付 録 B

前処理の効果に対するスペクトル特性からの評価

第 5.5 **節**の数値実験で確認された特徴ある収束の振舞いについて，その原因を調べた．ここでは，**「第** 5.5.1 **対称問題に対する前処理の効果」**の例題から得られる対称正定値な係数行列を例として取り上げ，前処理を施したときの係数行列 $L^{-1}AL^{-T}$ のスペクトル特性 (条件数，固有値分布) を調べ，それらから得られた結果により評価を行った．

B.1 係数行列の条件数による評価

定理: B.1 ([19][32][34]) 係数行列 $A \in \boldsymbol{R}^{N\times N}$ は対称正定値であり，$\boldsymbol{b} \in \boldsymbol{R}^N$ であるとする．CG 法により第 k 番目の反復で得られる解ベクトルを $\boldsymbol{x}_k$ とするとき，

$$\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_k\|_A \leq 2\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_0\|_A \left(\frac{\sqrt{\kappa}-1}{\sqrt{\kappa}+1}\right)^k \tag{B.1}$$

である．この κ が，A の “条件数” であり，

$$\begin{aligned}\kappa &= \kappa_2(A) \\ &= \|A\|_2/\|A^{-1}\|_2 \\ &= |\lambda_{max}|/|\lambda_{min}| \end{aligned} \tag{B.2}$$

で表される．ここで，

$$\begin{aligned}\lambda_{max}: &\quad A \text{ の最大固有値,} \\ \lambda_{min}: &\quad A \text{ の最小固有値}\end{aligned}$$

であり，$\boldsymbol{x} = A^{-1}\boldsymbol{b}$ である．　■

表 B.1: 前処理後の条件数.

Grid Size	ASIS	block IC	SC
17×16	232.92	117.40	116.46
33×32	881.39	443.14	440.70

ASIS : 前処理無しの A

一般に，条件数が小さいと，CG 法は速く収束する．各前処理を施した係数行列の条件数は表 B.1 のとおりであった．

前処理の効果そのものは確認できるが，ブロック不完全コレスキー (block IC) 分解に基づく前処理と SC[1] とで条件数に大差は見られなかった．

B.2　係数行列の固有値分布による評価

対称正定値な系に対して，CG 法の収束の速さは前処理された係数行列 A の固有値分布と関係がある [4][34].

第 k 番目の反復における CG 法 (**アルゴリズム** 2.5，[23]) の残差ベクトル $\boldsymbol{r}_k$ と探索方向ベクトル $\boldsymbol{p}_k$ はそれぞれ，次式で表される．

$$\boldsymbol{r}_{k+1} = \boldsymbol{r}_k - \alpha_k A\boldsymbol{p}_k, \tag{B.3}$$

$$\boldsymbol{p}_{k+1} = \boldsymbol{r}_{k+1} + \beta_k\boldsymbol{p}_k. \tag{B.4}$$

ただし，初期値を $\boldsymbol{x}_0$ としたとき，

$$\begin{aligned}\boldsymbol{r}_0 &= \boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_0,\\ \boldsymbol{p}_0 &= \boldsymbol{r}_0\end{aligned}$$

である．式 (B.3) と (B.4) から残差ベクトルは,

$$\begin{aligned}\boldsymbol{r}_k &= \boldsymbol{r}_0 + \sum_{l=1}^{k} a_l^{(k)} A^l \boldsymbol{r}_0\\ &\equiv R_k(A)\boldsymbol{r}_0\end{aligned} \tag{B.5}$$

と表される．ここで，$R_k(A)$ は A に関する k 次多項式で残差多項式と呼ばれる．すなわち，残差ベクトル $\boldsymbol{r}_k$ は残差多項式と初期残差ベクトル $\boldsymbol{r}_0$ の積で表される．

[1] SC 前処理そのものを施すことは不可能なので，代数的に同値なブロック完全コレスキー分解による前処理を施した．

また，CG 法の導出では，A が対称正定値のとき，線形方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ の解が，汎関数

$$f(\boldsymbol{x}) \;=\; \frac{1}{2}(\boldsymbol{x}, A\boldsymbol{x}) - (\boldsymbol{x}, \boldsymbol{b}) \tag{B.6}$$

を最小にすることを利用することもできる [41]．この関数 (B.6) を残差 $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}$ を用いて表現し直すと，

$$f(\boldsymbol{x}) \;=\; \frac{1}{2}(\boldsymbol{r}, A^{-1}\boldsymbol{r}) - \frac{1}{2}(\boldsymbol{b}, A^{-1}\boldsymbol{b})$$

