

多段階前処理反復法

岡山理科大学大学院 河野敏行 (Toshiyuki Kohno)
岡山理科大学理学部 仁木 滉 (Hiroshi Niki)
岡山理科大学理学部 薄井正孝 (Masataka Usui)

我々は係数行列 A が非対称の線型方程式 $Ax = b$ を解くための前処理反復法として適応的 Gauss-Seidel 反復法を開発した [1], さらに, 多段階前処理反復法を開発を行った [2]. 今回はこの方法の応用例として, 歪対称行列を取り扱う. 今回我々は狭義優対角行列 A [3] に対する収束定理を導き, この手法の妥当性を数値例で示す. 最後にこの優対角の割合による反復回数の変化を例題で示す.

1 Z 行列に対する多段階前処理付反復法の収束性

$Ax = b$ に反復法を適用する前に方程式にある前処理行列を適用した後, 反復法を用いる方法を前処理付反復法と名付ける. 反復法として Gauss-Seidel 法を用いる.

以下の分離を用いる,

$$A = I - L - U$$

ここで行列 I は単位行列, L, U はそれぞれ A の狭義下三角行列, 狭義上三角行列である. Gauss-Seidel 反復行列に対する補題を示す.

補題 1 [4] $A = I - L - U$ に対する Gauss-Seidel 反復行列のスペクトル半径の上限は

$$\rho(T) \leq \max_i \frac{u_i}{1 - l_i}$$

によって表される. ここで l_i, u_i は三角行列 L, U の行 i での要素の絶対値の和である. 次に前処理行列を示す.

1.1 適応的反復法

前処理行列

$$(I + U)$$

を用いたとき, 係数行列を A^a と置く,

$$\begin{aligned} (I + U)Ax &= (I + U)b \\ A^a x &= b^a. \end{aligned}$$

[1] において以下の定理が示されている.

定理 1. 優対角行列 A が Z 行列ならば $A^a = (I + U)A$ も優対角な Z 行列である.

定理 2. 優対角行列 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,

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

1.2 多段階前処理付反復法 前処理行列として

$$\prod_{i=1}^k P_i$$

を用いる。ただし

$$\begin{aligned} P_i &= (D^{a(i)})^{-1}(I + U^{a(i-1)}) \\ D^{a(i)} &: (I + U^{a(i-1)})A^{a(i-1)} \text{の対角行列} \end{aligned}$$

である。このときの係数行列を $A^{a(k)}$ と示す,

$$\begin{aligned} \prod_{i=1}^k P_i Ax &= \prod_{i=1}^k P_i b \\ A^{a(k)}x &= b^{a(k)} \end{aligned}$$

同様に $A^{a(k)}$ に対する Gauss-Seidel 反復行列を $T^{a(k)}$ と示す。ここで k は k 段階を示す。

注意 $k = 0$ のとき $T^{a(0)}$ は古典的な Gauss-Seidel 反復行列である。 $T^{a(1)}$ は適応的 Gauss-Seidel 反復行列である。そして $T^{a(2)}$ は 2 段階適応的 Gauss-Seidel 反復行列と呼ぶ。

定理 3. 係数行列 $A = I - L - U = (a_{ij})$, $1 \leq i, j \leq n$ を Z 行列かつ優対角行列とする。このとき k 段階係数行列 $A^{a(k)}$ もまた Z 行列かつ優対角行列である。

証明 1 段階前処理付 Gauss-Seidel 反復行列は適応的 Gauss-Seidel 反復行列であるから、証明は定理 1 で与えられている。

2 段階係数行列は

$$A^{a(2)} = (D^{a(2)})^{-1}(I + U^{a(1)})(D^{a(1)})^{-1}(I + U^{a(0)})A,$$

である。ここで、 $D^{a(1)}, D^{a(2)}$ はそれぞれ、 $(I + U^{a(0)})A, (I + U^{a(1)})A^{a(1)}$ の対角成分である。 $(I + U^{a(0)})A$ は優対角 Z 行列であるから、 $(I + U^{a(1)})$ を乗算した係数行列もまた、定理 1 より、優対角行列である。同様に、 k 段階前処理付係数行列は、

$$\begin{aligned} A^{a(k)} &= (D^{a(k)})^{-1}(I + U^{a(k-1)})(D^{a(k-1)})^{-1} \\ &\quad (I + U^{a(k-2)}) \cdots (D^{a(1)})^{-1}(I + U)A, \\ &= (D^{a(k)})^{-1}(I + U^{a(k-1)})A^{a(k-1)}. \end{aligned}$$

