

JAERI-Research  
95-050



Multi-Grid Methodによる固有値問題と  
特異方程式の数値解法  
— 常微分方程式への適用 —

1995年7月

神吉隆司\*・徳田伸二・宇山忠男\*

日本原子力研究所  
Japan Atomic Energy Research Institute

本レポートは、日本原子力研究所が不定期に公刊している研究報告書です。

入手の問合せは、日本原子力研究所技術情報部情報資料課（〒319-11 茨城県那珂郡東海村）あて、お申し越しください。なお、このほかに財団法人原子力弘済会資料センター（〒319-11 茨城県那珂郡東海村日本原子力研究所内）で複写による実費頒布をおこなっております。

This report is issued irregularly.

Inquiries about availability of the reports should be addressed to Information Division, Department of Technical Information, Japan Atomic Energy Research Institute, Tokaimura, Naka-gun, Ibaraki-ken 319-11, Japan.

© Japan Atomic Energy Research Institute, 1995

編集兼発行 日本原子力研究所  
印 刷 いばらき印刷株

Multi-Grid Methodによる固有値問題と特異方程式の数値解法  
－常微分方程式への適用－

日本原子力研究所那珂研究所炉心プラズマ研究部  
神吉 隆司\*・徳田 伸二・宇山 忠男\*

(1995年6月12日受理)

抵抗性MHD安定性解析で不可欠な接続データを求める数値計算法では、固有値問題とそれに伴う特異方程式を解く必要がある。このため、固有値問題と特異方程式を反復的に解く数値解法を開発した。固有値問題は等価な非線形方程式に置き換えられ、この方程式に対してNewton法を適用すると特異方程式が導かれる。この方法では、高速の反復解法であるMulti-Grid Method(MGM)が適用できる。モデル方程式を用いて、この方法で得られる固有値及び固有ベクトルの収束性とC P U時間について調べた。数値計算結果から、この方法が固有値問題と特異方程式を数値的に安定かつ高精度に求めることができる有効な方法であることを確認した。また、MGMの改良によって、直接法で解くよりもC P U時間が約50分の1短い高速解法を開発した。

Numerical Method for the Eigenvalue Problem and the Singular Equation  
by Using the Multi-Grid Method  
and Application to Ordinary Differential Equation

Takashi KANKI\*, Shinji TOKUDA and Tadao UYAMA\*

Department of Fusion Plasma Research  
Naka Fusion Research Establishment  
Japan Atomic Energy Research Institute  
Naka-machi, Naka-gun, Ibaraki-ken

(Received June 12, 1995)

In the numerical method to compute the matching data which are necessary for resistive MHD stability analyses, it is required to solve the eigenvalue problem and the associated singular equation. An iterative method is developed to solve the eigenvalue problem and the singular equation. In this method, the eigenvalue problem is replaced with an equivalent nonlinear equation and a singular equation is derived from Newton's method for the nonlinear equation. The multi-grid method (MGM), a high speed iterative method, can be applied to this method. The convergence of the eigenvalue and the eigenvector, and the CPU time in this method are investigated for a model equation. It is confirmed from the numerical results that this method is effective for solving the eigenvalue problem and the singular equation with numerical stability and high accuracy. It is shown by improving the MGM that the CPU time for this method is 50 times shorter than that of the direct method.

Keywords: Eigenvalue Problem, Singular Equation, Matching Data, Resistive MHD Stability Analyses, Nonlinear Equation, Newton's Method, Multi-Grid Method

---

\* Himeji Institute of Technology

## 目 次

1. 序 論 .....	1
2. 固有値問題の非線形方程式による定式化 .....	1
3. Multi-Grid Method .....	4
3. 1 問題設定 .....	5
3. 2 平滑化ステップ .....	6
3. 3 Coarse-grid correction .....	6
3. 4 MGM .....	7
3. 5 MGMの簡単な例 .....	8
4. 特異方程式に対するMGMの適用 .....	9
5. モデル方程式と数値解法 .....	11
6. 数値計算結果 .....	14
7. 結 論 .....	15
謝 辞 .....	15
参考文献 .....	16
付 錄 固有値問題に伴う特異方程式の解法 .....	29

## Contents

1. Introduction .....	1
2. Formulation of the Eigenvalue Problem as a Nonlinear Equation .....	1
3. Multi-Grid Method .....	4
3. 1 Formulation of the Problem .....	5
3. 2 Smoothing Step .....	6
3. 3 Coarse-grid Correction .....	6
3. 4 MGM .....	7
3. 5 Simple Example of the MGM .....	8
4. Application of the MGM to the Singular Equation .....	9
5. Model Equation and Numerical Method .....	11
6. Numerical Results .....	14
7. Conclusions .....	15
Acknowledgements .....	15
References .....	16
Appendix Solution Method of the Singular Equation Associated with the Eigenvalue Problem .....	29

## 1 序論

トカマク・プラズマの抵抗性 MHD 安定性を解析する方法として漸近接続法がある。この方法では、プラズマが有理面近傍（内部層）とその外側の領域（外部領域）に分けられる。外部領域では、プラズマの電気抵抗などの非理想 MHD 効果が無視できる理想 MHD 近似が成立し、この領域のプラズマの運動は有理面で確定特異点をもつ Newcomb 方程式で記述される。この方程式の解（外部解）は小さい解と大きい解の線形結合で表され、その混合比は接続データと呼ばれている [1]。抵抗性 MHD 安定性を解析する上で、この接続データを高精度で求めることが必要である。

我々は Newcomb 方程式に対する固有値問題とそれに伴う特異方程式を解くことによって接続データを計算する数値計算法を考案した [2]。この方法では、この固有値問題とそれに伴う特異方程式を精度よく解くことができれば、プラズマが臨界安定に近い場合を含んで接続データを数値的に安定でかつ高精度に求めることができる。また、固有値問題及び特異方程式は変分原理を導入して有限要素法で解かれる。

接続データを計算する数値計算法では、固有値問題の解法として固有値シフトを併用する逆ベキ法 [3] を用いている。この方法では、固有値の近似値が真の固有値に近くなると、解くべき 1 次方程式が特異に近くなる。そのため、1 次方程式を反復解法で数値的に安定に解くことが期待できないので、直接法で解いている。また、特異方程式も行列の LU 分解を用いて直接法で解く。このため、特異方程式の行列は疎であるが、密行列として取り扱わなければならない。したがって、特異方程式を解くのに非常に時間がかかる。

上で述べた接続データを計算する数値計算法におけるこの困難を解消するため、固有値問題と特異方程式を数値的に安定でかつ高精度で反復的に解く数値解法を開発し、その有効性を調べる。固有値問題は等価な非線形方程式に置き換えられ、この方程式に対して Newton 法を適用すると特異方程式が導かれる [4]。この方法では、高速の反復解法である MGM(Multi-Grid Method)[4-5] が適用できる。また、この方法の有効性を調べるため、解析的な固有値及び固有ベクトルが前もって分かっているモデル方程式にこの方法を適用する。

第 2 節では固有値問題の非線形方程式による定式化について述べる。第 3 節では、MGM について 1 次元のモデル方程式の境界値問題を例に取り挙げて説明を行う。第 4 節では、代数的な制約条件をもつ特異方程式に対して MGM を適用することについて述べる。第 5 節でモデル方程式と具体的な数値解法について述べ、第 6 節で数値計算結果を与え、結論を第 7 節で述べる。

## 2 固有値問題の非線形方程式による定式化

接続データは、Newcomb 方程式に対する固有値問題とそれに伴う特異方程式を解くことによって求めることができる。この方法では、 $k \times k$  行列  $A$  がエルミート

## 1 序論

トカマク・プラズマの抵抗性 MHD 安定性を解析する方法として漸近接続法がある。この方法では、プラズマが有理面近傍（内部層）とその外側の領域（外部領域）に分けられる。外部領域では、プラズマの電気抵抗などの非理想 MHD 効果が無視できる理想 MHD 近似が成立し、この領域のプラズマの運動は有理面で確定特異点をもつ Newcomb 方程式で記述される。この方程式の解（外部解）は小さい解と大きい解の線形結合で表され、その混合比は接続データと呼ばれている [1]。抵抗性 MHD 安定性を解析する上で、この接続データを高精度で求めることが必要である。

我々は Newcomb 方程式に対する固有値問題とそれに伴う特異方程式を解くことによって接続データを計算する数値計算法を考案した [2]。この方法では、この固有値問題とそれに伴う特異方程式を精度よく解くことができれば、プラズマが臨界安定に近い場合を含んで接続データを数値的に安定でかつ高精度に求めることができる。また、固有値問題及び特異方程式は変分原理を導入して有限要素法で解かれる。

接続データを計算する数値計算法では、固有値問題の解法として固有値シフトを併用する逆ベキ法 [3] を用いている。この方法では、固有値の近似値が真の固有値に近くなると、解くべき 1 次方程式が特異に近くなる。そのため、1 次方程式を反復解法で数値的に安定に解くことが期待できないので、直接法で解いている。また、特異方程式も行列の LU 分解を用いて直接法で解く。このため、特異方程式の行列は疎であるが、密行列として取り扱わなければならない。したがって、特異方程式を解くのに非常に時間がかかる。

上で述べた接続データを計算する数値計算法におけるこの困難を解消するため、固有値問題と特異方程式を数値的に安定でかつ高精度で反復的に解く数値解法を開発し、その有効性を調べる。固有値問題は等価な非線形方程式に置き換えられ、この方程式に対して Newton 法を適用すると特異方程式が導かれる [4]。この方法では、高速の反復解法である MGM(Multi-Grid Method)[4-5] が適用できる。また、この方法の有効性を調べるため、解析的な固有値及び固有ベクトルが前もって分かっているモデル方程式にこの方法を適用する。

第 2 節では固有値問題の非線形方程式による定式化について述べる。第 3 節では、MGM について 1 次元のモデル方程式の境界値問題を例に取り挙げて説明を行う。第 4 節では、代数的な制約条件をもつ特異方程式に対して MGM を適用することについて述べる。第 5 節でモデル方程式と具体的な数値解法について述べ、第 6 節で数値計算結果を与え、結論を第 7 節で述べる。

## 2 固有値問題の非線形方程式による定式化

接続データは、Newcomb 方程式に対する固有値問題とそれに伴う特異方程式を解くことによって求めることができる。この方法では、 $k \times k$  行列  $A$  がエルミート

## 行列である固有値問題

$$A\vec{x} = \lambda\vec{x} \quad (1)$$

及びそれに伴う特異方程式:

$$\begin{cases} (A - \lambda I)\vec{x} = \vec{b}, \\ (\vec{x}, \vec{x}_0) = 0 \end{cases} \quad (2)$$

を解いて接続データを求める。ここで、 $\vec{b}$ は既知ベクトルであり、 $\vec{x}_0$ は式(1)における固有値問題の固有値 $\lambda$ に対応する固有ベクトルである。また、特異方程式(2)に対する可解条件は $(\vec{b}, \vec{x}_0) = 0$ である。

式(1)における固有値と固有ベクトルを求める方法として固有値シフトを併用する逆ベキ法が知られている。この方法では1次方程式:

$$(A - \mu I)\vec{x}^{(n+1)} = \vec{c}^{(n)}, \quad (3)$$

$$\vec{c}^{(n+1)} = \frac{\vec{x}^{(n+1)}}{(\vec{x}^{(n+1)}, \vec{x}^{(n+1)})}, \quad (4)$$

$$\lambda^{(n)} = \frac{(\vec{x}^{(n)}, A\vec{x}^{(n)})}{(\vec{x}^{(n)}, \vec{x}^{(n)})} \quad (5)$$

を $\vec{x}^{(n+1)}$ について解いて逐次反復を繰り返す。ここで、 $\mu$ は行列 $A$ の固有値の近似値である。この方法では、 $\lambda^{(n)}$ が $\mu$ に最も近い固有値 $\lambda_m$ に収束し、 $\vec{x}^{(n)}$ が対応する固有ベクトル $\vec{x}_m$ に収束する。しかし、 $\mu$ が $\lambda_m$ に近くなると、1次方程式(3)が特異に近くなる。そのため、方程式(3)を反復解法で数値的に安定に解くことが期待できないので、直接法で解くのが一般的である。一方、特異方程式(2)も一般的には直接法で解かれているが、 $A$ が疎行列であっても密行列として扱っている(付録参照)ため、方程式(2)を解くのに非常に時間がかかる。

この困難を解消するため、固有値問題と特異方程式を数値的に安定かつ高精度で反復的に解く数値解法について考える。式(1)における固有値問題はベクトル $\vec{x}$ とスカラー $\lambda$ を未知数とする非線形方程式:

$$\begin{cases} A\vec{x} - \lambda\vec{x} = 0, \\ (\vec{w}, \vec{x}) - 1 = 0 \end{cases} \quad (6)$$

に置き換えることができる。ここで、 $\vec{w}$ は $A - \lambda I$ の零空間 $\mathcal{N}(N = \{x | (A - \lambda I)\vec{x} = 0\})$ に垂直でない既知ベクトルで、 $\|\vec{w}\|^2 = 1$ とする。方程式(6)では $\lambda, \vec{x}$ がともに未知数であるため、方程式(6)は非線形な連立方程式である。この非線形方程式(6)をNewton法で解く。 $(\vec{x}^{(n)}, \lambda^{(n)})$ を推測解として、次のステップの解 $(\vec{x}^{(n+1)}, \lambda^{(n+1)})$ を

$$\vec{x}^{(n+1)} = \vec{x}^{(n)} + \delta\vec{x}, \quad (7)$$

$$\lambda^{(n+1)} = \lambda^{(n)} + \delta\lambda \quad (8)$$

とおく。式(7)-(8)を非線形方程式(6)に代入して、未知数 $\vec{x}^{(n+1)}$ と $\delta\lambda$ について線形化すると1次方程式:

$$\begin{cases} (A - \lambda^{(n)} I) \vec{x}^{(n+1)} - \vec{x}^{(n)} \delta\lambda = 0, \\ (\vec{w}, \vec{x}^{(n+1)}) = 1 \end{cases} \quad (9)$$