であるから，

$$\begin{aligned} f(\boldsymbol{x}_k) &= \frac{1}{2}(\boldsymbol{r}_k, A^{-1}\boldsymbol{r}_k) - \frac{1}{2}(\boldsymbol{b}, A^{-1}\boldsymbol{b}) \\ &= \frac{1}{2}(R_k(A)\boldsymbol{r}_0, A^{-1}R_k(A)\boldsymbol{r}_0) - \frac{1}{2}(\boldsymbol{b}, A^{-1}\boldsymbol{b}) \\ &= \frac{1}{2}(\boldsymbol{r}_0, A^{-1}R_k(A)^2\boldsymbol{r}_0) - \frac{1}{2}(\boldsymbol{b}, A^{-1}\boldsymbol{b}) \end{aligned}$$

となる．ここで，係数行列 A (行列のサイズは $N \times N$) の固有値を λ_i，それに属する固有ベクトルを $\boldsymbol{v}_i$ として，$\boldsymbol{r}_0$ を $\boldsymbol{v}_i$ で展開して，

$$\boldsymbol{r}_0 \;=\; \sum_{i=1}^{N} c_i \boldsymbol{v}_i \tag{B.7}$$

とすると，式 (B.5) は，

$$\begin{aligned} \boldsymbol{r}_k &= R_k(A)\boldsymbol{r}_0 \\ &= \sum_{i=1}^{N} c_i R_k(\lambda_i)\boldsymbol{v}_i \end{aligned} \tag{B.8}$$

となる．もし，$\lambda_p, \lambda_{p+1}, \cdots, \lambda_{p+q}$ が重複していると，

$$R_k(\lambda_p) = R_k(\lambda_{p+1}) = \cdots = R_k(\lambda_{p+q}) \tag{B.9}$$

であり，$\boldsymbol{r}_k$ に含まれる $\boldsymbol{v}_p, \boldsymbol{v}_{p+1}, \cdots, \boldsymbol{v}_{p+q}$ の成分比

$$c_p R_k(\lambda_p) : c_{p+1} R_k(\lambda_{p+1}) : \cdots : c_{p+q} R_k(\lambda_{p+q})$$

が，式 (B.5) の $\boldsymbol{r}_0$ における成分比 $c_p : c_{p+1} : \cdots : c_{p+q}$ に等しいので，$\boldsymbol{r}_k$ の動きうる空間の次元が $N - q$ となる．したがって，高々 $N - q$ 回の反復で収束する．一般に重複固有値があり，異なる固有値の数が s 個のときには高々 s 回の反復で収束する．この効果は固有値の密集 (clustering) によっても近似的に成り立ち，多くの場合，前処理の効果として，密集固有値による収束性向上が期待される [32][41]．この観点から，前処理後の係数行列の固有値分布をプロットしたのが，図 B.1，B.2 である．縦軸は log スケールの固有値であり，横軸は固有値に対する昇順の番号である．

