伸長座標変換における差分法行列の条件数と解の誤差

5D−3

平津　忍[†], 坪井　一洋[††], 石黒　美佐子[††]
[†] 茨城大学大学院理工学研究科, [††] 茨城大学工学部

1. はじめに

物理量が急激に変化する現象において，2 次元ラプラス方程式に対し“伸長座標変換[1]”という座標変換を適用して格子を集中させる．得られる連立方程式の係数行列に対して，数値誤差による行列の性質の悪さを示す尺度となる条件数を Hager の方法[2]を用いて計算し，伸長座標変換における座標変換パラメータが条件数に与える影響を考察する．また，ラプラス方程式の解析解と Bi-CGSTAB 法の近似解との誤差から，解の精度，反復回数共に最適であると思われる格子の配置法についての指針を求める．

2. 伸長座標変換

伸長座標変換は，物理空間座標 x と計算空間座標 ξ 間の関係で表される次式のような座標変換である．

$$x = x(\xi) = \frac{a^{\xi} - 1}{a^{N} - 1}, \quad x \in [0,1], \ \xi \in [0, N]. \qquad (1)$$

この変換において，ξ 座標系で整数値をもつ座標 ξ_i ($i = 0,1,\cdots,N$) を離散化時の格子点に対応させる．上式における a が変換パラメータ((2)式)であり，この値が大きい程，物理空間座標の原点での格子集中が強くなる(Fig. 1)．y 方向においても同様に座標を変換する．

$$a_x = e^{\alpha}, \quad a_y = e^{\beta}. \qquad (2)$$

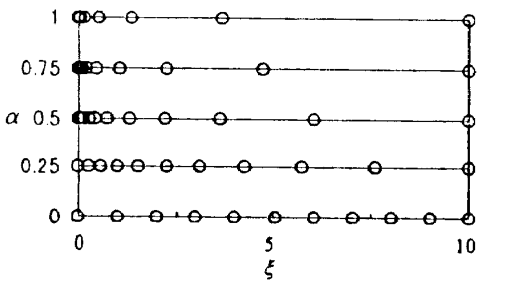


Fig. 1 伸長座標変換による格子配置(N=10)

Condition Number of Finite Difference Matrix in Stretching Coordinate Transformation and Its Numerical Error
Shinobu HIRATSU, Kazuhiro TSUBOI, and Misako ISHIGURO
Ibaraki University

3. テスト問題

解が急激に変化する問題を精度良く解く指針を求めることに重点をおくため，真の解がわかっている問題

$$\phi(x, y) = \ln\{(x - p)^2 + (y - p)^2\}/2, \quad p = 1/\sqrt{2e^4}, \qquad (3)$$

に対し，2 次元ラプラス方程式を解くことを数値実験の対象とする．

ラプラス方程式を中心差分すると次式となる．

$$\frac{a_x \phi_{i-1,j} + \phi_{i+1,j} - (1 + a_x)\phi_{i,j}}{x_1^2 a_x^{2i-1}(1 + a_x)} + \frac{a_y \phi_{i,j-1} + \phi_{i,j+1} - (1 + a_y)\phi_{i,j}}{y_1^2 a_y^{2j-1}(1 + a_y)} = 0 \qquad (4)$$

4. 条件数

$\|\mathbf{A}\|\|\mathbf{A}^{-1}\|$ は条件数 ($= \mathrm{cond}(\mathbf{A})$) と呼ばれるもので，数値誤差に対する行列の性質の悪さを示す尺度として知られている．ここではノルムとして，1 乗ノルム $\|\ \|_1$ を用いて条件数の計算を行う．

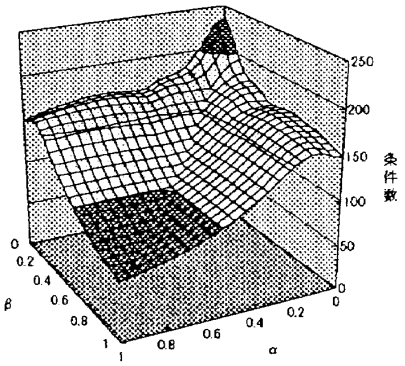
$$\|\mathbf{A}\|_1 = \max_{0 \le k \le n} \sum_{i=1}^{n} |a_{ik}| \ . \qquad (5)$$

$\|\mathbf{A}^{-1}\|_1$ を計算するためには $\mathbf{A}^{-1}$ が必要となるが，非対称大次元行列では計算が難しいので，$\|\mathbf{A}^{-1}\|_1$ を近似的に求める Hager の方法[2]を導入し，条件数を計算する．非対称行列に対してノルムの定義から計算した条件数と Hager の方法から得た条件数と比較した結果，よい一致が得られた．

5. 伸長座標変換後の係数行列の条件数

行列の次数が 361 ($N = 20$) のとき，まず，係数行列に正規化を施したときの条件数を計算する (Fig. 2)．正規化後の行列 $\overline{\mathbf{A}}$ の条件数は格子が集中するにつれて減少し，$\alpha = \beta$ のときはそれが顕著になる．一般に，格子集中が強くなると Bi-CGSTAB 法の反復回数が増加する，つまり条件数が増大すると考えられていたが，この推測とは逆の結果が得られた．この理由は正規化による効果が大きく現れているためである．また，片方に

のみ格子を集中させた場合(Fig.3)では条件数は大きくなる.