を得る。方程式(9)を逐次的に解くと $\lambda^{(n+1)}$ は固有値 $\lambda_1$ に、ベクトル $\vec{x}^{(n+1)}$ は固有ベクトル $\vec{e}_1$ に収束することを以下に示す。但し、 $\lambda_1$ は初期値 $\lambda^{(0)}$ に最も近い固有値であるとする。先ず、式(7)-(8)と規格化条件 $(\vec{w}, \vec{x}^{(n)}) = 1$ を用いて、方程式(9)を $\delta\vec{x}$ ,  $\delta\lambda$ に対する1次方程式:

$$(A - \lambda^{(n)} I) \delta\vec{x} - \vec{x}^{(n)} \delta\lambda = -(A - \lambda^{(n)} I) \vec{x}^{(n)}, \quad (10a)$$

$$(\vec{w}, \delta\vec{x}) = 0 \quad (10b)$$

に変形する。次に行列 $A$ の固有値と固有ベクトルの組を $(\lambda_j, \vec{e}_j)$ とし、 $\vec{x}^{(n)}$ ,  $\delta\vec{x}$ を

$$\vec{x}^{(n)} = \sum_{j=1}^k \alpha_j^{(n)} \vec{e}_j, \quad \delta\vec{x} = \sum_{j=1}^k \beta_j \vec{e}_j \quad (11)$$

で展開する( $\alpha_j^{(n)}$ は既知数、 $\beta_j$ は未知数である)。既知ベクトル $\vec{w}$ は仮定から

$$\vec{w} = c\vec{e}_1 + \vec{v}, \quad (\vec{e}_1, \vec{v}) = 0, \quad c \neq 0 \quad (12)$$

で表せる。 $\vec{w}$ が固有ベクトル $\vec{e}_1$ に近い場合は $\vec{v}$ は小さい。式(11)を式(10a)に代入すると

$$\beta_j = -\alpha_j^{(n)} + \frac{\delta\lambda}{\lambda_j - \lambda^{(n)}} \alpha_j^{(n)}, \quad j = 1, 2, \dots, k \quad (13)$$

を得、次のステップの $\alpha_j^{(n+1)}$ は

$$\alpha_j^{(n+1)} = \frac{\delta\lambda}{\lambda_j - \lambda^{(n)}} \alpha_j^{(n)}, \quad j = 1, 2, \dots, k \quad (14)$$

となる。また、未知数 $\delta\lambda$ は次のように決めることができる。規格化条件より

$$c\alpha_1^{(n)} + \sum_{j \neq 1} \alpha_j^{(n)} (\vec{v}, \vec{e}_j) = 1. \quad (15)$$

また、式(10b)より

$$c\beta_1 + \sum_{j \neq 1} \beta_j (\vec{v}, \vec{e}_j) = 0 \quad (16)$$

である。式(15)と式(16)を加え合わせることにより、更新した $\vec{x}^{(n+1)}$ に対する規格化条件

$$c\alpha_1^{(n+1)} + \sum_{j \neq 1} \alpha_j^{(n+1)} (\vec{v}, \vec{e}_j) = 1 \quad (17)$$

を得る。これに式(14)を用いると、 $\delta\lambda$ が

$$\delta\lambda = \frac{\lambda_1 - \lambda^{(n)}}{1 + \Lambda}, \quad (18)$$

$$\Lambda \equiv \sum_{j \neq 1} \frac{\lambda_1 - \lambda_j}{\lambda_j - \lambda^{(n)}} (\vec{v}, \vec{e}_j) \alpha_j^{(n)} \quad (19)$$

で求められる。式(14)と式(18)から  $j \neq 1$  に対して  $\alpha_j^{(n+1)}$  は

$$\alpha_j^{(n+1)} = \left( \frac{\lambda_1 - \lambda^{(n)}}{\lambda_j - \lambda^{(n)}} \right) \frac{\alpha_j^{(n)}}{1 + \Lambda} \quad (20)$$

で表される。初期値  $\lambda^{(0)}$  が  $\lambda_1$  に最も近く選ばれていて  $|(\lambda_1 - \lambda^{(0)})/(\lambda_j - \lambda^{(0)})| < 1$  であれば、 $\alpha_j^{(n)}$ ,  $j \neq 1$  は急速に零に収束することが分かる。このとき式(18)より  $\delta\lambda \rightarrow \lambda_1 - \lambda^{(n)}$  であるから  $\lambda^{(n+1)} = \lambda^{(n)} + \delta\lambda \rightarrow \lambda_1$ 、すなわち、 $\lambda^{(n)}$  は固有値  $\lambda_1$  に、 $\vec{x}^{(n)}$  は固有ベクトル  $\vec{e}_1$  に方向収束し、大きさ  $\alpha_1$  は  $1/c$  に収束する。

この方法では、固有値問題を解くことが特異方程式を解くことに帰着する。 $\lambda^{(n)}$  が固有値  $\lambda_1$  に近くなると、行列  $A - \lambda^{(n)}I$  は特異に近くなるけれども、拡大行列

$$\begin{bmatrix} A - \lambda^{(n)}I & -\vec{x}^{(n)} \\ \vec{w}^t & 0 \end{bmatrix} \quad (21)$$

は常に正則である。このため、逆ベキ法とは異なり、拡大行列を疎行列として扱える反復解法で1次方程式(9)を安定に解くことができる。また、特異方程式(2)は、付録から1次方程式(9)と同じ形式をしているため、この反復解法のアルゴリズムは特異方程式(2)を解くことに適用することができる。したがって、この方法は、固有値問題と特異方程式を数値的に安定に解くことができる。

さらに、ベクトル  $\vec{w}$  が固有ベクトル  $\vec{e}_1$  の近くに選ばれているとすると、式(20)から収束が非常に速い。例えば、 $\vec{w}$  が固有ベクトル  $\vec{e}_1$  と等しければ2回で収束する。また、粗いメッシュで計算された固有ベクトルを使って、細かいメッシュのときの固有ベクトル  $\vec{e}_1$  を近似して、それを  $\vec{w}$  に採用すると収束が速くなることが期待される。我々はこれらの利点を有効に利用できる高速の反復解法として、MGMを採用する。

### 3 Multi-Grid Method

MGM は残差(反復解と厳密解の差)の成分の性質に従って、この残差を取り除く方法が全く異なる2つのステップで構成される。最初のステップでは、空間的に激しく振動している成分、すなわち、高周波数成分を効果的に取り除く通常の反復解法(例えば、damped Jacobi 法)を用いる。次のステップでは、空間的にゆっくり振動している成分、すなわち、低周波数成分を粗いグリッドの方程式を解くことによって取り除く。このステップでは、粗いグリッド上での解を線形補間することに

を得る。これに式(14)を用いると、 $\delta\lambda$ が

$$\delta\lambda = \frac{\lambda_1 - \lambda^{(n)}}{1 + \Lambda}, \quad (18)$$

$$\Lambda \equiv \sum_{j \neq 1} \frac{\lambda_1 - \lambda_j}{\lambda_j - \lambda^{(n)}} (\vec{v}, \vec{e}_j) \alpha_j^{(n)} \quad (19)$$

で求められる。式(14)と式(18)から  $j \neq 1$  に対して  $\alpha_j^{(n+1)}$  は

$$\alpha_j^{(n+1)} = \left( \frac{\lambda_1 - \lambda^{(n)}}{\lambda_j - \lambda^{(n)}} \right) \frac{\alpha_j^{(n)}}{1 + \Lambda} \quad (20)$$

で表される。初期値  $\lambda^{(0)}$  が  $\lambda_1$  に最も近く選ばれていて  $|(\lambda_1 - \lambda^{(0)})/(\lambda_j - \lambda^{(0)})| < 1$  であれば、 $\alpha_j^{(n)}$ ,  $j \neq 1$  は急速に零に収束することが分かる。このとき式(18)より  $\delta\lambda \rightarrow \lambda_1 - \lambda^{(n)}$  であるから  $\lambda^{(n+1)} = \lambda^{(n)} + \delta\lambda \rightarrow \lambda_1$ 、すなわち、 $\lambda^{(n)}$  は固有値  $\lambda_1$  に、 $\vec{x}^{(n)}$  は固有ベクトル  $\vec{e}_1$  に方向収束し、大きさ  $\alpha_1$  は  $1/c$  に収束する。

この方法では、固有値問題を解くことが特異方程式を解くことに帰着する。 $\lambda^{(n)}$  が固有値  $\lambda_1$  に近くなると、行列  $A - \lambda^{(n)}I$  は特異に近くなるけれども、拡大行列

$$\begin{bmatrix} A - \lambda^{(n)}I & -\vec{x}^{(n)} \\ \vec{w}^t & 0 \end{bmatrix} \quad (21)$$

は常に正則である。このため、逆ベキ法とは異なり、拡大行列を疎行列として扱える反復解法で1次方程式(9)を安定に解くことができる。また、特異方程式(2)は、付録から1次方程式(9)と同じ形式をしているため、この反復解法のアルゴリズムは特異方程式(2)を解くことに適用することができる。したがって、この方法は、固有値問題と特異方程式を数値的に安定に解くことができる。

さらに、ベクトル  $\vec{w}$  が固有ベクトル  $\vec{e}_1$  の近くに選ばれているとすると、式(20)から収束が非常に速い。例えば、 $\vec{w}$  が固有ベクトル  $\vec{e}_1$  と等しければ2回で収束する。また、粗いメッシュで計算された固有ベクトルを使って、細かいメッシュのときの固有ベクトル  $\vec{e}_1$  を近似して、それを  $\vec{w}$  に採用すると収束が速くなることが期待される。我々はこれらの利点を有効に利用できる高速の反復解法として、MGMを採用する。

### 3 Multi-Grid Method

MGMは残差(反復解と厳密解の差)の成分の性質に従って、この残差を取り除く方法が全く異なる2つのステップで構成される。最初のステップでは、空間的に激しく振動している成分、すなわち、高周波数成分を効果的に取り除く通常の反復解法(例えば、damped Jacobi法)を用いる。次のステップでは、空間的にゆっくり振動している成分、すなわち、低周波数成分を粗いグリッドの方程式を解くことによって取り除く。このステップでは、粗いグリッド上での解を線形補間することに

よって元のグリッド上での近似解を作る。MGM はこの 2 つのステップを交互に繰り返すことによって、通常の反復解法(例えば、SOR 法)よりも圧倒的に速い収束をもたらす。

### 3.1 問題設定

MGM の説明として、次の常微分方程式

$$\mathcal{L}u(x) = -\frac{d^2u(x)}{dx^2} = f(x), \quad x \in [0, 1] \quad (22)$$

の 1 次元の Dirichlet 境界値問題

$$u(x=0) = u(x=1) = 0 \quad (23)$$

を考える。ここで、 $f(x)$  は既知関数であり、以下  $f(x) = x$  と仮定する。

方程式 (22) の 3 点差分近似から行列表現を導く。領域内部の全グリッド数を  $N$  とすると、メッシュの幅  $h$  は  $h = 1/(N+1)$  である。レベル数  $l$  という量を導入してグリッド数を  $N_l = 2^{1+l} - 1$  で変化させる。このようにして異なった大きさのメッシュの幅を決めることができる。例えば、レベル 0、すなわち、グリッド数が 1 の時、可能な最大のメッシュの幅は  $h_0 = 1/2$  となる。したがって、レベル数  $l$  を用いて一般にメッシュの幅は

$$h_0 > h_1 > h_2 > \dots > h_l > \dots, h_l = 2^{-1-l} \quad (24)$$

で表すことができる。また、レベル  $l$  での各グリッド点の座標は

$$x_{l,i} = \{ih_l : i = 1, 2, \dots, N_l = 2^{1+l} - 1\} \quad (25)$$

となる。最初に与えられた全グリッド数で可能な最大のレベル数  $l$  は決定される。方程式 (22) をレベル  $l$  で差分化すると

$$-\frac{u_{l,i-1} - 2u_{l,i} + u_{l,i+1}}{h_l^2} = f_{l,i} \quad (26)$$

を得る。式 (26) は  $N_l \times N_l$  の 3 重対角行列  $L_l$ 、 $N_l$  の未知のベクトル  $u_l$ 、 $N_l$  の既知のベクトル  $f_l$  を用いて

$$L_l u_l = f_l \quad (27)$$

で表すことができる。この方程式を例にして MGM を取り挙げる。

### 3.2 平滑化ステップ

MGM の最初のステップは、残差の高周波数成分を取り除く平滑化ステップである。方程式 (27) の解の残差の高周波数成分を取り除くため、式 (26) を

$$u_{l,i}^{(n+1)} := u_{l,i}^{(n)} + \omega \left( \frac{u_{l,i-1}^{(n)} + u_{l,i+1}^{(n)} + h_l^2 f_{l,i}}{2} - u_{l,i}^{(n)} \right) \quad (28)$$