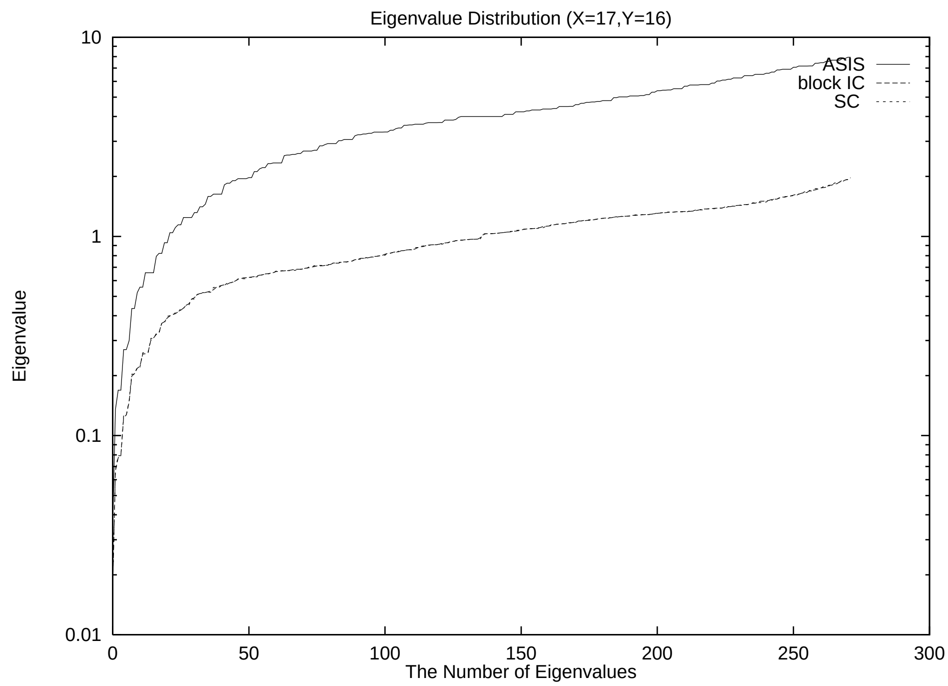

図 B.1: 固有値の分布 (17×16).

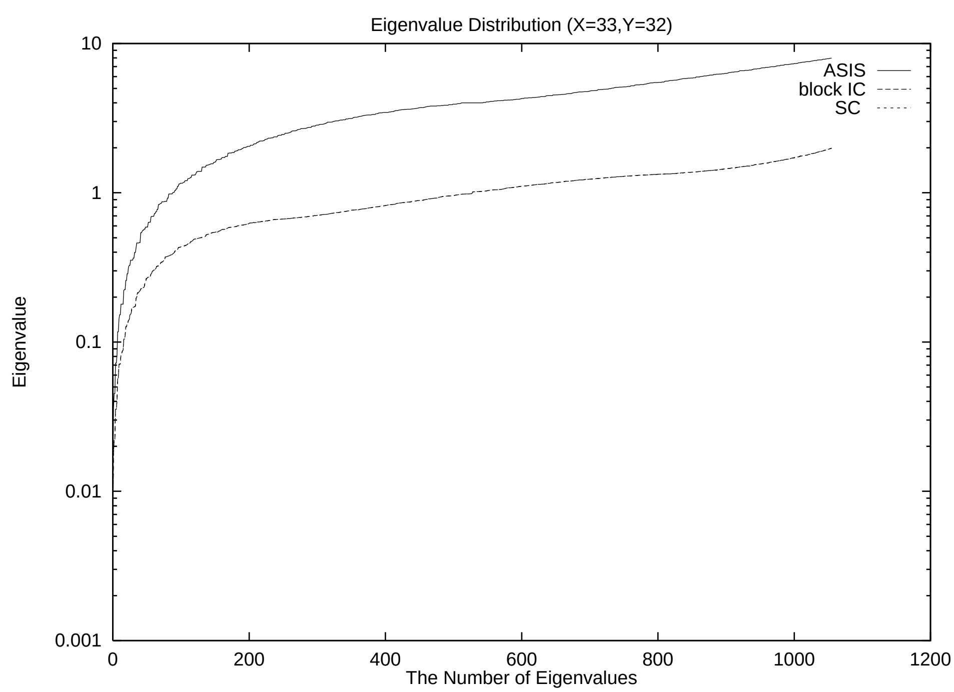

図 B.2: 固有値の分布 (33×32).

これらのグラフからも，前処理による固有値の密集が確認されるが，SC とブロック IC 分解を用いた前処理を施した行列の固有値の密集は，ほとんど同じであることが確認できる．

B.3　係数行列の重複固有値による評価

条件数と固有値の密集のデータからは，前処理の違いによる収束の振舞いの特徴を説明付けるような違いは確認できなかった．本節では，前処理した係数行列の固有値の重複 (縮退，degeneracy) に着目した．重複度を表すグラフが，図 B.3∼B.6 である．これらのグラフの縦軸は重複度を表し，横軸は固有値を表す．固有値は，縦の実線で表され．縦軸の “1” にプロットされたデータは，単一固有値を意味し，縦軸の “2” にプロットされたデータは，二重重複固有値を意味する．特に，二重重複固有値の 1 本の縦線に対しては，固有値 2 つが重複していることを表している．前処理された係数行列の固有値は，SC による場合もブロック IC 分解による場合も $0.0 \sim 2.0$ の間に存在する．また，これらのデータを一覧表にしたものが，表 B.2 である．

表 B.2: 重複固有値の数.

	block IC		SC	
grid size	単一	二重重複	単一	二重重複
17×16	272	0	16	128
33×32	1056	0	32	512

これらから，ブロック IC 分解の方は全て単一固有値であり，SC の方はほとんどが二重に重複していることが分かる．

図 B.3: 固有値の重複度 $(17 \times 16$ block IC).