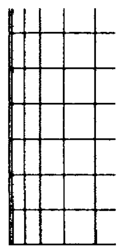
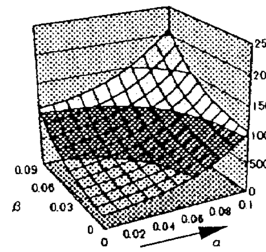


Fig.2 係数行列の条件数(正規化, N=20)　Fig.3 格子集中(一方向)

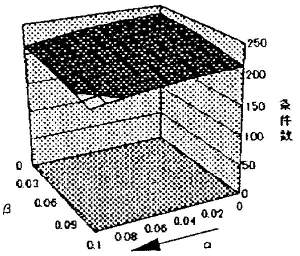
正規化によって起こる条件数の減少効果を確認するため, Hager の方法が適用可能な範囲で, 正規化をしない行列 **A** の条件数を計算した. その結果, 格子を集中させるにつれて条件数が増加した. そこで, **A** での対角成分の最大値, 最小値をそれぞれ d_{max}, d_{min} として **A** の条件数 $\mathrm{cond}(\mathbf{A})$ (Fig. 3(a))と, $\overline{\mathbf{A}}$ の条件数 $\mathrm{cond}(\overline{\mathbf{A}})$ (Fig. 3(b))との関係を表した式[3]

$$\mathrm{cond}(\overline{\mathbf{A}}) \geq \mathrm{cond}(\mathbf{A})|d_{min}/d_{max}|, \qquad (6)$$

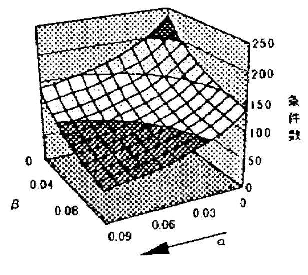
に基づいて $\mathrm{cond}(\mathbf{A})|d_{min}/d_{max}|$ を計算した(Fig. 3(c)). (b)と(c)を比較すると, 両者は (6)式の関係を満たしていることが確認された.



(a) $\mathrm{cond}(\mathbf{A})$



(b) $\mathrm{cond}(\overline{\mathbf{A}})$



(c) $\mathrm{cond}(\mathbf{A})|d_{min}/d_{max}|$

Fig. 3 条件数の比較 (N=20, $\alpha,\beta \in [0,0.1]$)

6. Bi-CGSTAB 法の誤差と条件数

格子集中によって得られる行列を係数行列とする連立方程式の解の精度を確認するため, 2 次元ラプラス方程式の解析解と, Bi-CGSTAB 法で解いたときの近似解との誤差を比較する. まず, 両者の絶対誤差のノルムを計算し, その計算結果を Fig. 4 に示す. この図から, $\alpha=\beta=0.16$ のときに誤差ノルムが最小になることが分かった.

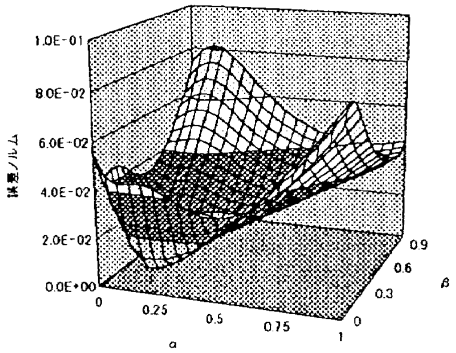


Fig. 4 誤差ノルム (N=20)

6. まとめ

伸長座標変換によって得られた係数行列は, 格子集中を強めると, 正規化による条件数の大幅な減少が見られた. つまり, 正規化によって Bi-CGSTAB 法の反復回数の減少が期待できる. 従って, 格子集中における係数行列の正規化は必須である.

解析解と近似解との絶対誤差をノルムで表し, 座標変換パラメータとの関係を調べた. x, y 方向とも同じ格子数であれば $\alpha=\beta$ のときに全体的な解の誤差が最小となり, 最小点が存在することが確認できた.

参考文献

[1] 坪井一洋：一般座標系における三重対角行列の条件数, 日本物理学会 53 回年会, 1998.

[2] 松尾, 杉原, 森：行列の条件数の推定方法の数値的評価, 応用数理学会論文誌, Vol.7,No.2, 1997.

[3] 石黒, 陽遊, 平津：正規化と前処理による行列の条件数と CG 法系解法の収束状況, 97-HPC-69, 1997.