の反復スキームに変形する。ここで、 $\omega (0 < \omega < 1)$  は緩和係数、 $n$  は反復回数を表す。この反復解法は damped Jacobi 法と呼ばれている。式 (28) を用いて残差の高周波数成分は取り除かれ [4]、残差を平滑化することができる。damped Jacobi 法の反復回数を決定するため  $defect, L_l u_l^{(n)} - f_l$  のノルム:

$$\|d_l^{(n)}\| \equiv \|L_l u_l^{(n)} - f_l\|, \quad (29)$$

$$\|d_l^{(n)}\| \equiv \max_{1 \leq i \leq N_l} |d_{l,i}^{(n)}| \quad (30)$$

を定義し、平滑化の程度を調べる。反復を繰り返すに従って残差の高周波数成分は取り除かれ、ある程度平滑化されると残差はほとんど変化しなくなる。このとき  $defect$  のノルムはある一定値になり、 $\epsilon_d$  は 1 に近づく。平滑化のステップを終了する条件は

$$\epsilon_d = \frac{\|d_l^{(n+1)}\|}{\|d_l^{(n)}\|} > \kappa \quad (31)$$

で与えられる。ここで、 $\kappa$  は  $0 < \kappa < 1$  の与えられた定数である。

### 3.3 Coarse-grid correction

次のステップは、残差の低周波数成分を取り除く *coarse-grid correction* のステップである。先ず厳密解を  $u_l$ 、平滑化ステップによって残差の高周波数成分が取り除かれた反復解を  $\bar{u}_l$  とすると、残差  $v_l$  は  $v_l = \bar{u}_l - u_l$  で表せる。 $L_l u_l - f_l = 0$  の  $u_l$  に  $\bar{u}_l$  を代入することによって  $defect$

$$d_l = L_l \bar{u}_l - f_l \quad (32)$$

を得る。したがって、残差  $v_l$  に対する方程式は

$$L_l v_l = d_l \quad (33)$$

である。方程式 (33) を解くことは、元の方程式  $L_l u_l = f_l$  を解くことと同値である。しかしながら、平滑化ステップで得られた  $v_l$  は滑らかな関数になっているため、粗いグリッド上でも近似され得る。粗いグリッドにおける方程式は

$$L_{l-1} v_{l-1} = d_{l-1} \quad (34)$$

で表される。このとき、方程式(34)で  $v_{l-1}$  が  $v_l$  の近似解を与えるように、 $d_l$  から  $d_{l-1}$  を作ることが必要である。そこで、restriction と呼ばれる線形写像  $r$  によって  $d_{l-1}$  を

$$d_{l-1} \equiv r d_l \quad (35)$$

で作る。次に、方程式(34)の厳密解  $v_{l-1} = L_{l-1}^{-1} d_{l-1}$  からレベル  $l$  における  $v_l$  の近似解を作るため、 $v_{l-1}$  に線形補間  $p$  を操作する。すなわち

$$\tilde{v}_l \equiv p v_{l-1}. \quad (36)$$

この補間を prolongation と呼ぶ。平滑化された反復解  $\bar{u}_l$  及び  $\tilde{v}_l = p v_{l-1}$  を用いて方程式(27)の近似解は

$$u_l^{new} = \bar{u}_l - \tilde{v}_l \quad (37)$$

によって更新される。 $\bar{u}_l \rightarrow u_l^{new}$  のステップを coarse-grid correction と呼ぶ。上で述べた方法は、2つのレベル  $l$  と  $l-1$  の間で計算が行なわれているため、TGM(Two-Grid Method) と呼ばれている。

第4節で用いる  $L_{l-1}$  と  $L_l$  の関係を導出しておく。方程式(33)の両辺の左から restriction  $r$  を作用させて  $v_l = p v_{l-1}$  を用いると、方程式(33)は

$$r L_l p v_{l-1} = d_{l-1} \quad (38)$$

となる。ここで、粗いグリッドにおける方程式は式(34)で表せるので

$$L_{l-1} = r L_l p \quad (39)$$

という関係が成り立つ。

### 3.4 MGM

次に TGM から MGM に拡張することを考える。TGM は方程式(34)の厳密解を必要とするため、実用的な反復解法でない。 $\tilde{v}_l$  は  $v_l = L_l^{-1} d_l$  の近似でしかないので、厳密解  $v_{l-1}$  を必要とせず、方程式(34)の近似解  $\tilde{v}_{l-1}$  を計算することで十分である。方程式(34)は方程式(33)の  $l$  を  $l-1$  で置き換えるだけで、同じ形式の方程式となる。したがって、レベル  $l-1, l-2$  の間で TGM は、方程式(34)を解くのに使うことができる。その結果、方程式(33)はレベル  $l, l-1, l-2$  の Three-Grid Method を用いることによって解くことになる。さらにレベル  $l-1, l-2$  の間で TGM は、 $L_{l-2} v_{l-2} = d_{l-2}$  を厳密に解くことが必要である。ここで、 $L_{l-2} v_{l-2} = d_{l-2}$  の解は、再びレベル  $l-2, l-3$  での TGM を用いることによって近似される。この過程を繰り返してレベルが 0 になったとき、すなわち、最も粗いグリッドにおける方程式:

$$L_0 v_0 = d_0 \quad (40)$$

のとき、方程式(40)を解くことは簡単である。レベルが  $l+1$  回変化することから、この反復解法は Multi-Grid Method と呼ばれている。方程式(34)を解くことは、レベル  $l-1$  で MGM を呼び出すので、MGM は帰納的プログラムによって記述される。また、方程式(34)を解く場合、一般的にはレベル  $l-1$  で MGM を複数回呼び出す。この MGM を呼び出す回数を  $\gamma$  とすると、 $\gamma = 1, 2$  の場合が通常である。この場合の反復過程では図 1 のような過程をたどるので、 $\gamma = 1$  のときは V-cycle、 $\gamma = 2$  のときは W-cycle と呼ばれている。

*coarse-grid correction* の後に生じる残差の高周波数成分を平滑化ステップを用いることによって取り除くことができる。この平滑化ステップを *post-smoothing* と呼ぶ。それに対して *coarse-grid correction* の前に行なう平滑化ステップを *pre-smoothing* と呼ぶ。例えば図 1.1 の V-cycleにおいて、レベル 0 での厳密解  $v_0 = L_0^{-1}d_0$  から prolongation  $p$  で近似解  $\tilde{v}_1 = pv_0$  を得、レベル 1 での  $v_1^{new} = \bar{v}_1 - \tilde{v}_1$  に対して *post-smoothing* を行なう。以下レベル 2, 3, 4 に対しても同様である。最後に MGM のフローチャートを図 2 に示す。

### 3.5 MGM の簡単な例

上で述べた TGM 及び MGM のプロセスを常微分方程式(22)の境界値問題を例にして確認する。また、MGM の収束の性質を調べ、通常の反復解法として SOR 法を取り挙げて MGM との CPU 時間にに対する比較を行なう。

先ず、TGM による残差の変化を図 3 に示す。以下の数値計算で反復過程の解の初期値はすべて 0 を与える。また、パラメーターは  $N_l = 7$ , 最大レベル数  $l_{max} = 2$ ,  $\omega = 0.5$ ,  $\kappa = 0.9$  を用い、*pre-smoothing*のみ行なう。 $n1 = 1, 2$  は 1 回目の TGM の damped Jacobi 法の反復回数であり、 $n = 1$  はその damped Jacobi 法の後の *coarse-grid correction* を示している。同様に  $n2 = 1, 2$  は 2 回目の TGM での反復の結果を示している。damped Jacobi 法を 1 回か 2 回行なうだけで残差の高周波数成分が取り除かれ、残差がほとんど変化しなくなっている。その平滑化ステップの後、*coarse-grid correction* を 1 回行なうことによって残差が大幅に減少し、低周波数成分が取り除かれている。これから分かるように、平滑化ステップで残差の高周波数成分が取り除かれ、*coarse-grid correction* で低周波数成分が取り除かれて、反復解は厳密解に収束する。

次に、MGM の反復回数に対する V-cycle と W-cycle の残差

$$\frac{\|u_l^{(m+1)} - u_l^{(m)}\|}{\|u_l^{(m+1)}\|}$$

の変化を図 4 に示す。ここで、 $m$  は MGM の反復回数である。パラメーターは  $N_l = 127$ ,  $l_{max} = 6$ ,  $\omega = 0.5$ ,  $\kappa = 0.5$  を用いる。V-cycle の残差は反復回数に対して一定の縮小率 (contraction number) で減少している。一方、W-cycle のそれは反復回数が 1 回目から 2 回目で急激に減少し、2 回目以後一定の縮小率で減少している。W-cycle は反復回数が 4 回で V-cycle よりも速く収束しているように見えるが、*pre-smoothing*

と *post-smoothing* のルーチンを呼んでる回数が V-cycle よりも多い。このため、W-cycle は平滑化ステップでの全反復回数が V-cycle よりも多くなり、必ずしも V-cycle よりも計算時間が早いとは限らない。

MGM の CPU 時間にに対する効率を見るため、古典的な反復解法である SOR 法を取り挙げる。MGM(V-cycle) と SOR 法の CPU 時間の比較を図 5 に示す。パラメーターとして、MGM(V-cycle) では  $N_l = 511, l_{max} = 8, \omega = 0.5, \kappa = 0.5$  を用いる。SOR 法では、この問題に対して最適に近い加速緩和係数  $\omega_s = 1.7$  を用いる。但し、グリッド数は MGM と同じである。MGM も SOR 法も精度を良くしていくと、CPU 時間は一定の増加率で増大している。また、精度が  $10^{-8}$  では MGM は SOR 法よりも CPU 時間が約 100 分の 1 短い。これから分かるように MGM は非常に収束が速い反復解法である。

#### 4 特異方程式に対する MGM の適用

第 2 節で述べた方法で固有値問題を解くことは、1 次方程式 (9) を解くことに帰着する。この方程式 (9) に対して MGM を適用する。前節で述べた方程式 (27) の解は、全てグリッドの関数である。しかしながら、方程式 (9) の解  $(\vec{x}^{(n+1)}, \delta\lambda)$  は、グリッドの関数でないスカラー  $\delta\lambda$  を含んでいる。このため、式 (21) における拡大行列を方程式 (27) における  $L_l$  と考えて、方程式 (9) に対して前節で述べた MGM を直接適用することはできない。そこで、次の形式の 1 次方程式:

$$L_l \vec{u}_l = \vec{f}_l, \quad L_l = \begin{bmatrix} \bar{L}_l & \vec{b}_l \\ \vec{\varphi}_l^t & \beta_l \end{bmatrix}, \quad \vec{u}_l = \begin{bmatrix} \vec{y}_l \\ \rho_l \end{bmatrix}, \quad \vec{f}_l = \begin{bmatrix} \vec{g}_l \\ \tau_l \end{bmatrix} \quad (41)$$

に対して MGM の考え方を適用することを試みる。ここで、未知量はベクトル  $\vec{y}_l$  とスカラー  $\rho_l$  である。また、 $\beta_l, \tau_l$  は既知のスカラーであり、グリッドのレベルに対して不変であるとする。すなわち、

$$\begin{aligned} \rho_l &= \rho_{l-1} = \cdots = \rho_0, \\ \beta_l &= \beta_{l-1} = \cdots = \beta_0, \\ \tau_l &= \tau_{l-1} = \cdots = \tau_0. \end{aligned} \quad (42)$$

グリッドに関するレベルが前もって存在するのは  $\bar{L}_l$  だけであり、 $\vec{b}_l, \vec{\varphi}_l^t$  には任意性がある。方程式 (41) における

$$\vec{\varphi}_l^t \vec{y}_l + \beta_l \rho_l = \tau_l \quad (43)$$

もレベルに対して不変であるようにするため、 $\vec{y}_{l-1}$  に対する prolongation  $\bar{p}$  を

$$\vec{\varphi}_{l-1}^t = \vec{\varphi}_l^t \bar{p} \quad l = 1, 2, \dots \quad (44)$$

と設定する。したがって、方程式 (41) に対する restriction  $r$  と prolongation  $p$  は、 $\bar{L}_l \vec{y}_l = \vec{g}_l$  に対する restriction と prolongation をそれぞれ  $\bar{r}, \bar{p}$  とすることによって

$$r \equiv \begin{bmatrix} \bar{r} & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad p \equiv \begin{bmatrix} \bar{p} & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (45)$$

と *post-smoothing* のルーチンを呼んでる回数が V-cycle よりも多い。このため、W-cycle は平滑化ステップでの全反復回数が V-cycle よりも多くなり、必ずしも V-cycle よりも計算時間が早いとは限らない。

MGM の CPU 時間にに対する効率を見るため、古典的な反復解法である SOR 法を取り挙げる。MGM(V-cycle) と SOR 法の CPU 時間の比較を図 5 に示す。パラメーターとして、MGM(V-cycle) では  $N_l = 511, l_{max} = 8, \omega = 0.5, \kappa = 0.5$  を用いる。SOR 法では、この問題に対して最適に近い加速緩和係数  $\omega_s = 1.7$  を用いる。但し、グリッド数は MGM と同じである。MGM も SOR 法も精度を良くしていくと、CPU 時間は一定の増加率で増大している。また、精度が  $10^{-8}$  では MGM は SOR 法よりも CPU 時間が約 100 分の 1 短い。これから分かるように MGM は非常に収束が速い反復解法である。

#### 4 特異方程式に対する MGM の適用

第 2 節で述べた方法で固有値問題を解くことは、1 次方程式 (9) を解くことに帰着する。この方程式 (9) に対して MGM を適用する。前節で述べた方程式 (27) の解は、全てグリッドの関数である。しかしながら、方程式 (9) の解  $(\vec{x}^{(n+1)}, \delta\lambda)$  は、グリッドの関数でないスカラー  $\delta\lambda$  を含んでいる。このため、式 (21) における拡大行列を方程式 (27) における  $L_l$  と考えて、方程式 (9) に対して前節で述べた MGM を直接適用することはできない。そこで、次の形式の 1 次方程式:

$$L_l \vec{u}_l = \vec{f}_l, \quad L_l = \begin{bmatrix} \bar{L}_l & \vec{b}_l \\ \vec{\varphi}_l^t & \beta_l \end{bmatrix}, \quad \vec{u}_l = \begin{bmatrix} \vec{y}_l \\ \rho_l \end{bmatrix}, \quad \vec{f}_l = \begin{bmatrix} \vec{g}_l \\ \tau_l \end{bmatrix} \quad (41)$$

に対して MGM の考え方を適用することを試みる。ここで、未知量はベクトル  $\vec{y}_l$  とスカラー  $\rho_l$  である。また、 $\beta_l, \tau_l$  は既知のスカラーであり、グリッドのレベルに対して不変であるとする。すなわち、

$$\begin{aligned} \rho_l &= \rho_{l-1} = \cdots = \rho_0, \\ \beta_l &= \beta_{l-1} = \cdots = \beta_0, \\ \tau_l &= \tau_{l-1} = \cdots = \tau_0. \end{aligned} \quad (42)$$

グリッドに関するレベルが前もって存在するのは  $\bar{L}_l$  だけであり、 $\vec{b}_l, \vec{\varphi}_l^t$  には任意性がある。方程式 (41) における

$$\vec{\varphi}_l^t \vec{y}_l + \beta_l \rho_l = \tau_l \quad (43)$$

もレベルに対して不変であるようにするため、 $\vec{y}_{l-1}$  に対する prolongation  $\bar{p}$  を

$$\vec{\varphi}_{l-1}^t = \vec{\varphi}_l^t \bar{p} \quad l = 1, 2, \dots \quad (44)$$

と設定する。したがって、方程式 (41) に対する restriction  $r$  と prolongation  $p$  は、 $\bar{L}_l \vec{y}_l = \vec{g}_l$  に対する restriction と prolongation をそれぞれ  $\bar{r}, \bar{p}$  とすることによって

$$r \equiv \begin{bmatrix} \bar{r} & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad p \equiv \begin{bmatrix} \bar{p} & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (45)$$