$A^{a(k)}$ の各要素は

$$\begin{aligned} a_{ij}^{a(k)} &= (d_i^{a(k)})^{-1}(a_{ij}^{a(k-1)} - \sum_{l=i+1}^n a_{il}^{a(k-1)} a_{lj}^{a(k-1)}) \\ &\quad \text{for } 1 \leq i, j \leq n. \end{aligned} \tag{1}$$

ここで, $d_i^{a(k)}$ は $(I + U^{a(k)})A^{a(k-1)}$ の i 行の対角要素である. すなわち,

$$d_i^{a(k)} = (1 - \sum_{l=i+1}^n a_{il}^{a(k-1)} a_{li}^{a(k-1)}) > 0. \quad (2)$$

式 (1), (2) と定理 1 より, $A^{a(k)}$ は Z 行列である.

次に, $A^{a(k)}$ の行もしくは列の和は

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_{j=1}^n a_{ij}^{a(k)} = (1 - \sum_{l=i+1}^n a_{il}^{a(k-1)} a_{li}^{a(k-1)})^{-1} \\ \quad \sum_{j=1}^n (a_{ij}^{a(k-1)} - \sum_{l=i+1}^n a_{il}^{a(k-1)} a_{lj}^{a(k-1)}) > 0 \quad (1 \leq i \leq n), \\ \sum_{i=1}^n a_{ij}^{a(k)} = (1 - \sum_{l=i+1}^n a_{il}^{a(k-1)} a_{li}^{a(k-1)})^{-1} \\ \quad \sum_{i=1}^n (a_{ij}^{a(k-1)} - \sum_{l=i+1}^n a_{il}^{a(k-1)} a_{lj}^{a(k-1)}) > 0 \quad (1 \leq j \leq n). \end{array} \right.$$

それゆえ, $A^{a(k)}$ は優対角行列である.

従って, A が Z 行列かつ優対角行列であるとき, k 段階前処理付係数行列もまた優対角である. ■

定理 4. 係数行列 $A = I - L - U = (a_{ij})$ が Z 行列かつ優対角行列とする. このとき,

$$\rho(T^{a(k)}) \leq \rho(T^{a(k-1)}) \quad k \geq 2,$$

を満たす.

証明. $k-1, k$ 段階前処理付係数行列は,

$$\begin{aligned} A^{a(k-1)} &= I - L^{a(k-1)} - U^{a(k-1)}, \\ A^{a(k)} &= (D^{a(k)})^{-1} (I + U^{a(k-1)}) A^{a(k-1)}. \end{aligned}$$

定理 3 より, $A^{a(k-1)}, A^{a(k)}$ は共に Z 行列かつ優対角行列である. それゆえ,

$$\frac{u_i^{a(k)}}{1 - l_i^{a(k)}} \leq \frac{u_i^{a(k-1)}}{1 - l_i^{a(k-1)}}.$$

従って,

$$\rho(T^{a(k)}) \leq \rho(T^{a(k-1)}),$$

ここで, $l_i^{a(k-1)}, u_i^{a(k-1)}$ はそれぞれ $L^{a(k-1)}, U^{a(k-1)}$ の i 行の和である. ■

2 歪対称行列に対する前処理反復法の収束性

係数行列 A は $I + B$ を用いる. ここで B は下三角要素が非正な歪対称行列である. このとき, 前処理行列として $I + U$ を用いると

$$A^a = (I + U)A = I - L - UL - U^2$$

が得られる。このとき U は非正行列, L は非負行列である。ゆえに, $-UL$ と U^2 は非負行列である。行列 $-UL$ は $n-1 \times n-1$ の行列であるため,

$$-UL = E + F$$

のように分離する, ただし E, F はそれぞれ非負な下三角行列, 狭義上三角行列である。従って, 適応的 Gauss-Seidel 反復行列は

$$T^a = (I - L + E)^{-1}(U^2 - F) \quad (3)$$

となる。

補題 2. 歪対称行列 B に対して優対角な係数行列 $A = I + B$ を持つ線型方程式 $Ax = b$ に対して適応的 Gauss-Seidel 反復行列 $T^a = (I - L + E)^{-1}(U^2 - F)$ のスペクトル半径の上限は以下の式によって与えられる。

