0.4724 & -0.2938 & -0.3628 \\ -0.1424 & -0.3383 & 1 & -0.0972 & -0.0290 \\ -0.3454 & -0.3384 & -0.4843 & 1 & -0.2982 \\ -0.0363 & -0.1415 & -0.3680 & -0.1266 & 1 \end{pmatrix}.$$

$$\rho(T) = 0.6897 \quad , \quad \rho(T_m) = 0.5610$$

である.

この 2 つの例題より, 明らかに修正ガウス・ザイデル反復行列のスペクトル半径は小さくなっていることが分かる.

次に, 我々が提案した適応的ガウス・ザイデル法を紹介する.

6. 適応的ガウス・ザイデル法

我々は修正ガウス・ザイデル法を基に新しい手法 [16] [17] を開発し, 良好な結果を得た. 我々は $I+S$ の乗算の代わりに $I+U$ の乗算を用いる新しい手法を考えた. すなわち,

$$A_a x = b_a$$

ここで, $A_a = (I+U)A$, $b_a = (I+U)b$ である. このとき, A_a は A よりも対角優勢度は大となる. そして, $A_a = D_a - E_a - F_a$ に対するガウス・ザイデル反復行列のスペクトル半径は修正ガウス・ザイデル反復行列のものより小となる. このことを証明する.

補題 1. $A = D - E - F$ が Z 行列ならばガウス・ザイデル反復行列 T のスペクトル半径の上限は全ての i に対して次式で与えられる,

$$\rho(T) \leq \max_i \frac{f_i}{d_i - e_i}$$

ここで, d_i, e_i, f_i はそれぞれ D, E, F の i 行の要素の和である.

補題 2. 対角優勢行列 A が Z 行列ならば A_m, A_a もまた Z 行列かつ対角優勢行列である.

証明. 行列 $A_m = D_m - E_m - F_m$ と行列 $A_a = D_a - E_a - F_a$ の要素を $A = (a_{ij})$ で表すと, 次の関係式が成り立つ,

$$\begin{aligned} f_i^m &= - \sum_{j=i+1}^n \{a_{ij} - a_{ii+1}a_{i+1j}\} \geq 0 \\ d_i^m &= 1 - a_{ii+1}a_{i+1i} \geq 0 \\ e_i^m &= - \sum_{j=1}^{i-1} \{a_{ij} - a_{ii+1}a_{i+1j}\} \geq 0, \\ f_i^a &= \sum_{j=i+1}^n \sum_{k=i+1, k \neq j}^n a_{ik}a_{kj} \geq 0 \\ d_i^a &= 1 - \sum_{k=i+1}^n a_{ik}a_{ki} \geq 0 \\ e_i^a &= - \sum_{j=1}^{i-1} \{a_{ij} - \sum_{k=i+1}^n a_{ik}a_{kj}\} \geq 0. \end{aligned}$$

簡単な計算により次の式を得る,

$$\begin{aligned} d_i^a - e_i^a - f_i^a &= \sum_{j=1}^n \{a_{ij} - \sum_{k=i+1}^n a_{ik}a_{kj}\} \geq 0 \\ d_i^m - e_i^m - f_i^m &= \sum_{j=1}^n \{a_{ij} - a_{ii+1}a_{i+1j}\} \geq 0. \end{aligned}$$

従って, A_m, A_a は Z 行列でかつ対角優勢行列である. ■

補題 3[18]. $A = I - L - U$ を $n \times n$ 行列とおく. このとき A が行 [列] による一般対角優勢行列であるための必要十分条件は,

$$(I - |L| - |U|)v = v' \quad [(I - |L| - |U|)^T v = v']$$

を満たす正ベクトル v, v' が存在することである.

定理. 対角優勢行列 A が Z 行列ならば $1 \leq i < n-1$ に対して次の不等式が成り立つ,

$$\frac{f_i^m}{d_i^m - e_i^m} > \frac{f_i^a}{d_i^a - e_i^a} \quad (\geq 0).$$

そして, $i = n-1, n$ に対しては, 次の式が成り立つ,

$$\frac{f_i^m}{d_i^m - e_i^m} = \frac{f_i^a}{d_i^a - e_i^a}.$$

7. 数値結果

数値例として次のような対角優勢行列を扱う,

$$A = \begin{pmatrix} 1 & a & b & c & a & \cdots \\ c & 1 & a & b & \ddots & a \\ b & c & \ddots & \ddots & \ddots & c \\ a & \ddots & \ddots & 1 & a & b \\ c & \ddots & b & c & 1 & a \\ \cdots & c & a & b & c & 1 \end{pmatrix},$$

ここで,

$$a = \frac{-p}{n}, \quad b = \frac{-p}{n+1}, \quad c = \frac{-p}{n+2}$$

である. パラメータを変化させて得た結果を表 1 に示す.