で定義できる。また、 $L_{l-1}$  ( $l = 1, 2, \dots$ ) は式 (39) から

$$\begin{aligned} L_{l-1} &= rL_l p \\ &= \begin{bmatrix} \bar{r}\bar{L}_l \bar{p} & \bar{r}\vec{b}_l \\ \vec{\varphi}_l^t \bar{p} & \beta_l \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (46)$$

となる。式 (46) で  $L_{l-1}$  が定義できるように

$$\vec{b}_{l-1} = \bar{r}\vec{b}_l \quad (47)$$

とする。

先ず、MGM の最初のステップである平滑化ステップについて考える。スカラー  $\rho_l$  はグリッドに依存しない量であるため、全てのレベルに対して平滑化ステップの過程がない。このため、平滑化ステップで変化しないスカラー  $\rho_l$  の初期推測値を  $\rho_l^s$  として、方程式 (41) における  $\bar{L}_l \vec{y}_l + \vec{b}_l \rho_l = \vec{g}_l$  を

$$\bar{L}_l \vec{y}_l = \vec{g}_l - \vec{b}_l \rho_l^s \quad (48)$$

に変形する。方程式 (48) の  $\vec{y}_l$  に対して平滑化を行ない、平滑化された反復解  $(\vec{y}_l^s, \rho_l^s)$  を得る。

次に *coarse-grid correction* について考える。平滑化ステップで得られた反復解  $(\vec{y}_l^s, \rho_l^s)$  を用いて方程式 (41) に対する *defect*  $\vec{d}_l$ ,  $\delta_l$  は

$$\vec{d}_l = \bar{L}_l \vec{y}_l^s + \vec{b}_l \rho_l^s - \vec{g}_l, \quad (49a)$$

$$\delta_l = \vec{\varphi}_l^t \vec{y}_l^s + \beta_l \rho_l^s - \tau_l \quad (49b)$$

で与えられる。また、レベル  $l$  での厳密解  $(\vec{y}_l, \rho_l)$  の補正を  $(\delta \vec{y}_l, \delta \rho_l)$  とすると、方程式 (41) に対する補正された方程式は

$$\begin{aligned} \bar{L}_l \delta \vec{y}_l + \vec{b}_l \delta \rho_l &= \vec{d}_l, \\ \vec{\varphi}_l^t \delta \vec{y}_l + \beta_l \delta \rho_l &= \delta_l \end{aligned} \quad (50)$$

で表せる。式 (42)、式 (44)-(45) 及び式 (47) を用いると、レベル  $l-1$  での各量は

$$\vec{d}_{l-1} = \bar{r}\vec{d}_l, \quad \delta_{l-1} = \delta_l, \quad \vec{b}_{l-1} = \bar{r}\vec{b}_l, \quad \vec{\varphi}_{l-1}^t = \vec{\varphi}_l^t \bar{p}, \quad \beta_{l-1} = \beta_l \quad (51)$$

で与えられる。したがって、粗いグリッドにおける方程式は

$$\bar{L}_{l-1} \delta \vec{y}_{l-1} + \vec{b}_{l-1} \delta \rho_{l-1} = \vec{d}_{l-1}, \quad (52a)$$

$$\vec{\varphi}_{l-1}^t \delta \vec{y}_{l-1} + \beta_{l-1} \delta \rho_{l-1} = \delta_{l-1} \quad (52b)$$

となる。ここで、方程式 (52) の厳密解  $(\delta \vec{y}_{l-1}, \delta \rho_{l-1})$  からレベル  $l$  における近似解を作るため、prolongation  $p$  を用いて  $\delta \vec{y}_l = \bar{p} \delta \vec{y}_{l-1}$ ,  $\delta \rho_l = \delta \rho_{l-1}$  のように近似する。最後に *coarse-grid correction*:

$$\vec{y}_l^{new} = \vec{y}_l^s - \delta \vec{y}_l, \quad \rho_l^{new} = \rho_l^s - \delta \rho_l \quad (53)$$

を行なうことによって近似解を更新する。

このとき、更新された近似解 ( $\vec{y}_l^{new}$ ,  $\rho_l^{new}$ ) が式 (43) を満足することを以下に示す。式 (49b) より

$$\begin{aligned} & \vec{\varphi}_l^t(\vec{y}_l^s - \delta\vec{y}_l) + \beta_l(\rho_l^s - \delta\rho_l) \\ &= \delta_l + \tau_l - \vec{\varphi}_l^t\delta\vec{y}_l - \beta_l\delta\rho_l \end{aligned}$$

を得る。ここで、式 (42)、式 (44)-(45) 及び式 (52b) を用いると

$$\begin{aligned} & \vec{\varphi}_l^t(\vec{y}_l^s - \delta\vec{y}_l) + \beta_l(\rho_l^s - \delta\rho_l) \\ &= \delta_{l-1} + \tau_l - \vec{\varphi}_l^t\bar{p}\delta\vec{y}_{l-1} - \beta_{l-1}\delta\rho_{l-1} \\ &= \delta_{l-1} + \tau_l - \vec{\varphi}_{l-1}^t\delta\vec{y}_{l-1} - \beta_{l-1}\delta\rho_{l-1} \\ &= \tau_l. \end{aligned}$$

上で述べた方法は 2 つのレベル  $l$  と  $l-1$  の間で計算が行なわれているため、TGM である。第 3 節で述べたように TGM から MGM に拡張でき、方程式 (9) に対して MGM が適用できる。また、各レベルで更新された近似解は式 (43) を満足する。

## 5 モデル方程式と数値解法

モデル方程式として常微分方程式の固有値問題

$$\mathcal{L}u(x) = -\frac{d^2u(x)}{dx^2} = \lambda u(x) \quad x \in [0, 1], \quad (54)$$

$$u(x=0) = u(x=1) = 0$$

を第 2 節で述べた 1 次方程式 (9) を解く方法によって、固有値とそれに対応する固有ベクトルを求めるこことを考える。

式 (54) における固有値問題を第 2 節で述べた方法で解く場合、プログラムは数値計算上大きく 2 つのループで構成される。1 つのループは非線形方程式 (6) を Newton 法で解く外側ループ (反復回数  $n$ ) である。もう 1 つのループは方程式 (9) を MGM で解く内側ループ (反復回数  $m$ ) である。先ず、式 (21) における拡大行列を作るため、式 (1) における固有値問題の行列  $A$ 、方程式 (6) を Newton 法で解く場合の解の初期値 ( $\vec{x}^{(0)}$ ,  $\lambda^{(0)}$ ) 及び既知ベクトル  $\vec{w}$  を設定する。式 (54) をレベル  $l$  で差分化し境界条件を考慮すると、行列  $A$  に対応する行列は

$$\frac{1}{h_l^2} \begin{bmatrix} 2 & -1 & & & 0 \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & \cdots & \cdots & \cdots & \\ & & \cdots & \cdots & \\ 0 & & -1 & 2 & -1 \\ & & & -1 & 2 \end{bmatrix} \quad (55)$$

を行なうことによって近似解を更新する。

このとき、更新された近似解 ( $\vec{y}_l^{new}$ ,  $\rho_l^{new}$ ) が式 (43) を満足することを以下に示す。式 (49b) より

$$\begin{aligned} & \vec{\varphi}_l^t(\vec{y}_l^* - \delta\vec{y}_l) + \beta_l(\rho_l^* - \delta\rho_l) \\ &= \delta_l + \tau_l - \vec{\varphi}_l^t\delta\vec{y}_l - \beta_l\delta\rho_l \end{aligned}$$

を得る。ここで、式 (42)、式 (44)-(45) 及び式 (52b) を用いると

$$\begin{aligned} & \vec{\varphi}_l^t(\vec{y}_l^* - \delta\vec{y}_l) + \beta_l(\rho_l^* - \delta\rho_l) \\ &= \delta_{l-1} + \tau_l - \vec{\varphi}_l^t\bar{p}\delta\vec{y}_{l-1} - \beta_{l-1}\delta\rho_{l-1} \\ &= \delta_{l-1} + \tau_l - \vec{\varphi}_{l-1}^t\delta\vec{y}_{l-1} - \beta_{l-1}\delta\rho_{l-1} \\ &= \tau_l. \end{aligned}$$

上で述べた方法は 2 つのレベル  $l$  と  $l-1$  の間で計算が行なわれているため、TGM である。第 3 節で述べたように TGM から MGM に拡張でき、方程式 (9) に対して MGM が適用できる。また、各レベルで更新された近似解は式 (43) を満足する。

## 5 モデル方程式と数値解法

モデル方程式として常微分方程式の固有値問題

$$\mathcal{L}u(x) = -\frac{d^2u(x)}{dx^2} = \lambda u(x) \quad x \in [0, 1], \quad (54)$$

$$u(x=0) = u(x=1) = 0$$

を第 2 節で述べた 1 次方程式 (9) を解く方法によって、固有値とそれに対応する固有ベクトルを求めるこことを考える。

式 (54) における固有値問題を第 2 節で述べた方法で解く場合、プログラムは数値計算上大きく 2 つのループで構成される。1 つのループは非線形方程式 (6) を Newton 法で解く外側ループ (反復回数  $n$ ) である。もう 1 つのループは方程式 (9) を MGM で解く内側ループ (反復回数  $m$ ) である。先ず、式 (21) における拡大行列を作るため、式 (1) における固有値問題の行列  $A$ 、方程式 (6) を Newton 法で解く場合の解の初期値 ( $\vec{x}^{(0)}$ ,  $\lambda^{(0)}$ ) 及び既知ベクトル  $\vec{w}$  を設定する。式 (54) をレベル  $l$  で差分化し境界条件を考慮すると、行列  $A$  に対応する行列は

$$\frac{1}{h_l^2} \begin{bmatrix} 2 & -1 & & & 0 \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & \cdots & \cdots & \cdots & \\ & & \cdots & \cdots & \\ 0 & & & -1 & 2 & -1 \\ & & & & -1 & 2 \end{bmatrix} \quad (55)$$

で与えられ、 $N_l \times N_l$  の 3 重対角行列となる。方程式(6)の解  $\vec{x}$  の初期値  $\vec{x}^{(0)}$  について考える。式(54)における固有値問題に対する解析的な固有値は  $\lambda_j = 4/h_l^2[\sin(j\pi h_l/2)]^2$ 、固有ベクトルは

$$\vec{e}_j = \sqrt{2}h_l \begin{bmatrix} \sin(j\pi h_l) \\ \sin(2j\pi h_l) \\ \vdots \\ \sin(N_l j\pi h_l) \end{bmatrix} \quad (56)$$

で表せる。このため、解析的な固有ベクトルの 10 個までの和を初期値  $\vec{x}^{(0)}$

$$\vec{x}^{(0)} = \frac{\vec{E}}{\sqrt{\sum_{i=1}^{N_l} \{E_i\}^2}}, \quad (57)$$

$$\vec{E} = \sum_{j=1}^{10} \vec{e}_j \quad (58)$$

と仮定する。このようにして初期値  $\vec{x}^{(0)}$  を仮定することによって、10 番目までの固有値及び固有ベクトルを求めることができる。また、既知ベクトル  $\vec{w}$  も初期値  $\vec{x}^{(0)}$  と全く同じベクトルを仮定する。方程式(6)の解  $\lambda$  の初期値  $\lambda^{(0)}$  として適当な値を与えると、その値に最も近い固有値  $\lambda_1$  に収束する。例えば、初期値  $\lambda^{(0)}$  として 8.0 を与えると、8.0 に最も近い最小の固有値 9.869 に収束する。このようにして、行列  $A$ 、方程式(6)の解の初期値  $(\vec{x}^{(0)}, \lambda^{(0)})$  及び既知ベクトル  $\vec{w}$  を設定することによって、拡大行列を作り方程式(9)を MGM で解く準備ができる。

次に方程式(9)を MGM で解く具体的な数値解法について説明をする。先ず、MGM の最初の平滑化ステップにおいて  $\delta\lambda$  の初期推測値  $\delta\lambda^s$  を 0 と仮定する。また、方程式(9)を MGM で解く内側ループでは外側の反復回数の  $n$  は固定されているため、 $\vec{x}^{(n+1)}$  を  $n$  に依存しない  $\vec{X}$  で置き換えておく。したがって、方程式(48)に対応する方程式(9)は

$$(A - \lambda^{(n)} I) \vec{X} = \vec{x}^{(n)} \delta\lambda^s \quad (59)$$

である。damped Jacobi 法で方程式(59)の解  $\vec{X}$  の残差の高周波数成分を取り除くことによって、平滑化された反復解  $(\vec{X}^s, \delta\lambda^s)$  を得る。次に restriction 及び prolongation を行なうため、 $\tau$  として weighted restriction、 $\bar{p}$  として線形補間を採用する。すな

わち

$$\bar{r} = \frac{1}{4} \begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 & & & 0 \\ & 1 & 2 & 1 & & \\ & & \dots & & & \\ & & & 1 & 2 & 1 \\ 0 & & & & 1 & 2 & 1 \end{bmatrix}, \quad \bar{p} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & & & & & 0 \\ 2 & 1 & 1 & & & \\ & 2 & & \dots & & \\ & & 2 & & & \\ & & & 1 & 1 & \\ & & & & 2 & \\ 0 & & & & & 1 \end{bmatrix} \quad (60)$$

である。ここで、 $\bar{r}$ は  $N_{l-1} \times N_l$  の行列であり、 $\bar{p}$ は  $N_l \times N_{l-1}$  の行列である。式(60)に従って、方程式(50)に対して restriction を行ない、レベル  $l-1$  での方程式を得る。 $l-1 > 0$  であれば、レベル  $l-1$  での方程式を解くために再び MGM を呼び出す。この過程を繰り返しレベルが 0 になれば、レベル 0 での方程式を直接法で解く。

MGM による方程式(9)の反復解  $(\vec{X}^{(m)}, \delta\lambda^{(m)})$  の収束判定は

$$\frac{\|\vec{X}^{(m+1)} - \vec{X}^{(m)}\|}{\|\vec{X}^{(m+1)}\|} \leq \epsilon_{MGM}, \quad |\delta\lambda^{(m+1)} - \delta\lambda^{(m)}| \leq \epsilon_{MGM} \quad (61)$$

