FDM流れ解析　No.2
SOR法及びCG法プログラム

2007年6月

後　保範 (東京工芸大学)

目次

1. Gauss-Seidel法
2. SOR法
3. 並列用SOR法
4. CG法の導出と性質
5. CG法プログラム
6. ICCG法
7. MICCG法

1. Gauss-Seidel法

$Ax=b$の解xを反復計算する

$A=\{a_{ij}\}$, $x=\{x_i\}$, $b=\{b_i\}$

Gauss-Seidel法では下記を反復計算

$$for \quad k = 1; n$$

$$x_k = \left(b_k - \sum_{i=1}^{k-1} a_{ki} x_i - \sum_{i=k+1}^{n} a_{ki} x_i \right) / a_{kk}$$

2. SOR法

SOR法は下記を収束まで反復計算する

$\omega\,(1<\omega<2)$は加速係数である。

$$for\ \ k=1;n$$

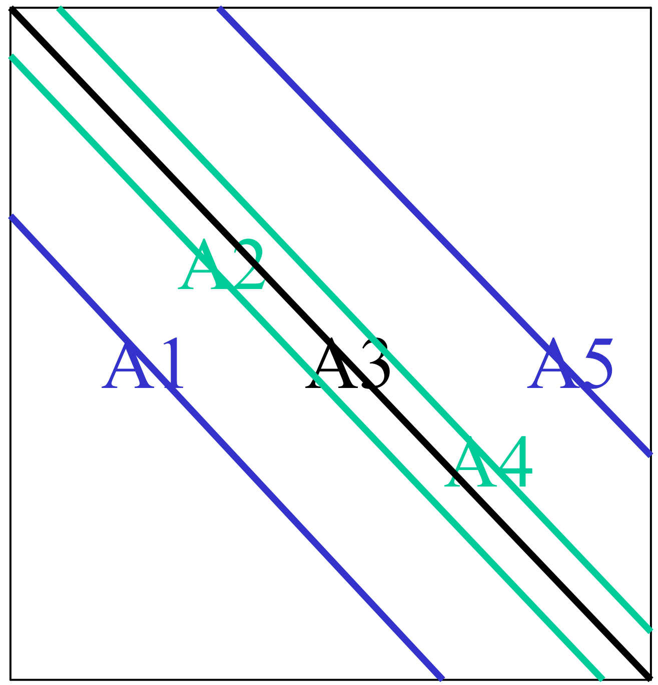
$$r\ \ =\left(b-\sum_{i=1}^{k-1}a_{ki}x_i-\sum_{i=k+1}^{n}a_{ki}x_i\right)/\,a_{kk}-x_k$$

$$x_k=x_k+\omega\,r$$

2.1 2次元差分法用SOR法

- 下記を $\|r\|_2 \leq \varepsilon$ (収束条件) となるまで反復計算

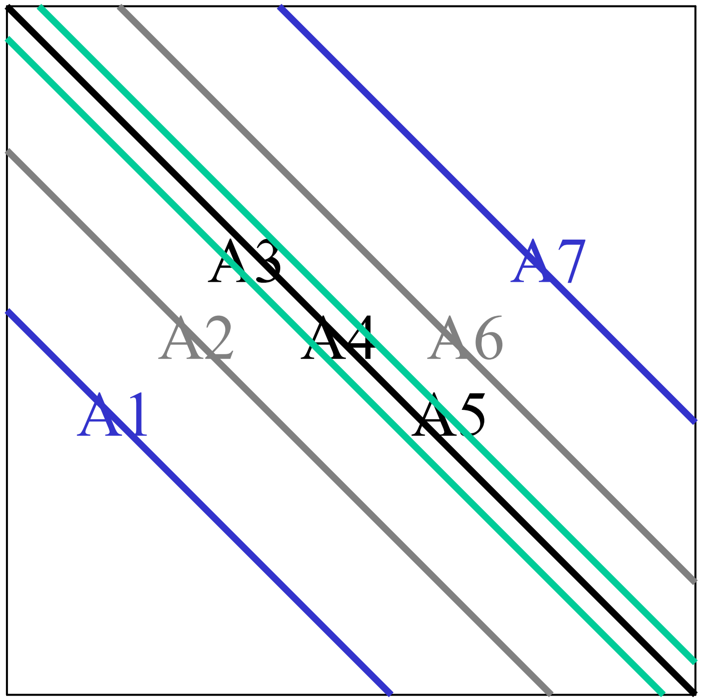
```
for j=1;ny
 for i=1;nx
  r = (b(i,j) - A1(i,j)*x(i,j-1)
           - A2(i,j)*x(i-1,j)
           - A4(i,j)*x(i+1,j)
           - A5(i,j)*x(i,j+1) )
           /A3(i,j) - x(i,j)
   x(i,j) = x(i,j) + ω*r
```



