境界要素法論文集　Vol.19　(2002 年 12 月)，論文 No. 05_020928　　JASCOME

境界要素法で生じる線型方程式系の優対角化反復解法

ITERATIVE SOLUTION FOR BOUNDARY ELEMENT EQUATIONS WITH PRECONTIONING USING ELIMINATION

榊原道夫 [1]，仁木滉 [2]，森本宗典 [3]，岡本直孝 [4]

Michio SAKAKIHARA, Hiroshi NIKI, Munenori MORIMOTO, Naotaka OKAMOTO

1)　岡山理科大学総合情報学部情報科学科（〒700-0005　岡山市理大町１−１　E-mail:sakaki@mis.ous.ac.jp）
2)　岡山理科大学総合情報学部情報科学科（〒700-0005　岡山市理大町１−１　E-mail:niki@mis.ous.ac.jp）
3)　岡山理科大学大学院総合情報研究科（〒700-0005　岡山市理大町１−１　E-mail:munenori@nikisemi.mis.ous.ac.jp）
4)　岡山理科大学工学部応用化学科　　（〒700-0005　岡山市理大町１−１　E-mail:okamoto@dac.ous.ac.jp）

Iterative solution methods such as the Gauss-Seidel and the SOR methods have been studied for large systems of linear equations arising from the finite difference and finite element methods,　since the systems has some special properties as the positive definite,　M-matrix and the diagonal dominance. Theoretical results for those cases　can not applied to systems　of　linear equations generated from applying the boundary　element　method to　Dirichlet　boundary　value problems for the Laplace equation. The aim of this paper is to present a solution method systems of linear equations generated from applying　the boundary element method.　We introduce a class of matrices　and discuss the convergence property of the Gauss-Seidel mehod for the class practically.

1. はじめに

境界要素法に現れる線型方程式の係数行列は一般に密行列である．そのような方程式の数値解法としてはピボットを伴う Gauss の消去法を適用するのが一般的である．Gauss 消去法は未知数の数 n が増加すると $O(n^3)$ で計算量が増加する．また計算された解の精度は係数行列の条件数と係数成長因子(前進消去で係数行列の絶対値が増加する上限 [1])に依存する．また Gauss-Seidel 法のような反復法は，計算時間は初期値の選択に依存するが計算量の増加は $O(n^2)$ で Gauss 消去法より増加率が少ない．しかしながら，反復法は収束しない場合が存在する．反復法は係数行列から構成された反復行列のスペクトル半径が1未満でなければ収束しない．スペクトル半径が 1 未満であるかどうかを　厳密に判定しようとすれば反復行列の絶対値最大の固有値を求めなければならず，現実的ではない．係数行列だけの情報で，そのことを判定する方法としては優対角性の検証がある．優対角行列は特定の微分方程式に差分法を適用した場合などの特殊な場合にしか現れない．そのため一般に反復法は直接に境界要素法への応用が適切でないように思われる．ところが部分的な消去を行うことにより境界要素方程式を優対角化することができる．優対角化された方程式系には反復法を適用することができ従来適用されてきた行列（正定値対称行列，M-行列など）以外の場合である境界要素方程式のような密行列に対して，反復法が解法として有効であることを示す．また，Gauss-Seidel 法のプレコンディションによる加速についても述べる．

2. 優対角性

線型方程式系

$$Ax = b \qquad (1)$$

が優対角であるとは，係数行列 $A = \left(a_{ij}\right)$ が

$$\left|a_{ii}\right| \geq \sum_{j=1,\, j\neq i}^{n} \left|a_{ij}\right|,\ i = 1,\ldots,n \qquad (2)$$

を満たし，狭義の不等式が 1 行以上で成り立ち他の行が狭義の不等式を満足する行に連結である場合であることが知られている．連結とは，グラフ理論に現れる用語で，この場合未知数のインデックスを振った