次に, 非対角優勢行列で既約な次のような Z 行列を扱う,

$$A = \begin{pmatrix} 1 & -0.2 & -0.1 & -0.4 & -0.2 \\ -0.2 & 1 & -0.3 & -0.1 & -0.6 \\ -0.3 & -0.2 & 1 & -0.1 & -0.6 \\ -0.1 & -0.1 & -0.1 & 1 & -0.01 \\ -0.2 & -0.3 & -0.4 & -0.3 & 1 \end{pmatrix}.$$

これは補題 3 より一般対角優勢行列であり, [18] より収束することが示されている. この結果を表 2 に示す.

表 1

次数	p	スペクトル半径
10	1.0	$\rho(T) = 0.6854$
		$\rho(T_m) = 0.6292$
		$\rho(T_a) = 0.4718$
10	0.9	$\rho(T) = 0.5650$
		$\rho(T_m) = 0.4988$
		$\rho(T_a) = 0.3265$
30	0.8	$\rho(T) = 0.5822$
		$\rho(T_m) = 0.5618$
		$\rho(T_a) = 0.3622$
50	0.8	$\rho(T) = 0.7530$
		$\rho(T_m) = 0.7446$
		$\rho(T_a) = 0.5857$

表 2

次数	スペクトル半径
5	$\rho(T) = 0.9611$
	$\rho(T_m) = 0.9505$
	$\rho(T_a) = 0.9127$

まとめ

非対称連立方程式を解くためのいくつかの反復解法について述べてきたが、ここに紹介しなかった 1, 2 の新しい手法の報告もあるが、有効性が不明なために割愛した。いずれにしても SOR 系では反復回数に大きく影響を与える加速係数の推定法が依然として残されている。この研究集会で報告したように、対称問題において適応的ガウス・ザイデル法を加速したものは最適 SOR 法よりも反復回数が少ないという結果が得られている。加速係数の推定法が解決されるならば、アルゴリズムの簡単さからさらに発展すると考えられる。

参考文献

- [1] H. A. Van der Vorst, Bi-CG STAB: A Fast Smoothly Converging Variant of Bi-CG for the Solution of Nonsymmetric Linear Systems, *SIAMJ. Sci. Stat. Compt.*, vol.13(1992), PP.801-812.
- [2] 張 紹良, 藤野清次, CGS 法と Bi-CG STAB 法の残差多項式, 京都大学数理解析研究所講究録, no.791(1992), PP.1-15.
- [3] W. Niethammer and J. Schade, On a Relaxed SOR-method Applied to Nonsymmetric Linear Systems, *J. CAM.*, vol.1(1975), PP.133-136.

- [4] N. M. Missirlis and D. J. Evans, On the Convergence of some Generalized Preconditioned Iterative Methods, *SIAMJ. Numer. Anal.*, vol.18(1981), PP.591-596.
- [5] A. Hadjidimos, Accelerated Overrelaxation Method, *Math. Compt.*, vol.32(1978), PP.149-157.
- [6] P. Albrecht and M. P. Klein, Extrapolated Iterative Method for Linear Systems, *SIAMJ. Numer. Anal.*, vol.21(1984), PP.192-201.
- [7] W. Niethammer, On Different Splitting and the Associated Iteration Methods, *SIAMJ. Numer. Anal.*, vol.16(1979), PP.186-200.
- [8] M. Sisler, Über ein Iteration ver Fahren für Zyklische Matrizen, *Apl. Mat.*, vol.17(1972), PP.225-233.
- [9] L.A. Hageman and D.M. Young, Applied Iterative Methods, (*Academic Press, New York/London*, 1981).
- [10] S. Yamada, I. Ohsaki, Ikeuchi and H. Niki, Non-adaptive and Adaptive SAOR-CG Algorithms, *Compt. Appl. Math.*, vol.12(1985), PP.635-650.
- [11] I. Ohsaki and H. Niki, The Accelerated SAOR Method for Large Linear Systems, *J. Compt. Appl. Math.*, vol.24(1988), PP.277-291.
- [12] K. Ishihara and M. Yamamoto, SOR Methods for Finite Difference Equations with a Nonsymmetric Matrix arising from Two Point Boundary Value Problem, *Math. Japonica*, vol.38(1993), PP.127-139.
- [13] D. M. Young, Iterative Solution of Large Linear Systems, (*Academic Press, New York/London*, 1971).
- [14] D. Herceg, M.M. Martins and M.E. Trigo, On the Convergence of the MSOR Method for some Class of Matrices, *SIAMJ. Matrix Anal. Appl.*, vol.14(1993), PP.121-131.
- [15] A. Gunawardena, S. K. Jain and L. Snyder, Modified Iterative Methods for Consistent Linear Systems, *Linear Algebra Appl.*, vol.154-156(1991), PP.123-143.
- [16] 河野敏行, 木梨陽介, 仁木 滉, 薄井正孝, 適応的ガウス・ザイデル法に関する一考察, 応用数理学会平成5年度年会予稿集 (1993), PP.99-100.
- [17] M. Usui, H. Niki and T. Kohno, Adaptive Gauss-Seidel Method for Linear Systems, *Int. J. Compt. Math.*, vol.51, (In press).
- [18] K.R. James and W. Riha, Convergence criteria for successive overrelaxation, *SIAMJ. Numer. Anal.*, vol.12(1975), PP.137-143.