で行なう。ここで、ノルムは

$$\|\vec{X}^{(m)}\| \equiv \max_{1 \leq i \leq N_l} |X_i^{(m)}| \quad (62)$$

で定義する。反復解  $(\vec{X}^{(m)}, \delta\lambda^{(m)})$  が式(61)を満足しなければ、方程式(9)を MGM で解く反復過程を繰り返す。このようにして方程式(9)の反復解  $(\vec{X}^{(m)}, \delta\lambda^{(m)})$  は収束する。

反復解  $(\vec{X}^{(m)}, \delta\lambda^{(m)})$  が式(61)を満足すれば、方程式(9)を MGM で解く内側のループから方程式(6)を Newton 法で解く外側のループに移る。Newton 法に対する方程式(6)の反復解  $(\vec{x}^{(n)}, \lambda^{(n)})$  の収束判定は

$$\frac{\|\vec{x}^{(n+1)} - \vec{x}^{(n)}\|}{\|\vec{x}^{(n+1)}\|} \leq \epsilon, \quad \frac{|\lambda^{(n+1)} - \lambda^{(n)}|}{|\lambda^{(n+1)}|} \leq \epsilon \quad (63)$$

で行なう。ここでノルムは

$$\|\vec{x}^{(n)}\| \equiv \sqrt{\sum_{i=1}^{N_l} \{x_i^{(n)}\}^2} \quad (64)$$

で定義する。式(63)が収束していないければ、方程式(6)を Newton 法で解く過程を繰り返す。

## 6 数値計算結果

前節で述べた常微分方程式の固有値問題を解くことによって、固有値及び固有ベクトルの収束の性質について調べる。また、1次方程式(9)をMGMで解いた場合と、方程式(9)の拡大行列を密行列として扱い直接法で解いた場合とでCPU時間を比較する。

テスト計算として最小の固有値とそれに対応する固有ベクトルを求める。パラメーターはMGM( $l = 8 \rightarrow l = 0$ , V-cycle), 領域内部の全グリッド数  $N_l = 511$ , 非線形方程式(6)の解 $\lambda$ の初期値  $\lambda^{(0)} = 8.0$ , Newton法に対する収束判定子  $\epsilon = 1.0 \times 10^{-10}$ , MGMの収束判定子  $\epsilon_{MGM} = 1.0 \times 10^{-5}$ , damped Jacobi法の平滑判定子  $\kappa = 0.5$ , damped Jacobi法の緩和係数  $\omega = 0.5$  を用い、*pre-smoothing*のみ行なう。先ず、Newton法の反復の1回目から4回目までのMGMの反復回数に対する方程式(9)の反復解  $(\vec{x}^{(n+1)}, \delta\lambda)$  の残差を図6に示す。Newton法の反復の1回目から4回目までの  $\vec{x}^{(n+1)}$  の残差は、MGMの反復回数に対してほとんど一定の縮小率で減少している。一方、 $\delta\lambda$ の残差は1回目から2回目まで振動しながら減少し、3回目以後振動は小さくなっている。また、1回目のNewton法の反復に対するMGMの反復回数は12回、2回目は31回で増加し、3回目以後減少している。これは  $\delta\lambda$ が初期推測値を仮定され、レベル0まで解が更新されないためであると考えられる。

そこで、レベルを0まで下げないで途中で止め、その止めたレベルでは直接法で解き元のレベルまで戻れば、 $\delta\lambda$ が早く更新されるため反復回数に対する  $\delta\lambda$ の残差の振動が小さくなると期待される。レベル8と4の間で反復が行なわれる5GM( $l = 8 \rightarrow l = 4$ , V-cycle)を用いて、5GMの反復回数に対する反復解  $(\vec{x}^{(n+1)}, \delta\lambda)$  の残差を調べた(図7)。但し、以下の計算のパラメーターは図6の場合のグリッド数からすべて同じである。Newton法の反復の1回目から2回目までの反復解  $(\vec{x}^{(n+1)}, \delta\lambda)$  の残差は、5GMの反復回数に対して振動することなくほとんど一定の縮小率で減少し、5GMの反復回数も8回から5回に減少している。このことから解が速く収束することが分かる。

次に方程式(6)の反復解  $(\vec{x}^{(n)}, \lambda^{(n)})$  の精度に対するCPU時間の依存性を図8に示す。方程式(9)の拡大行列を密行列として扱い直接法で解いてNewton法から反復解  $(\vec{x}^{(n)}, \lambda^{(n)})$  を求めた場合と、MGMまたは5GMで方程式(9)を解いてNewton法からそれを求めた場合とでCPU時間を調べた。MGMは直接法と比べるとCPU時間が約10分の1短く、5GMは直接法と比べると約30分の1短い。

また、グリッド数に対する直接法、MGM及び4GM( $l = 8 \rightarrow l = 5$ , V-cycle)のCPU時間の依存性を図9に示す。グリッド数が少ないとときには、どの方法に対してもCPU時間は大きく変わらない。一方、グリッド数が多くなると、直接法はMGMや4GMと比べると圧倒的にCPU時間がかかる。特に  $N_l=511$ に対してCPU時間を比較すると、図8のときと同様にMGMは直接法と比べるとCPU時間が約10分の1短く、4GMは直接法と比べると約30分の1短い。

通常、方程式(9)をMGMで解いた後、外側のループであるNewton法から方程式(6)の反復解  $(\vec{x}^{(n)}, \lambda^{(n)})$  を求めている。MGMの部分を改良しMGMによる

反復を 1 回だけ行なった後、外側のループに入る方法 (1 Iteration MGM) で反復解  $(\bar{x}^{(n)}, \lambda^{(n)})$  が収束すれば、通常の MGM よりも CPU 時間が短くなることが期待される。そこで、Newton 法の反復回数に対する反復解  $(\bar{x}^{(n)}, \lambda^{(n)})$  の残差を 1 Iteration MGM、1 Iteration 5GM 及び通常の 5GM に関して調べた (図 10)。1 Iteration MGM を用いたときの解は 22 回の反復回数で収束し、 $\lambda^{(n)}$  の残差は振動しながら減少している。1 Iteration 5GM を用いたときの解は 16 回で収束し、1 Iteration MGM で見られる  $\lambda^{(n)}$  の残差の振動は小さくなっている。通常の 5GM を用いると解は 10 回で収束し、1 番収束率が良い。これは方程式 (9) を 5GM で解いて反復解  $(\bar{x}^{(n+1)}, \delta\lambda)$  を収束させた後、外側ループで反復解  $(\bar{x}^{(n)}, \lambda^{(n)})$  を収束させているからである。

1 Iteration MGM、1 Iteration 5GM 及び 5GM に関して反復解  $(\bar{x}^{(n)}, \lambda^{(n)})$  の精度に対する CPU 時間の依存性を図 11 に示す。精度が  $10^{-10}$  に対して CPU 時間を比較すると、1 Iteration 5GM は 1 Iteration MGM に比べて約 12 秒、5GM に比べて約 30 秒 CPU 時間が短く、最も収束が速い。したがって、1 Iteration 5GM は直接法と比べると CPU 時間が約 50 分の 1 短いことが分かる。また、グリッド数に対する 1 Iteration MGM、1 Iteration 5GM 及び 5GM の CPU 時間の依存性も図 11 の場合と同じことが言える (図 12)。

## 7 結論

固有値問題を等価な非線形方程式 (6) に置き換え、この方程式 (6) に対して Newton 法を適用することによって、1 次方程式 (9) を導いた。方程式 (9) の拡大行列は常に正則であり、方程式 (9) を数値的に安定に解くことができる事を示した。また、方程式 (9) に対して高速の反復解法である MGM を適用した。数値計算結果から、この方法は固有値問題と特異方程式を数値的に安定でかつ高精度に求めることができる有効な方法であることを確認した。MGM の部分を改良し MGM による反復を 1 回だけ行なった後、Newton 法による外側のループに入る方法によって、方程式 (9) の拡大行列を密行列として扱う直接法よりも CPU 時間が約 50 分の 1 短い高速解法を開発した。

今後の展開として固有値問題とそれに伴う特異方程式を解くことによって接続データを求めるため、この有力な数値計算法を有限要素法に対して適用して行きたい。

## 謝辞

本研究は著者の 1 人 (神吉) が、平成 6 年 4 月から平成 7 年 3 月まで学生実習生として炉心プラズマ研究部プラズマ理論研究室に滞在中に行なったものであります。この機会与えて頂いた岸本浩炉心プラズマ研究部長に感謝致します。

反復を 1 回だけ行なった後、外側のループに入る方法 (1 Iteration MGM) で反復解  $(\bar{x}^{(n)}, \lambda^{(n)})$  が収束すれば、通常の MGM よりも CPU 時間が短くなることが期待される。そこで、Newton 法の反復回数に対する反復解  $(\bar{x}^{(n)}, \lambda^{(n)})$  の残差を 1 Iteration MGM、1 Iteration 5GM 及び通常の 5GM に関して調べた (図 10)。1 Iteration MGM を用いたときの解は 22 回の反復回数で収束し、 $\lambda^{(n)}$  の残差は振動しながら減少している。1 Iteration 5GM を用いたときの解は 16 回で収束し、1 Iteration MGM で見られる  $\lambda^{(n)}$  の残差の振動は小さくなっている。通常の 5GM を用いると解は 10 回で収束し、1 番収束率が良い。これは方程式 (9) を 5GM で解いて反復解  $(\bar{x}^{(n+1)}, \delta\lambda)$  を収束させた後、外側ループで反復解  $(\bar{x}^{(n)}, \lambda^{(n)})$  を収束させているからである。

1 Iteration MGM、1 Iteration 5GM 及び 5GM に関して反復解  $(\bar{x}^{(n)}, \lambda^{(n)})$  の精度に対する CPU 時間の依存性を図 11 に示す。精度が  $10^{-10}$  に対して CPU 時間を比較すると、1 Iteration 5GM は 1 Iteration MGM に比べて約 12 秒、5GM に比べて約 30 秒 CPU 時間が短く、最も収束が速い。したがって、1 Iteration 5GM は直接法と比べると CPU 時間が約 50 分の 1 短いことが分かる。また、グリッド数に対する 1 Iteration MGM、1 Iteration 5GM 及び 5GM の CPU 時間の依存性も図 11 の場合と同じことが言える (図 12)。

## 7 結論

固有値問題を等価な非線形方程式 (6) に置き換え、この方程式 (6) に対して Newton 法を適用することによって、1 次方程式 (9) を導いた。方程式 (9) の拡大行列は常に正則であり、方程式 (9) を数値的に安定に解くことができる事を示した。また、方程式 (9) に対して高速の反復解法である MGM を適用した。数値計算結果から、この方法は固有値問題と特異方程式を数値的に安定でかつ高精度に求めることができる有効な方法であることを確認した。MGM の部分を改良し MGM による反復を 1 回だけ行なった後、Newton 法による外側のループに入る方法によって、方程式 (9) の拡大行列を密行列として扱う直接法よりも CPU 時間が約 50 分の 1 短い高速解法を開発した。

今後の展開として固有値問題とそれに伴う特異方程式を解くことによって接続データを求めるため、この有力な数値計算法を有限要素法に対して適用して行きたい。

## 謝辞

本研究は著者の 1 人 (神吉) が、平成 6 年 4 月から平成 7 年 3 月まで学生実習生として炉心プラズマ研究部プラズマ理論研究室に滞在中に行なったものであります。この機会与えて頂いた岸本浩炉心プラズマ研究部長に感謝致します。

反復を 1 回だけ行なった後、外側のループに入る方法 (1 Iteration MGM) で反復解  $(\bar{x}^{(n)}, \lambda^{(n)})$  が収束すれば、通常の MGM よりも CPU 時間が短くなることが期待される。そこで、Newton 法の反復回数に対する反復解  $(\bar{x}^{(n)}, \lambda^{(n)})$  の残差を 1 Iteration MGM、1 Iteration 5GM 及び通常の 5GM に関して調べた (図 10)。1 Iteration MGM を用いたときの解は 22 回の反復回数で収束し、 $\lambda^{(n)}$  の残差は振動しながら減少している。1 Iteration 5GM を用いたときの解は 16 回で収束し、1 Iteration MGM で見られる  $\lambda^{(n)}$  の残差の振動は小さくなっている。通常の 5GM を用いると解は 10 回で収束し、1 番収束率が良い。これは方程式 (9) を 5GM で解いて反復解  $(\bar{x}^{(n+1)}, \delta\lambda)$  を収束させた後、外側ループで反復解  $(\bar{x}^{(n)}, \lambda^{(n)})$  を収束させているからである。

1 Iteration MGM、1 Iteration 5GM 及び 5GM に関して反復解  $(\bar{x}^{(n)}, \lambda^{(n)})$  の精度に対する CPU 時間の依存性を図 11 に示す。精度が  $10^{-10}$  に対して CPU 時間を比較すると、1 Iteration 5GM は 1 Iteration MGM に比べて約 12 秒、5GM に比べて約 30 秒 CPU 時間が短く、最も収束が速い。したがって、1 Iteration 5GM は直接法と比べると CPU 時間が約 50 分の 1 短いことが分かる。また、グリッド数に対する 1 Iteration MGM、1 Iteration 5GM 及び 5GM の CPU 時間の依存性も図 11 の場合と同じことが言える (図 12)。

## 7 結論

固有値問題を等価な非線形方程式 (6) に置き換え、この方程式 (6) に対して Newton 法を適用することによって、1 次方程式 (9) を導いた。方程式 (9) の拡大行列は常に正則であり、方程式 (9) を数値的に安定に解くことができる事を示した。また、方程式 (9) に対して高速の反復解法である MGM を適用した。数値計算結果から、この方法は固有値問題と特異方程式を数値的に安定でかつ高精度に求めることができる有効な方法であることを確認した。MGM の部分を改良し MGM による反復を 1 回だけ行なった後、Newton 法による外側のループに入る方法によって、方程式 (9) の拡大行列を密行列として扱う直接法よりも CPU 時間が約 50 分の 1 短い高速解法を開発した。

今後の展開として固有値問題とそれに伴う特異方程式を解くことによって接続データを求めるため、この有力な数値計算法を有限要素法に対して適用して行きたい。

## 謝辞

本研究は著者の 1 人 (神吉) が、平成 6 年 4 月から平成 7 年 3 月まで学生実習生として炉心プラズマ研究部プラズマ理論研究室に滞在中に行なったものであります。この機会与えて頂いた岸本浩炉心プラズマ研究部長に感謝致します。

## 参考文献

- [1] B. Coppi, J.M. Greene and J.L. Johnson, "Resistive Instabilities in a Diffuse Linear Pinch", Nuclear Fusion, **6** (1966), 101-117.
- [2] 徳田伸二、「臨界安定に近い場合の接続データの数値計算法 I: 固有値問題による定式化」、MHD 研究集会講演論文集 (1994) (投稿予定).
- [3] G. Strang, *Linear Algebra and Its Applications* (Academic Press, New York, 1976).
- [4] W. Hackbusch, *Multi-Grid Methods and Applications* (Springer-Verlag, Berlin, 1985).
- [5] W.L. Briggs, *A Multigrid Tutorial* (SIAM, Lancaster Press, PA, 1988).