点を 2 次元平面に置き接続行列を係数行列の成分が0でない場合1としてグラフを構成する．ある点とある点が連結とは、その二点間を繋ぐパスが存在することである． この場合係数行列の行列式は非ゼロとなり方程式系は一意解を持つ．またこの条件を満たすとき，基本反復法（Jacobi法，Gauss-Seidel法など）の収束が保障される．それぞれの行に対して次の優対角度

$$t_i = \frac{\sum_{j=1, j \neq i}^{n} a_{ij}}{a_{ii}},\ i = 1,2,\ldots,n$$

を定義する． $t_i < 1$であるならばその行は狭義優対角である．またよく知られているように優対角行列は次の補題により H-行列と関連つけられる．

補題 1 [6]：正方行列Aが H-行列であるための必要十分条件は，ADが狭義優対角行列となるような対角行列$D, d_{ii} > 0$が存在する（このような行列を一般化優対角行列と言う）ことである．

3．反復法と収束定理

線型方程式系(1)に対する反復法はその係数行列の種々な分離より導かれる．係数行列が与えられて，何らかの反復法が適用できるかどうかの判定は多岐にわたる．Ostrowski-Reich の定理 [7]として知られているように係数行列が正定値対称である場合 Gauss-Seidel 法は収束する．また係数行列が M-行列の場合も Gauss-Seidel 法は収束する．しかしながら，与えられた方程式系の係数行列が正定値であるかまたは M-行列であるかは，優対角性のように係数から簡単に判定することは困難である．さらに境界要素法を適用し，生成される離散系に現れる係数行列は非構造であり密行列であるため，問題は一層難しくなる．優対角性は簡単な判定条件であるが，非常にきつい条件である．境界要素法で現れる行列では優対角の条件を満足する行列を構成するのは困難である．単調性必要としない H-行列に対しては判定法が研究されている．補題 1 から理解できるように H-行列と一般化優対角行列とは等価である．与えられた行列の比較行列を

$$\langle A \rangle = (b_{ij}), b_{ij} = \begin{cases} |a_{ii}| & \\ -|a_{ij}| & i \neq j \end{cases}$$

により定義する．Aが H-行列であるならばその比較行列$\langle A \rangle$は M-行列であり，$\langle A \rangle^{-1}$は非負行列$\langle A \rangle^{-1} \geq 0$である．H-行列の集合は優対角行列の集合より広い集合である．境界要素法に現れる行列は一般に H-行列でもない．この H-行列の性質を利用し以下で示すような有用な結果が得られている．分離$A = M - N$を考える．そのとき$\langle M \rangle - |N|$が M-行列であるとき H-分離という．また$\langle A \rangle = \langle M \rangle - |N|$であるとき H-互換分離という．このように分離を考えられることは反復法をより多様に構成できることを示している．について． A.Frommer and D.B.Szyld [2]は$A = M - N$を H-互換分離とすると$\langle A \rangle = \langle M \rangle - |N|$および$\langle M \rangle$は H-行列で

$$\rho(M^{-1}N) \leq \rho(\langle M \rangle^{-1}|N|) < 1$$

が成立するという従来知られている結果の一般化した結果を示している．このことより，ただちにAが一般化優対角行列（H-行列）で Gauss－Seidel 分離を適用した場合，その反復は収束することが分かる．

境界要素法に現れる行列は一般に H-行列ですらない．このような方程式系に対し反復法の議論をするためには，より範囲の広い行列の集合を新たに考えなければならない．そのような集合を定義するヒントがH-行列である．H-行列は対角行列により優対角行列に変換できる．このことより優対角化するのに対角行列による変換以外に有効な変換が存在しないかということが考えられる．そのような変換を次の節において提案する．

4．非優対角行列の優対角化

非優対角行列を優対角化する変換行列として$Q^{(k)} = (q_{ij}^{(k)})$：対角成分がすべて 1 で，$A^{(k-1)} = Q^{(k-1)} \cdots Q^{(1)} A;\ A^{(0)} = A$の非優対角行について絶対値最大列のインデックスが$(m,n)$とするとき，そのインデックスの成分を

$$q_{mn}^{(k)} = -\frac{a_{mn}^{(k-1)}}{a_{mm}^{(k-1)}}$$

により与え、その他の成分はすべて0となる行列を考える．ただし $a_{ij}^{(0)} = a_{ij}$ で $a_{mn}^{(k)}$ は第 m 行で絶対値最大の成分である．この行列を係数行列の左側から作用さす．この変換は非優対角行の絶対値最大成分を値小さくする変換である．この変換で優対角化できる行列の集合を明確に特徴付けることには成功していない．この特徴付けは今後の課題である．アルゴリズムが提案できる．消去に対応するこの行列により係数行列を優対角化することを試みる．