2.2 3次元差分法用SOR法

- 下記 $\|r\|_2 \le \varepsilon$ (収束条件) となるまで反復計算

```
for k=1,nz
 for j=1,ny
  for i=1,nx
    r = (b(i,j,k) - A1(i,j,k)*x(i,j,k-1)
              - A2(i,j,k)*x(i,j-1,k)
              - A3(i,j,k)*A(i-1,j,k)
              - A5(i,j,k)*A(i+1,j,k)
              - A6(i,j,k)*A(i,j+1,k)
              - A7(i,j,k)*A(i,j,k+1) )
              /A4(i,j,k) - x(i,j,k)
     x(i,j,k) = x(i,j,k) + ω*r
```



3. 並列用SOR法

- SOR法が並列化不可の理由(2次元FDM)

  x(i,j)の計算に

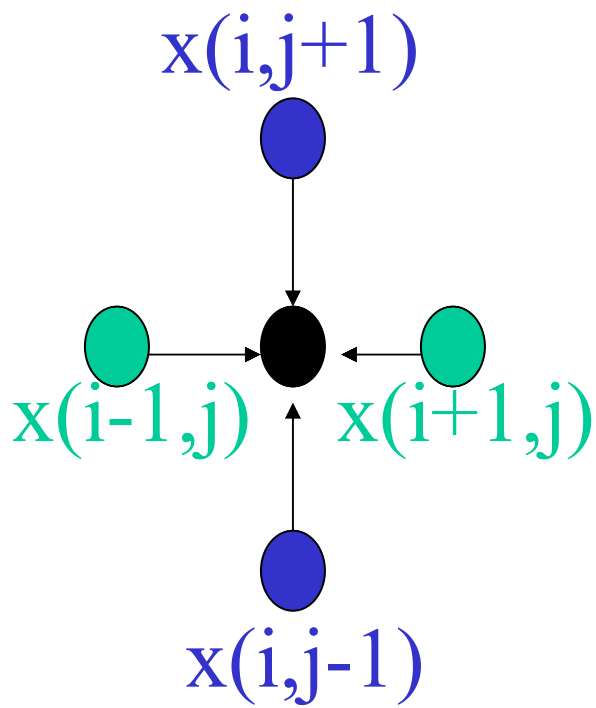
  x(i-1,j),x(i+1,j)

  x(i,j-1),x(i,j+1)