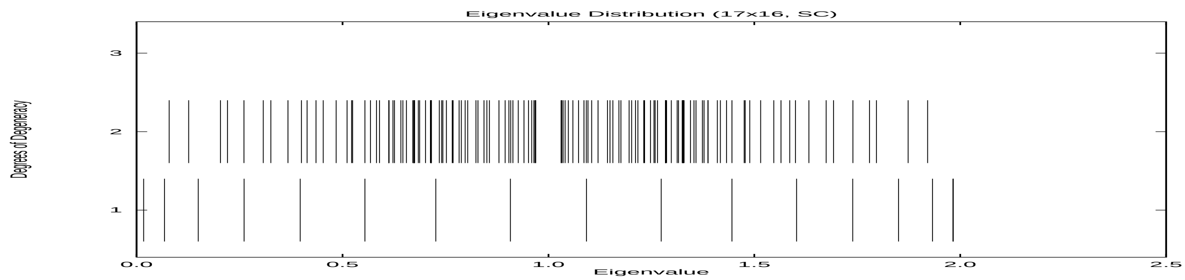

図 B.4: 固有値の重複度 $(17 \times 16$ SC).

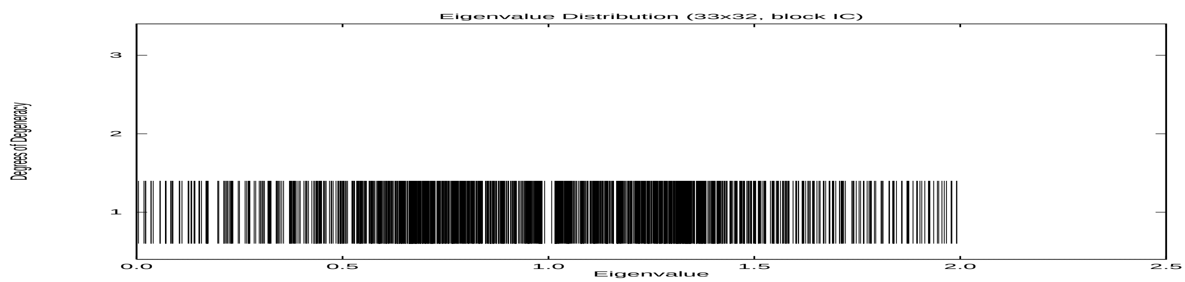

図 B.5: 固有値の重複度 $(33 \times 32$ block IC).

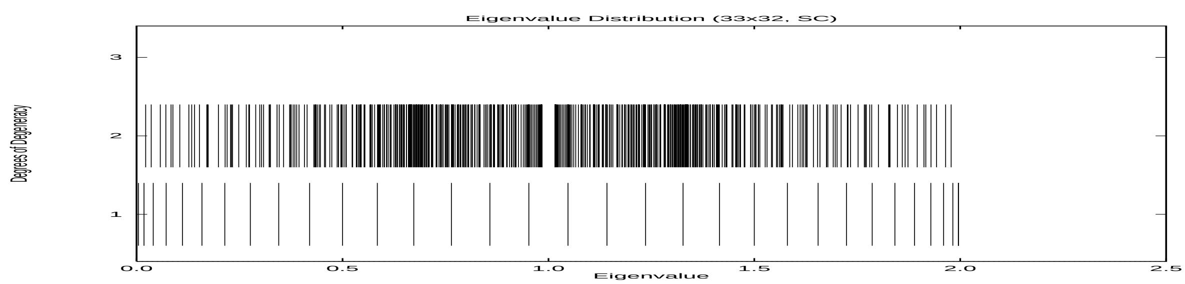

図 B.6: 固有値の重複度 $(33 \times 32$ SC).

B.4　まとめ

以上の結果をまとめると，ブロック IC 分解と SC 前処理をほどこした係数行列について，条件数はほぼ同じであり，固有値の密集に顕著な違いは見られない．一方，これら前処理をほどこした係数行列の固有値の重複度が異なり，ブロック IC による係数行列は全てが単一固有値であり，SC の方はほとんどが二重重複固有値である．

これらの内容と，**第** 5 **章**の**第** 5.5 **節**における数値実験の収束の振舞いのグラフと比較すると，次のように推測できる．

- 条件数と固有値の密集がほぼ同じであることは，収束グラフの前半で，ブロック ICCG と SCCG の収束の振舞いがほぼ同じという結果と関連している．
- 固有値の重複の違いにより，収束グラフの後半で，ブロック ICCG と SCCG の収束の振舞いが大きく異なる．