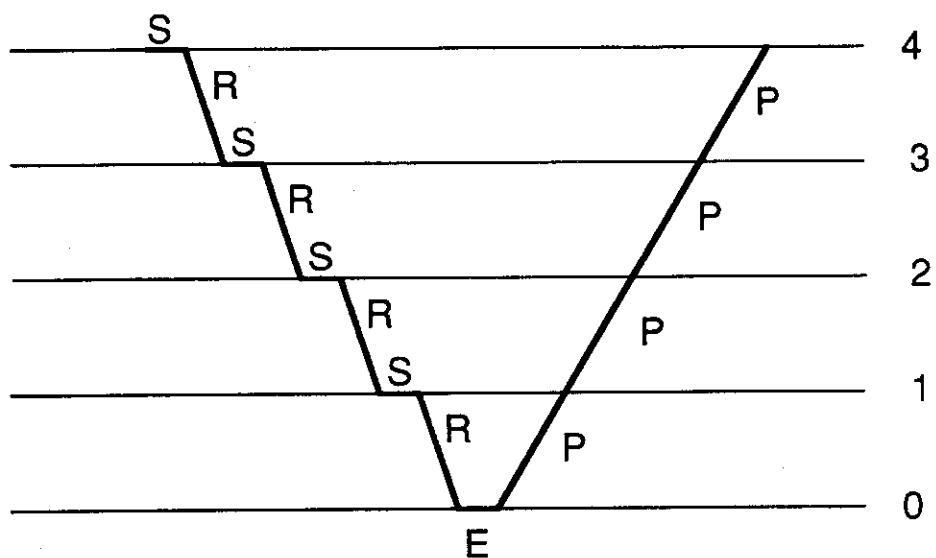


図 1.1  $\gamma=1, l=4$ に対する1回のMGMによる反復

S : smoothing step, R : restriction of the defect  
E : exact solving at level 0, P : correction

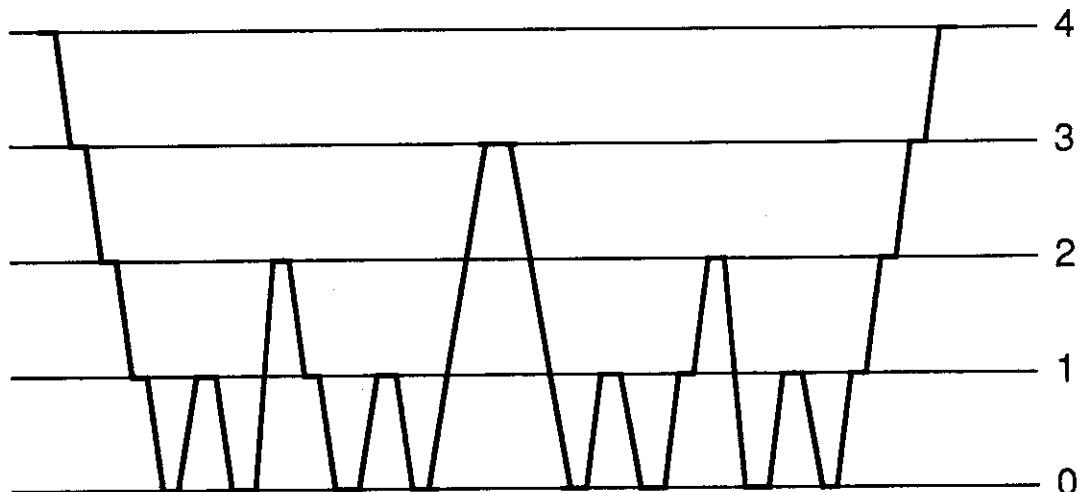


図 1.2  $\gamma=2, l=4$ に対する1回のMGMによる反復

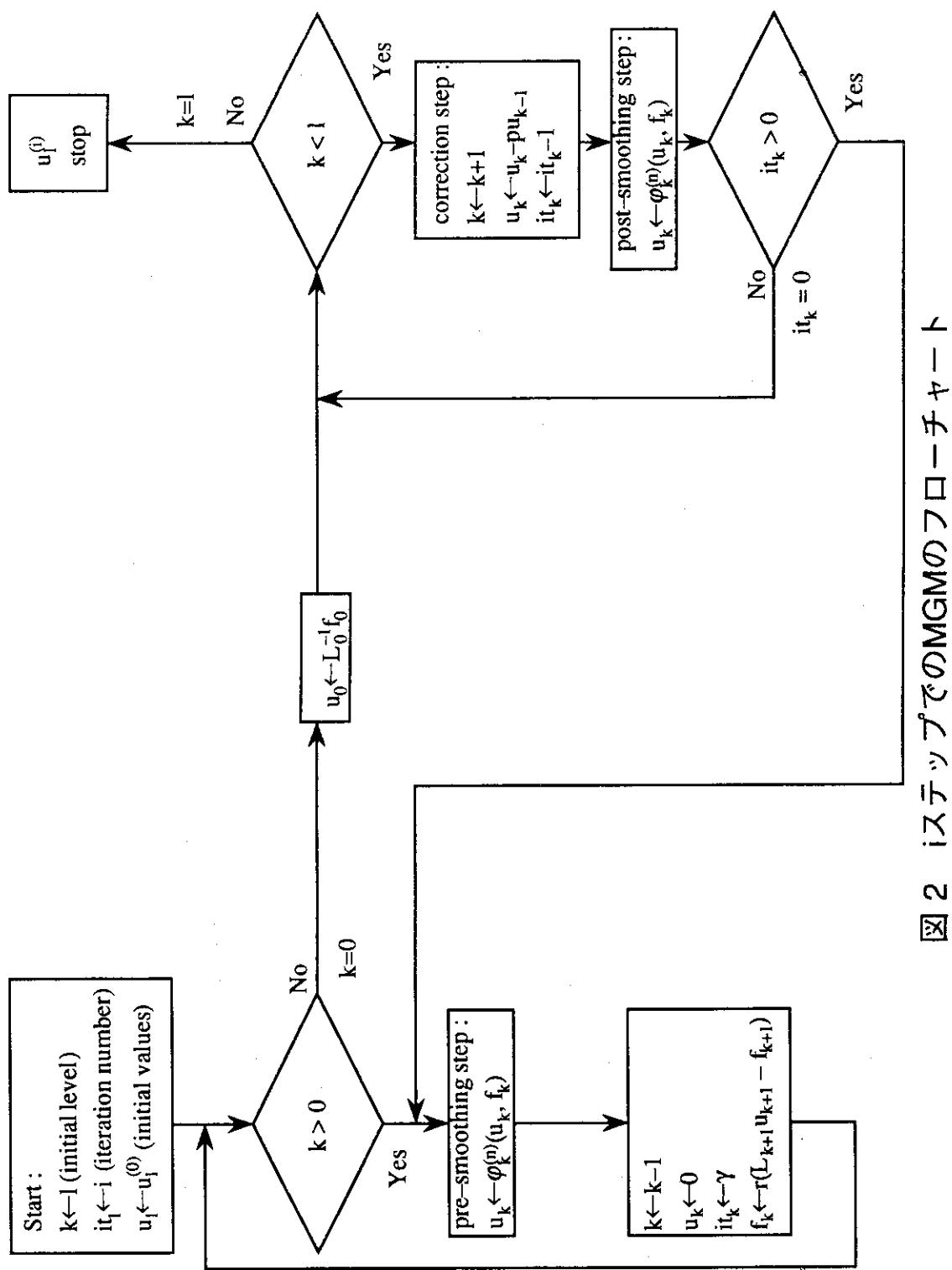
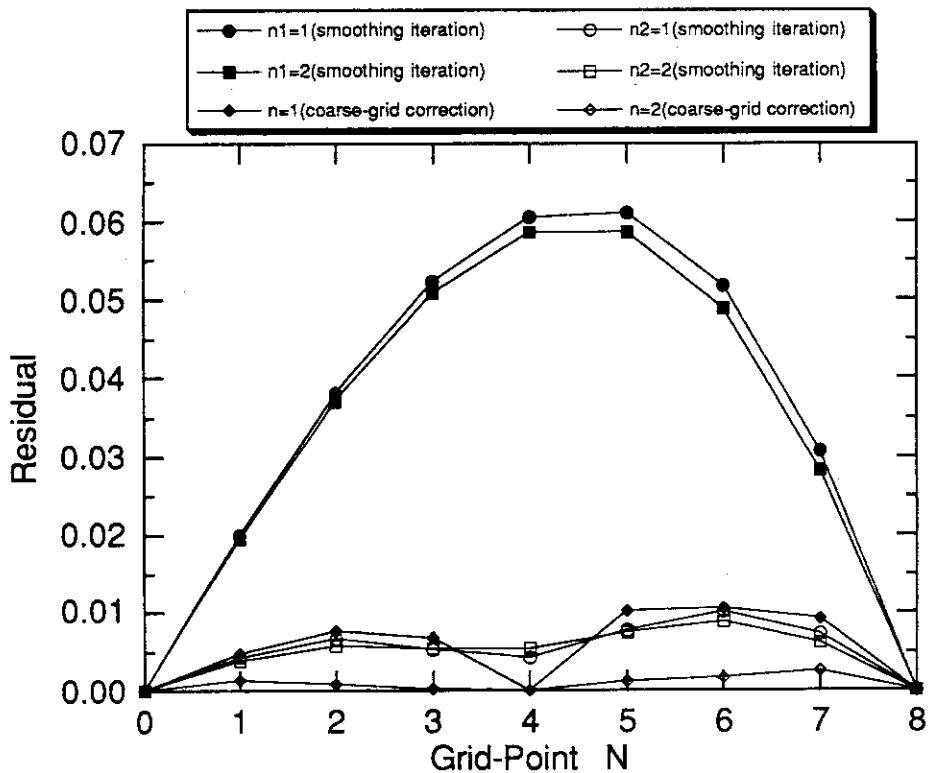


図 2 iスティックでのMGMのフローチャート

図3 TGMによる残差の分布 ( $N_f=7$ ,  $I_{\max}=2$ ,  $\omega=0.5$ ,  $\kappa=0.9$ )

- n1=1,2 : 1回目のTGMでのdamped Jacobi法の反復回数
- n=1 : 1回目coarse-grid correction
- n2=1,2 : 2回目のTGMでのdamped Jacobi法の反復回数
- n=2 : 2回目の coarse-grid correction

damped Jacobi法を1回か2回行うだけで残差の高周波数成分が取り除かれ、残差がほとんど変化しなくなっている。その平滑化ステップ後のcoarse-grid correctionで残差が大幅に減少し、低周波数成分が取り除かれている。

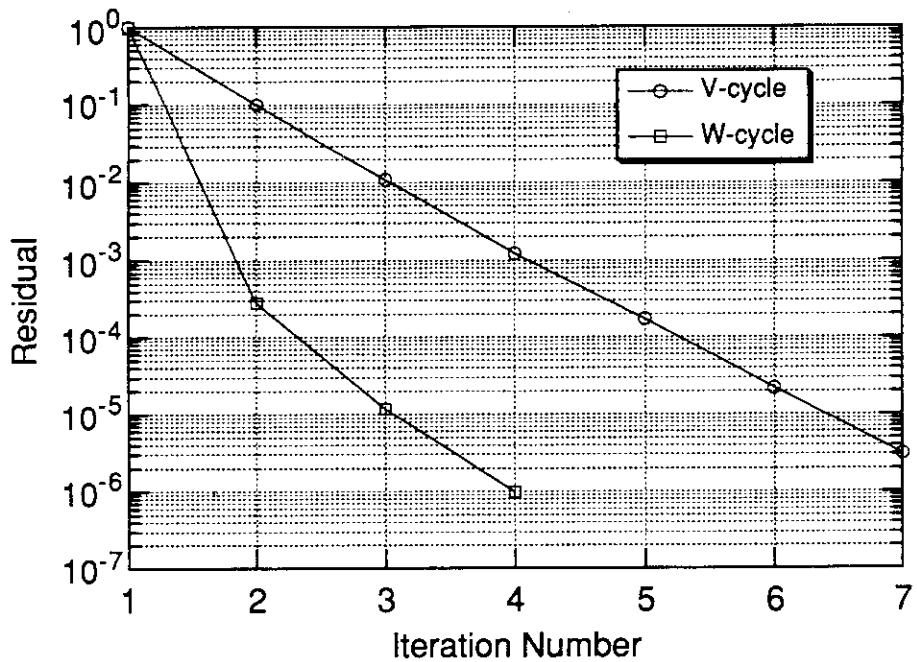


図4 MGMの反復回数に対する V-cycleとW-cycleの残差  
( $N=127$ ,  $I_{\max}=6$ ,  $\omega=0.5$ ,  $\kappa=0.5$ )

V-cycleの残差は反復回数の増加に対して一定の縮小率で減少している。W-cycleのそれは反復回数が1回目から2回目で急激に減少し、2回目以後一定の縮小率で減少している。