$$\rho(T^a) \leq \max_i \frac{|(u^2)_i - f_i|}{1 - l_i + e_i}$$

ここで, $(u^2)_i, f_i, l_i, e_i$, はそれぞれ行列 U^2, F, L, E の i 行の各要素の絶対値の和である。

定理 5. 歪対称行列 B に対して優対角な係数行列 $A = I + B$ を持つ線型方程式 $Ax = b$ に対して Gauss-Seidel 反復行列 $T = (I - L)^{-1}U$ が収束するならば, 適応的 Gauss-Seidel 反復行列のスペクトル半径の上限は以下の式を満たす。

$$\max_i \frac{|(u^2)_i - f_i|}{1 - l_i + e_i} < \max_i \frac{u_i}{1 - l_i} < 1$$

ここで, $(u^2)_i, f_i, l_i, e_i, u_i$ はそれぞれ行列 U^2, F, L, E, U の i 行の各要素の絶対値の和である。

証明 Gauss-Seidel 反復行列が収束することより

$$\rho(T) \leq \max_i \frac{u_i}{1 - l_i} < 1 \quad 1 \leq i \leq n$$

である。ここで, 対角を含む非負行列 E に対して容易に以下のことが分かる。

$$1 - l_i + e_i > 1 - l_i \quad (4)$$

ただし e_i は行列 E の i 行での要素の絶対値の和である。

次に Gauss-Seidel 反復行列が収束することより,

$$u_i < 1 - l_i$$

$$u_i < 1$$

である。そして容易に以下の関係が得られる,

$$\begin{aligned} (u^2)_i &< u_i \\ f_i &< u_i \\ |(u^2)_i - f_i| &< u_i. \end{aligned} \quad (5)$$

ただし $(u^2)_i, f_i$ は行列 U^2, F の i 行での要素の絶対値の和である。補題 2. と式 (4) (5) より,

$$\rho(T^a) \leq \max_i \frac{(u^2)_i - f_i}{1 - l_i + e_i} < \max_i \frac{u_i}{1 - l_i} < 1 \quad 1 \leq i \leq n-1$$

が得られ, 歪対称行列に対する適応的 Gauss-Seidel 反復行列が収束することが示された。■

次に Z 行列と歪対称行列に対するアルゴリズムの有効性を数値結果によって示す。

3 数値結果

まず, Z 行列に対する多段階前処理付 Gauss-Seidel 法の結果を示す。

$$A = \begin{pmatrix} 1.00 & -0.20 & -0.10 & -0.40 & -0.20 \\ -0.20 & 1.00 & -0.30 & -0.10 & -0.60 \\ -0.30 & -0.20 & 1.00 & -0.10 & -0.60 \\ -0.10 & -0.10 & -0.10 & 1.00 & -0.01 \\ -0.20 & -0.30 & -0.40 & -0.30 & 1.00 \end{pmatrix}$$

表 1

反復行列	スペクトル半径	反復回数
T	0.96111692	384
T^a	0.91271901	176
$T^{a(2)}$	0.82889684	89
$T^{a(3)}$	0.64381839	40
$T^{a(4)}$	0.31486959	16

次に以下に示す優対角 Z 行列に試みる,

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

ここで,

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

である. 数値結果は $n = 100, 200, 300$ に対して行った (表 2, 3, 4).

表 2 (n=100)

	スペクトル半径	反復回数
T	0.96104	490
T^a	0.92729	265
$T^{a(2)}$	0.88366	165
$T^{a(3)}$	0.82496	107
$T^{a(4)}$	0.74806	72

表 3 (n=200)

	スペクトル半径	反復回数
T	0.98024	992
T^a	0.96291	538
$T^{a(2)}$	0.94003	334
$T^{a(3)}$	0.90842	217
$T^{a(4)}$	0.86534	146

表 4 (n=300)

	スペクトル半径	反復回数
T	0.98678	1501
T^a	0.97511	814
$T^{a(2)}$	0.95960	505
$T^{a(3)}$	0.93800	329
$T^{a(4)}$	0.90818	229

以上より優対角 2 行列に対しては段階数を増加するごとに反復数が約半減することが分かる. 次は以下に示す優対角歪対称行列に対して表 5, 6, 7 の結果を得た,

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

ここで,

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

である.