5．数値例

先ず簡単な行列により前節までのことを説明する．行列

$$A = \begin{pmatrix} 1 & -0.5 & 0.6 & 0.2 \\ -0.4 & 1 & -0.3 & 0.4 \\ 0.3 & -0.6 & 1 & -0.5 \\ 0.5 & 0.1 & -0.7 & 1 \end{pmatrix}$$

は優対角行列ではなく事実

$$\langle A \rangle^{-1} = \begin{pmatrix} -2.99 & -0.99 & -1.23 & -1.01 \\ -0.86 & -0.22 & -1.17 & -0.84 \\ -1.11 & -1.05 & -0.67 & -0.98 \\ -1.01 & -1.26 & -1.20 & -0.30 \end{pmatrix}$$

となり，非負行列とはならないため比較行列が M-行列ではない．そのため Gauss-Seidel 反復の収束は判定できない．しかしながら 4 節で示した乗算を二回行うことにより優対角化が以下のように行える．まず

$$Q^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & -0.6 & 0 \\ 0.4 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0.6 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0.7 & 1 \end{pmatrix}$$

とすると

$$Q^{(1)}A = \begin{pmatrix} 0.82 & -0.14 & 0 & 0.5 \\ 0 & 0.8 & -0.06 & 0.48 \\ 0.06 & 0 & 0.82 & -0.26 \\ 0.71 & -0.32 & 0 & 0.65 \end{pmatrix}$$

を得る．第 4 行目がまだ優対角でないため

$$Q^{(2)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ -0.87 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

とし上の結果より

$$Q^{(2)}Q^{(1)}A = \begin{pmatrix} 0.82 & -0.14 & 0 & 0.50 \\ 0 & 0.80 & -0.06 & 0.48 \\ 0.06 & 0 & 0.82 & -0.26 \\ 0 & -0.198 & 0 & 0.215 \end{pmatrix}$$

となり狭義優対角行列となる．

さて次に領域[0, 1]×[0, 1]におけるラプラス方程式の Dirichlet 問題に対し境界要素法を適用して得られる係数行列の場合を取り上げる．境界要素として一定要素（128要素）を適用する．生成された行列はもちろん優対角行列ではない．図1に係数行列の要素の大きさについての分布図を示す．図下のゲージに要素の最大値と最小値の表示とその区間での相対的な要素の大きさの変化と色の変化の対応を示す．二十五回の乗算後によりすべての行が優対角となる（図 2,3 参照）．$Q^{(k)}$ の乗算で計算量は $O(n^2)$ で，この例の場合 $Q^{(k)}$ の乗算回数は 25 回である．この操作により生成された係数行列は優対角化され反復法の適用が可能であることが分かる．

また図 3 より優対角行数は十五回目の乗算以降に急激に増加している．優対角度が減少するほど優対角性がよくなるが，優対角性がよくなるほど反復法は速く収束する．しかしながら収束を判定するだけでよいならば係数行列を狭義優対角行列にする必要はなく，$A^{(k)}$ が一般化優対角行列となる回数で乗算を停止すればよい．ここで示した例の場合十五～十七程度の乗算で停止できる．