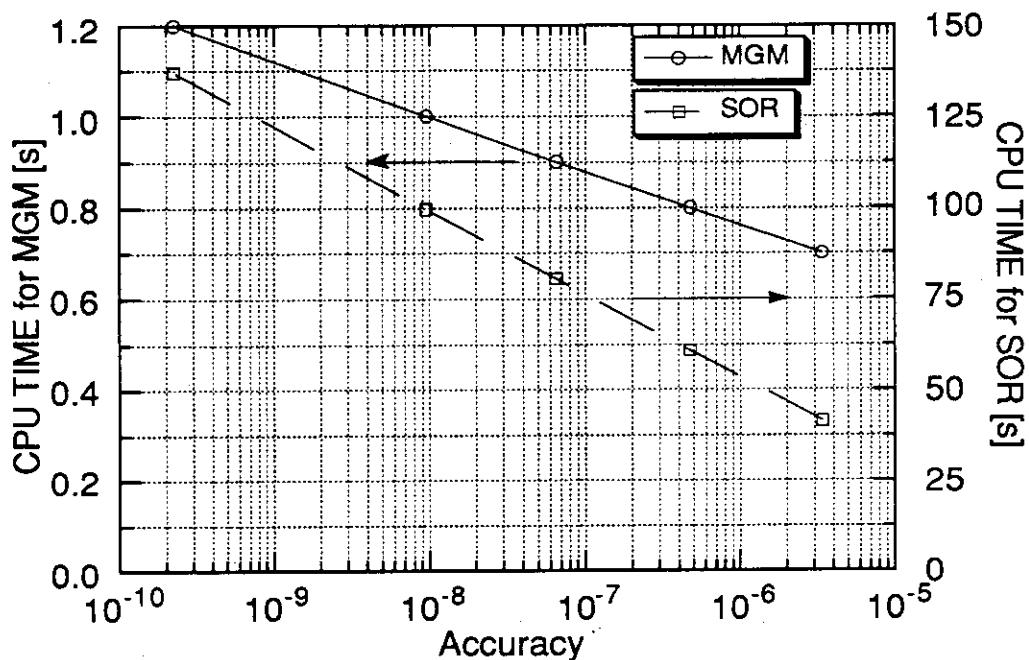


図5 MGMとSOR法の精度に対するCPU時間の比較  
( $N=511$ ,  $I_{\max}=8$ ,  $\omega=0.5$ ,  $\kappa=0.5$ ,  $\omega_s=1.7$ )

同じ精度に対してMGMはSOR法よりもCPU時間が非常に早い。例えば、精度が $10^{-8}$ ではMGMはSOR法よりもCPU時間が約100分の1短い。

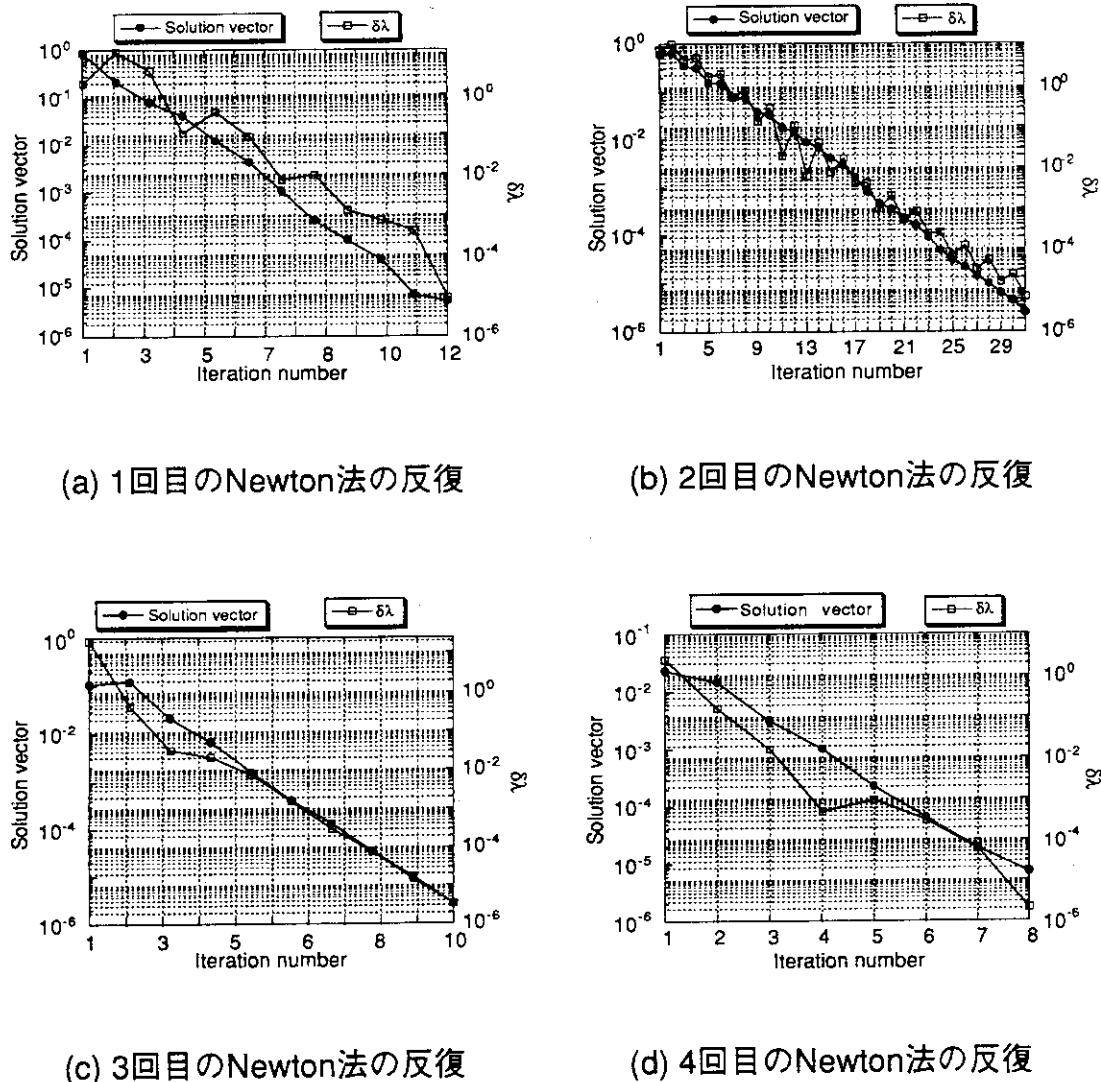


図6 MGM ( $l=8 \rightarrow l=0$ , V-cycle) の反復回数に対する反復解( $\bar{x}^{(n+1)}, \delta\lambda$ )の残差  
 $(N_p=511, \lambda^{(0)}=8.0, \varepsilon=10^{-10}, \varepsilon_{MGM}=10^{-5}, \kappa=0.5, \omega=0.5)$

$\bar{x}^{(n+1)}$ の残差はほとんど一定の縮小率で減少している。一方、 $\delta\lambda$ の残差はNewton法の反復の1回目から2回目まで振動しながら減少し、3回目以後振動は小さくなっている。

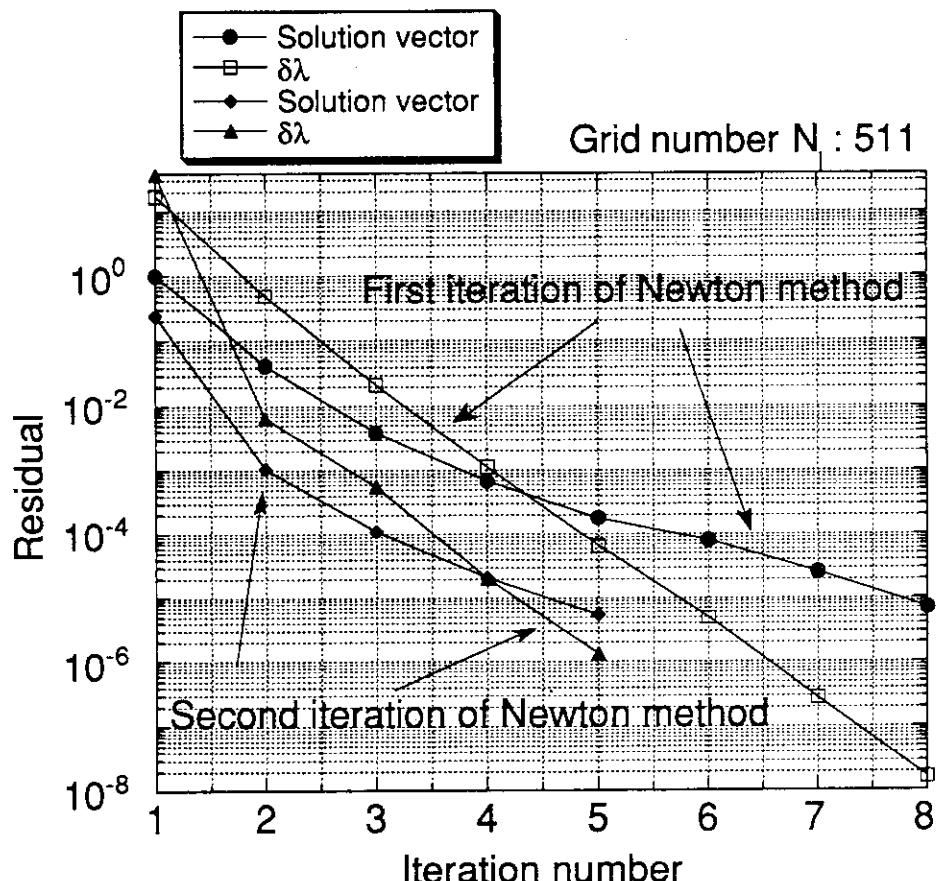


図7 5GM ( $l=8 \rightarrow l=4$ , V-cycle) の反復回数に対する反復解( $\bar{x}^{(n+1)}, \delta\lambda$ )の残差  
( $N=511, \lambda^{(0)}=8.0, \varepsilon=10^{-10}, \varepsilon_{5GM}=10^{-5}, \kappa=0.5, \omega=0.5$ )

反復解( $\bar{x}^{(n+1)}, \delta\lambda$ )の残差は、5GMの反復回数に対してほとんど一定の縮小率で減少し、反復回数も8回から5回に減少している。

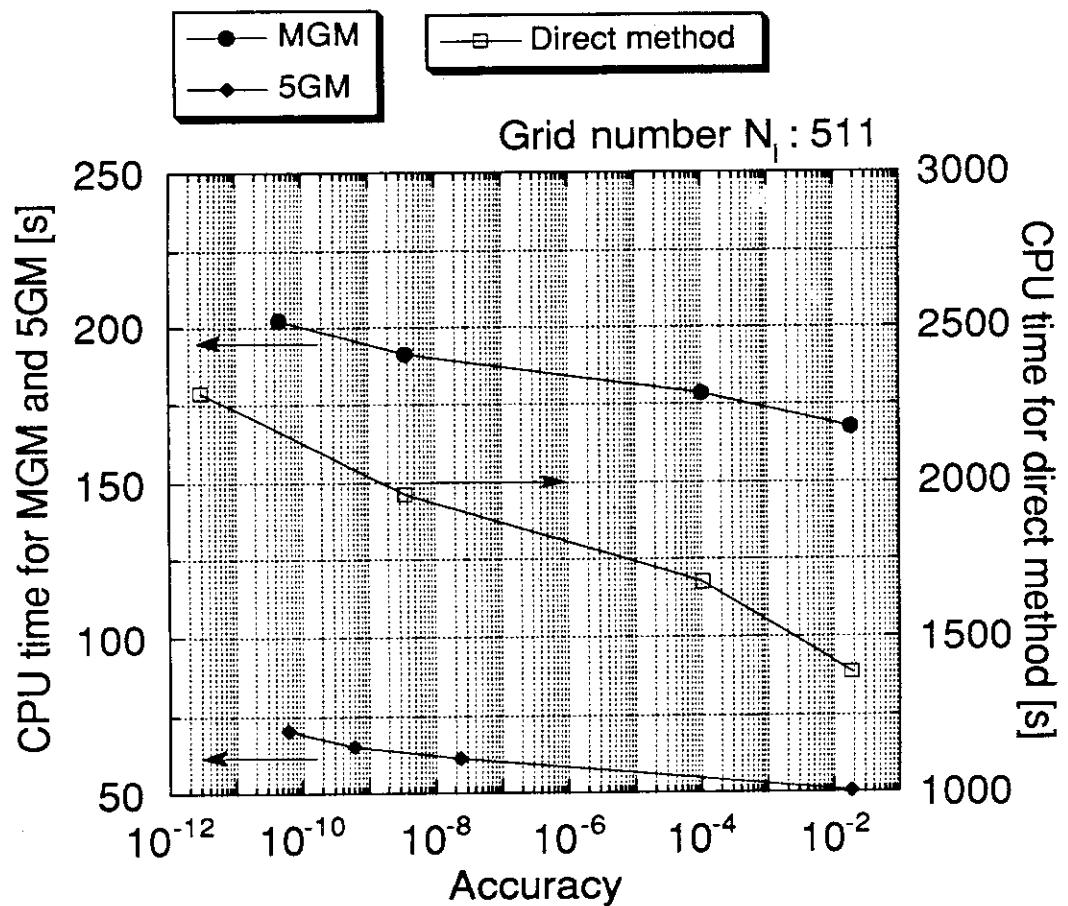


図8 MGM、5GM及び直接法の反復解( $\bar{x}^{(n)}, \lambda^{(n)}$ )の精度に対するCPU時間の依存性  
 $(N_1=511, \lambda^{(0)}=8.0, \varepsilon_{MGM}=10^{-5}, \varepsilon_{5GM}=10^{-5}, \kappa=0.5, \omega=0.5)$