表 5 (n=100)

	スペクトル半径	反復回数
T	0.96129	592
T^a	0.06506	10
$T^{a(2)}$	0.04868	9
$T^{a(3)}$	0.00918	6
$T^{a(4)}$	0.00103	5

表 6 (n=200)

	スペクトル半径	反復回数
T	0.98033	1227
T^a	0.06692	10
$T^{a(2)}$	0.05044	9
$T^{a(3)}$	0.00961	7
$T^{a(4)}$	0.00111	5

表 7 (n=300)

	スペクトル半径	反復回数
T	0.98681	1882
T^a	0.06755	11
$T^{a(2)}$	0.05104	10
$T^{a(3)}$	0.00976	7
$T^{a(4)}$	0.00114	5

以上で用いた例題は要素がある特殊な法則をもつので、次に一様乱数を用いた数値結果を示す。ここで優対角の割合による反復回数の変化をみるために、優対角度を定義する。定義 行列の対角要素と非対角要素の比の平均を優対角度 p と定義する。

$$p = \frac{1}{n} \sum_i \frac{|a_{ii}|}{\sum_{j \neq i} |a_{ij}|}$$

係数行列は優対角行列とするために、一様乱数で得た非対角要素の総和を p 倍したものを n で割った値を対角要素として係数行列を生成する。

優対角度 $p=1.05$, 2 の Z 行列に対する結果を表 8, 9 に示す。下に示した値は定義によって得られる優対角度の値である。

表 8 (優対角度 $p=1.05$)

	$n=50$	$n=100$	$n=200$	$n=300$
GS	198	211	222	209
$k=1$	108	115	121	114
$k=2$	67	72	76	72
$k=3$	44	47	50	47
$k=4$	30	32	34	33
$k=5$	21	23	24	23
厳密 p	1.057	1.054	1.052	1.056

k は k 段階 GS を表している。

表9 (優対角度 $p=2$)

	$n=50$	$n=100$	$n=200$	$n=300$
GS	19	20	20	21
$k=1$	11	12	12	12
$k=2$	8	8	8	9
$k=3$	6	6	6	6
$k=4$	5	5	5	5
$k=5$	4	4	4	4
厳密 p	2.013	2.008	2.003	2.002

次に一様乱数を用いた歪対称行列を扱う。結果を表10,11に示す。

表10 (優対角度 $p=1.05$)

	$n=15$	$n=100$	$n=200$	$n=300$
GS	270	258	263	265
$k=1$	9	10	10	10
$k=2$	9	9	9	9
$k=3$	6	6	7	7
$k=4$	5	5	5	5
$k=5$	4	4	4	4
厳密 p	1.058	1.053	1.052	1.051

k は k 段階GSを表している。

表11 (優対角度 $p=2$)

	$n=50$	$n=100$	$n=200$	$n=300$
GS	19	20	21	21
$k=1$	7	7	7	7
$k=2$	6	6	6	6
$k=3$	5	5	5	5
$k=4$	4	4	4	4
$k=5$	3	3	3	3
厳密 p	2.01	2.01	2.00	2.00

まとめ

Z行列に対して適応的 Gauss-Seidel 法の反復回数は Gauss-Seidel 法の約半分となり、段階を増加に比例して反復回数は約半減している。歪対称行列に対しては適応的 Gauss-Seidel 法の反復回数が次数に関係なく約 10 回という興味深い結果を示している。このように適応的 Gauss-Seidel 法は Z 行列よりも歪対称行列に対して有効であり、多段階前処理反復法は歪対称行列よりも Z 行列に対して有効な結果を示している。また我々が定義した優対角度が同じならば、次数を変えても Z 行列、歪対称行列に対して Gauss-Seidel 法の反復回数はほぼ同じであるという結果を得た。

これから、前処理反復法のより実用的な発展のために並列処理を用いた前処理反復法の研究を進めたい。

参考文献

- [1] Usui M., Niki H. and Kohno T., "*Adaptive Gauss-Seidel Method for Linear Systems*", Int. J. Compt. Math., vol.51, pp.119-125, 1994.
- [2] Kohno T., Niki H. and Usui M., "*Multi-step Preconditioned Iteration method for Non-symmetric Linear Systems*", Int. J. Compt. Math., vol.56, 177-184, 1995.
- [3] Varga R.S., *Matrix Iterative Analysis*, Prentice-Hall, Inc., 1962.
- [4] K.R.James, *CONVERGENCE OF MATRIX ITERATIONS SUBJECT TO DIAGONAL DOMINANCE*, SIAM J. Numer. Anal. Vol.10, No.3, 478-484, 1973.