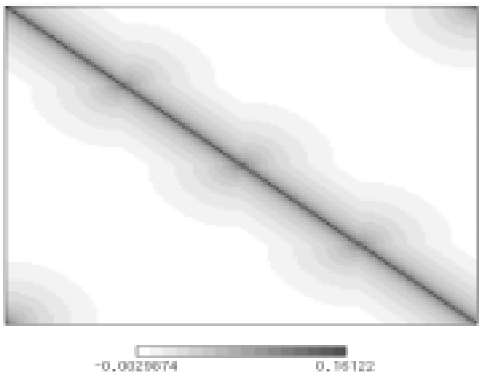

図1：行列成分の大きさ分布図

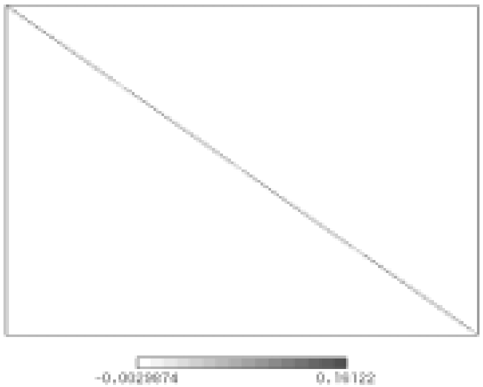

図2：二十五回乗算後の行列成分の大きさ分布図

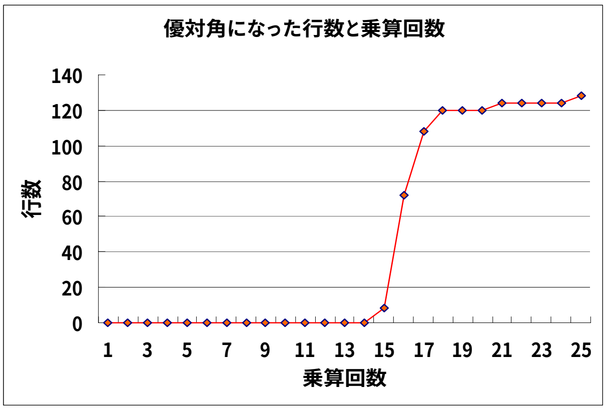

図3：乗算回数と優対角度との関係

6. Gauss-Seidel 法の加速

Gauss-Seidel 法を加速する方法としては SOR 法が一般的であるが SOR は加速係数を適切に決定することが困難である．近年 Khono, Niki らにより開発されているプレコンディションを用いる Gauss－Seidel 法が有効な解法として考えられる．(1)のかわりに

$$\overline{A}x = PAx = Pb \qquad (3)$$

とし反復法を適用する．P は PA の計算量が $O\left(n^2\right)$ 程度でおさまるよう疎な行列により構成する．例えば

$$P = \begin{pmatrix} 1 & -a_{12} & 0 & \cdots \\ 0 & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & -a_{n-1n} \\ 0 & \cdots & 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad (4)$$

のような行列を用いる．3)よりも有効なプレコンディション行列については文献4-5)を適用することにより Gauss-Seidel 反復法が加速できることが示されている．

7. 結言

本研究では境界要素方程式に対する消去法と反復法を併用した解法を提案した．計算量が少ない処置により離散化により生成された係数行列を提案するアルゴリズムにより優対角化できることが数値例より明らかとなった．反復法は従来，差分法，有限要素法などの疎行列を生成する離散化を対象に活発に議論されてきた．ここで示した手続きを用いることにより密行列を生成する積分方程式の離散化においても反復法の研究をすることが有用であることが示された．今後は広く境界要素法に適用できる標準的なプログラムの作成を目指し研究を進める．

参考文献

(1) L.V. Foster; Gaussian elimination with partial pivoting can fail in practice, SIAM J. Matrix Anal. Appl. ,15(1994)1354-1362.

(2) A.Frommer,D.B.Szyld: H-splitting and two-stage iterative method, Numer. Math.,63(1992)345-356.

(3) A.D.Gunawardena, S.K.Jain, L.Snyder: Modified iterative methods for consistent linear systems,LAA,154-156(1991)123-143.

(4) T.Khono, H.Kotakemori, H.Niki: Improving the modified Gauss-Seidel methd for Z-matrices, LAA, 267(1997)113-123.

(5) H.Kotakemori, K.Harada, M.Morimoto, H.Niki: A comparison theorems for the iterative method with preconditioner $(I + S_{\max})$, J. Comp. Appl. Math.145(2002) 373-378.

(6) M. Sakakihara: Iterative estimation of Perron root and generalized diagonal dominance, INFORMATION, 2(1999)71-75.

(7) R.S. Varga; Matrix Iterative Analysis, Springer Series in Comp. Math., Springer (1999).