MGMは直接法と比べるとCPU時間が約10分の1短く、5GMは直接法と比べるとCPU時間が約30分の1短い。

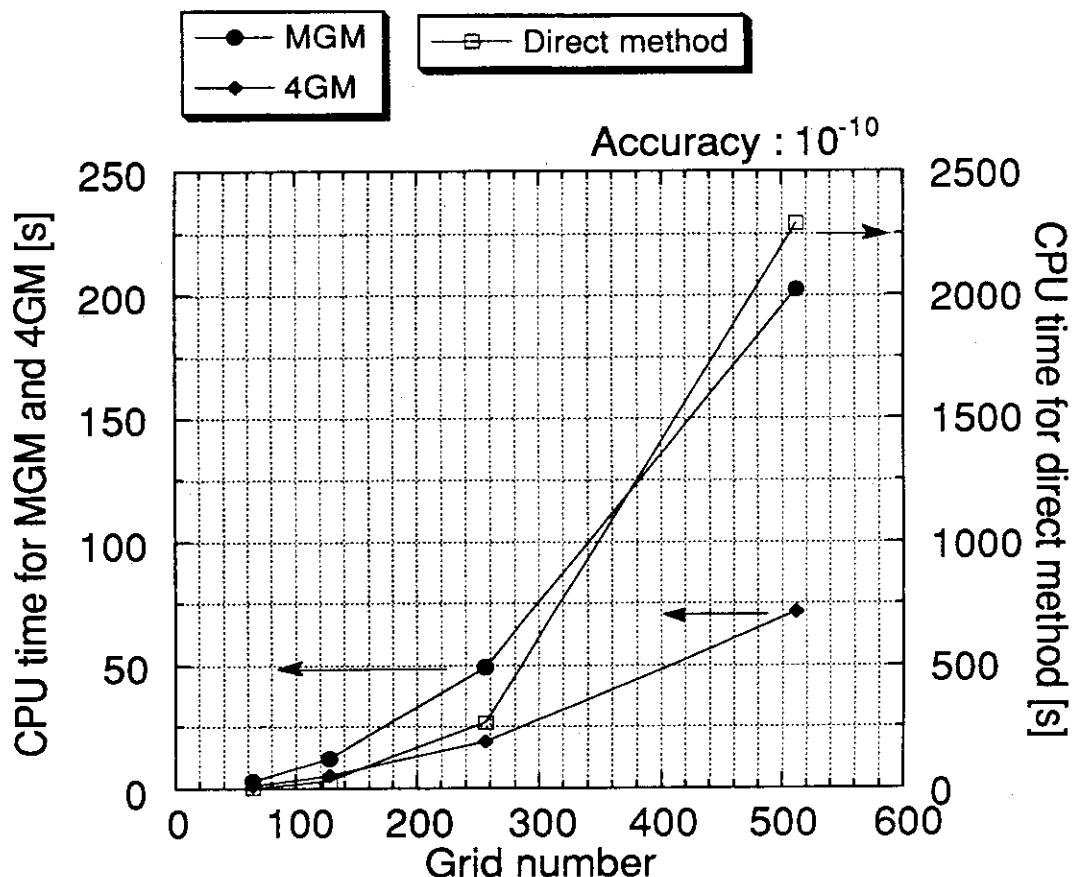


図9 MGM、4GM ( $I=8 \rightarrow I=5$ , V-cycle) 及び直接法のグリッド数に対するCPU時間の依存性 ( $\lambda^{(0)}=8.0$ ,  $\epsilon=10^{-10}$ ,  $\epsilon_{MGM}=10^{-5}$ ,  $\epsilon_{4GM}=10^{-5}$ ,  $\kappa=0.5$ ,  $\omega=0.5$ )

グリッド数が多くなると、直接法はMGMや4GMと比べると圧倒的にCPU時間がかかる。特に $N=511$ のときにはMGMは直接法よりもCPU時間が約10分の1短く、4GMは直接法と比べるとCPU時間が約30分の1短い。

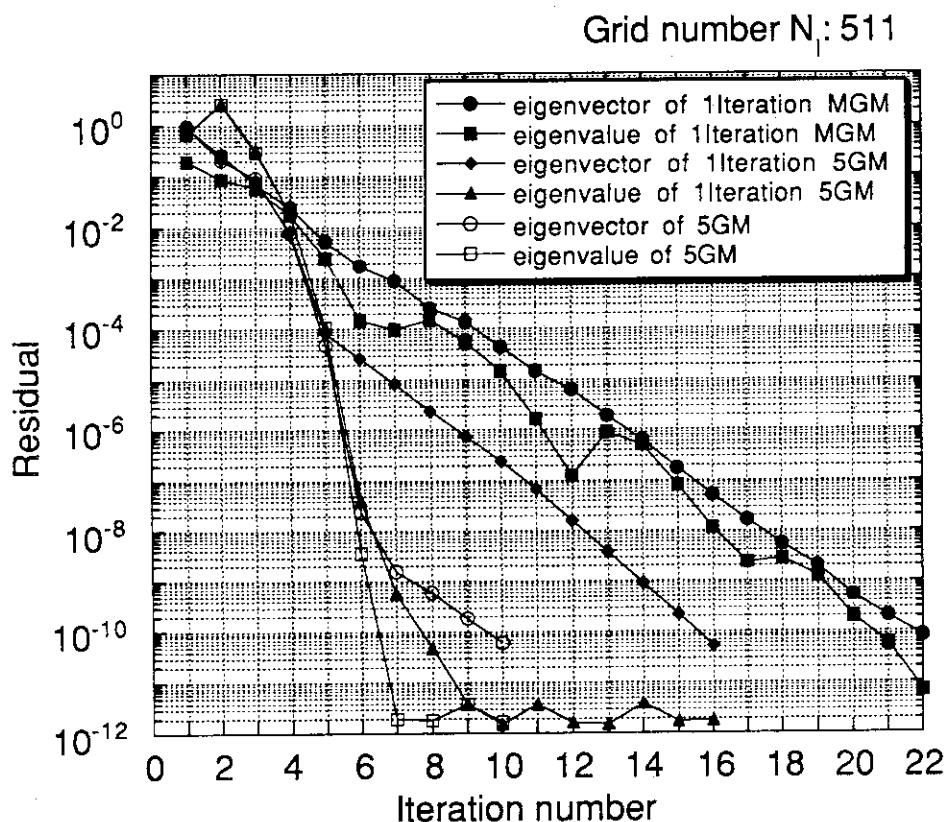


図10 1 Iteration MGM、1 Iteration 5GM及び通常の5GMのNewton法の反復回数に対する反復解( $\bar{x}^{(n)}, \lambda^{(n)}$ )の残差 ( $N_x=511, \lambda^{(0)}=8.0, \varepsilon=10^{-10}, \varepsilon_{5GM}=10^{-5}, \kappa=0.5, \omega=0.5$ )

1 Iteration MGMを用いたときの解は22回の反復回数で収束し、このときの  $\lambda^{(n)}$  の残差は振動しながら減少している。1 Iteration 5GMを用いたときの解は16回で収束し、1 Iteration MGMで見られる  $\lambda^{(n)}$  の残差の振動は小さくなっている。通常の5GMを用いると解は10回で収束し、1番収束率が良い。

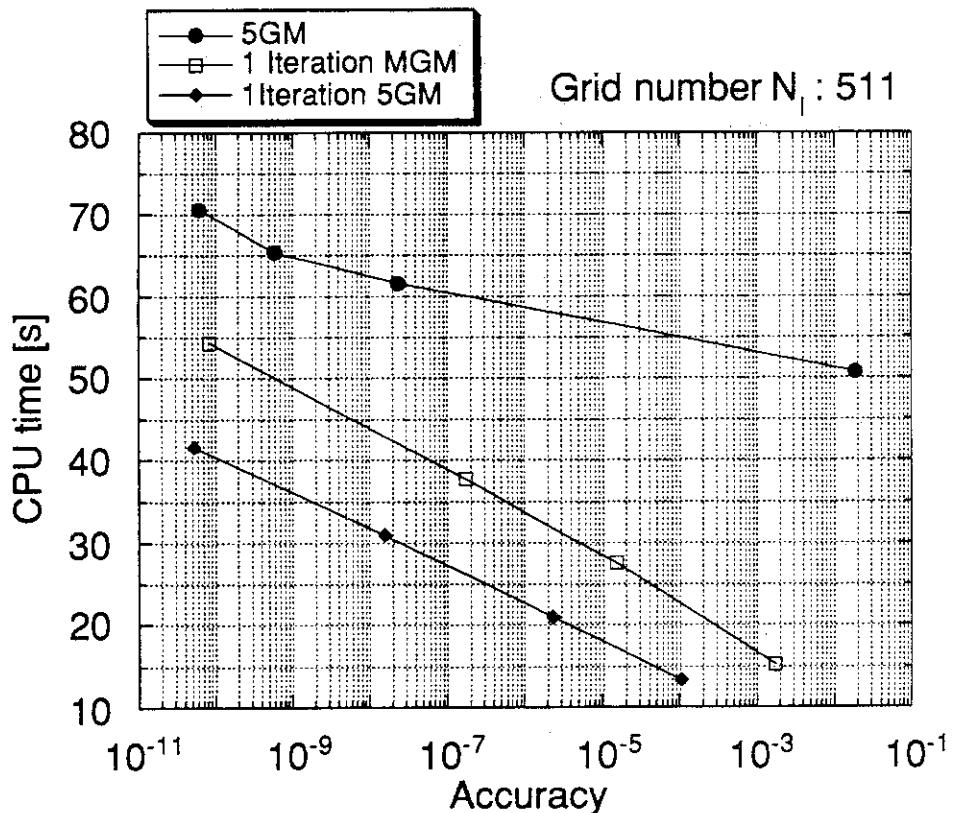


図11 1 Iteration MGM、1 Iteration 5GM及び通常の5GMの反復解( $\bar{x}^{(n)}, \lambda^{(n)}$ )の精度に対するCPU時間の依存性 ( $N=511, \lambda^{(0)}=8.0, \varepsilon_{\text{SGM}}=10^{-5}, \kappa=0.5, \omega=0.5$ )

精度が  $10^{-10}$  では1 Iteration 5GMは1 Iteration MGMに比べて約12秒、5GMに比べて約30秒CPU時間が短く、最も収束が速い。

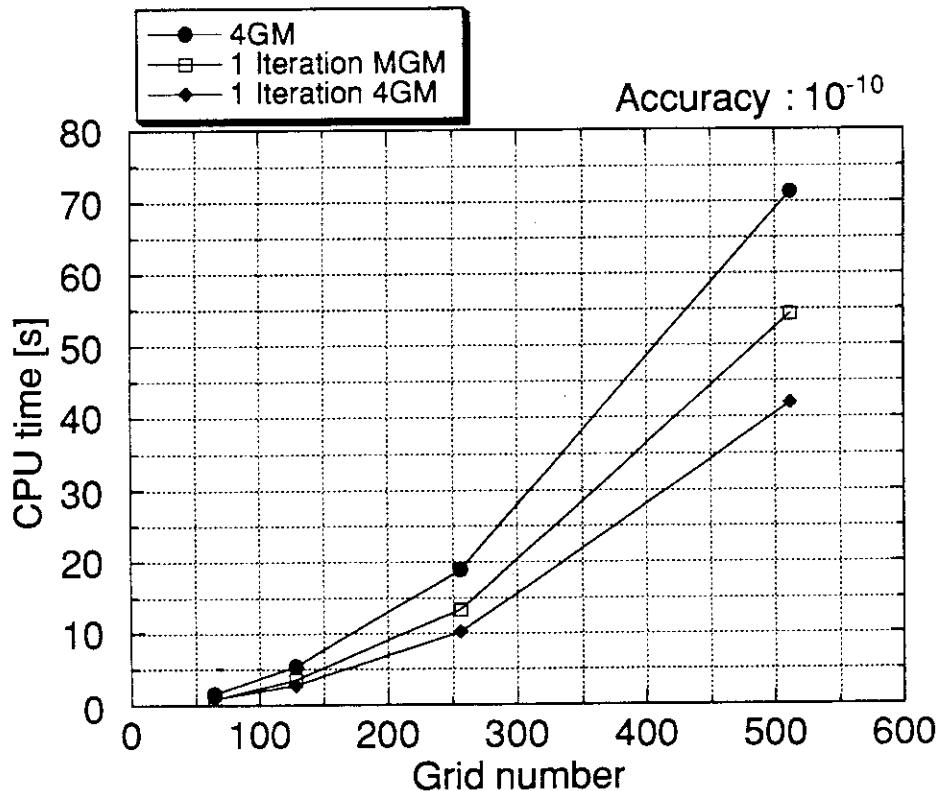


図12 1Iteration MGM, 1Iteration 4GM及び通常の4GMのグリッド数に対するCPU時間の依存性 ( $\lambda^{(0)}=8.0$ ,  $\varepsilon=10^{-10}$ ,  $\varepsilon_{4GM}=10^{-5}$ ,  $\kappa=0.5$ ,  $\omega=0.5$ )

特に $N_g=511$ のときには1Iteration 4GMは、1Iteration MGMよりも約1.3秒、4GMに比べて約3.0秒CPU時間が短く、最も収束が速い。

## 付録 固有値問題に伴う特異方程式の解法

拡大行列を疎行列として扱える反復解法のアルゴリズムは、固有値問題に伴う特異方程式を解くことに適用できることを示す。第2節で述べた行列  $A$  がエルミート行列である固有値問題

$$A\vec{x}_0 = \lambda\vec{x}_0 \quad (\text{A-1})$$

に伴う特異方程式:

$$\begin{cases} (A - \lambda I)\vec{x} = \vec{b}, \\ (\vec{x}, \vec{x}_0) = 0 \end{cases} \quad (\text{A-2})$$

を導く変分問題を考える。方程式 (A-2) に対する汎関数  $\mathcal{F}(\vec{x}, \nu)$  は

$$\mathcal{F}(\vec{x}, \nu) = \frac{1}{2}(\vec{x}, (A - \lambda I)\vec{x}) - (\vec{x}, \vec{b}) + \nu(\vec{x}, \vec{x}_0) \quad (\text{A-3})$$

で表せる。ここで、 $\nu$  は Lagrange の未定定数である。式 (A-3) の変分から  $\vec{x}$ ,  $\nu$  に対する 1 次方程式:

$$\begin{cases} (A - \lambda I)\vec{x} + \nu\vec{x}_0 = \vec{b}, \\ (\vec{x}, \vec{x}_0) = 0 \end{cases} \quad (\text{A-4})$$

を得る。方程式 (A-4) を行列形式で書き直すと

$$\begin{bmatrix} A - \lambda^{(n)} I & \vec{x}_0 \\ \vec{x}_0^t & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \vec{x} \\ \nu \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \vec{b} \\ 0 \end{bmatrix} \quad (\text{A-5})$$

となる。 $\vec{b}$  は可解条件を満たすため、方程式 (A-4) は  $\nu = 0$  を解にもつ。したがって、方程式 (A-4) の解と方程式 (A-2) の解は一致する。方程式 (A-5) の拡大行列は、方程式 (9) の拡大行列と同じ形式をしているため、拡大行列を疎行列として扱える反復解法のアルゴリズムは、方程式 (A-2) に適用することができる。