  の4点が関与

  iの順でもjの順でも直前

  に計算したものを利用



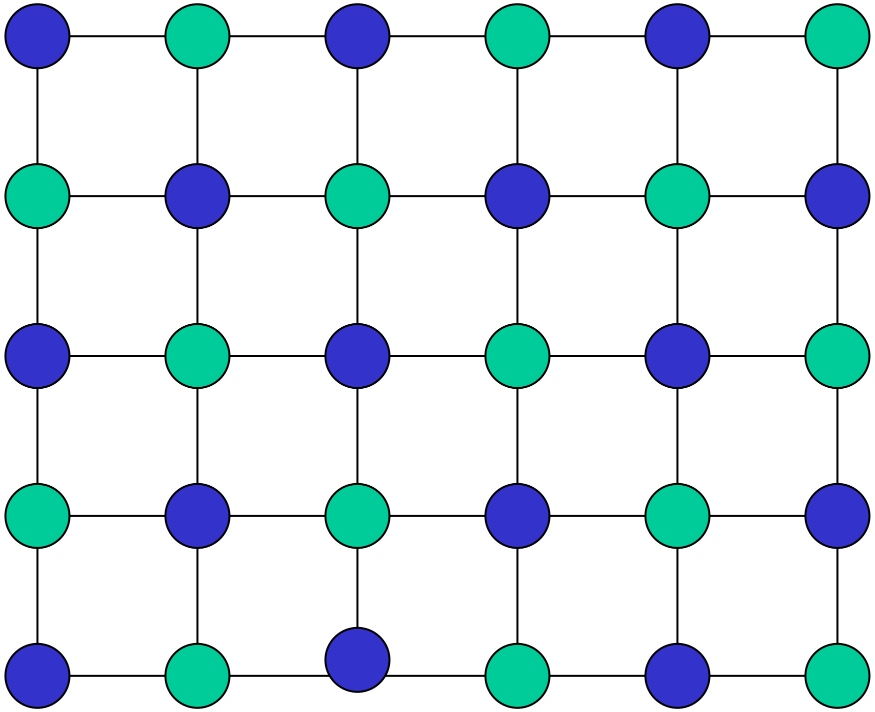
3.1 Even-Odd SOR法

- Even-Odd SOR法の計算順序(2次元)

と

を交互に

計算する



3.2 並列SOR法プログラム(2次元)

```
for j=1,ny
   for i=mod(j-1,2)+1,nx,2
      x(i,j) = 差分計算式(●の格子点)

for j=1,ny
   for i=mod(j,2)+1,nx,2
      x(i,j) = 差分計算式(●の格子点)
```

4. CG法の導出と性質

- 導出条件(k段からk+1段への反復)

(1) 下記2ステップで計算

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k$$

$$p_{k+1} = r_{k+1} + \beta_k p_k$$

(2) αの導出

$F(x_{k+1})=F(r_{k+1})=(r_{k+1},A^{-1}r_{k+1})$を最小

(3) βの導出

$(p_{k+1},Ap_k)=0$、即ちp_{k+1}とp_kはA直交

4.1 α計算式の算出

$$F(r_{k+1}) = (b - Ax_{k+1}, A^{-1}(b - Ax_{k+1}))$$

$$= (b, A^{-1}b) - 2(b, x_{k+1}) + (x_{k+1}, Ax_{k+1})$$

$$= (b, A^{-1}b) - 2(b, x_k) + 2\alpha_k(b, p_k) + (x_k, Ax_k)$$

$$+ 2\alpha_k(p_k, Ax_k) + \alpha_k^2(p_k, Ap_k)$$

$F(r_{k+1})$を最小にする、即ち$\partial F(r_{k+1}) / \partial\alpha_k = 0$

これから、次式が得られる。

$$-2(b, p_k) + 2(p_k, Ax_k) + 2\alpha_k(p_k, Ap_k) = 0$$

従って、α_kは次のようになる。

$$\alpha_k = \frac{(p_k, b) - (p_k, Ax_k)}{(p_k, Ap_k)} = \frac{(p_k, r_k)}{(p_k, Ap_k)}$$

4.2 β 計算式の算出

$$
\begin{aligned}
(p_{k+1}, Ap_k) &= (r_{k+1} + \beta_k p_k, Ap_k) \\
&= (r_{k+1}, Ap_k) + \beta_k (p_k, Ap_k) \\
&= 0
\end{aligned}
$$

これより、β_kが次のように定まる。

$$
\beta_k = \frac{-(r_{k+1}, Ap_k)}{(p_k, Ap_k)}
$$

4.3 CG法の性質

- 各種の直交性

$(p_i, Ap_j) = 0 \quad (i \neq j)$; 共役直交性

$(r_i, r_j) = 0 \quad (i \neq j)$; 残差の直交性

$(r_i, Ap_j) = 0 \quad (i \neq j, i \neq j+1)$; 三重対角性

- pとrの関係

$$(p_i, r_j) = \begin{cases} 0 & (i < j) \\ (r_j, r_j) & (i \geq j) \end{cases}$$

$$(r_i, Ap_i) = (p_i, Ap_i)$$

4.4 n回で収束する理由

- n次元の連立一次方程式Ax=bは数学的には最大n回の反復で収束する。
- その理由は残差ベクトルrが

$$(r_i, r_j) = 0 \quad i \neq j$$

となるため。n次元のベクトルは n本以上の1次独立なベクトルは存在しない。
- ただし、この仮定は数値計算では丸め誤差のため成立しない。

4.5 CG法の計算式(No.1)

初期値x_0を用意する.

$p_0 = r_0 = b - Ax_0$

$k = 0,1,2,\cdots$と収束するまで反復する.

$$\alpha_k = (p_k, r_k)/(p_k, Ap_k)$$

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k, \quad r_{k+1} = r_k - \alpha_k Ap_k$$

$$\beta_{k+1} = -(r_{k+1}, Ap_k)/(p_k, Ap_k)$$

$$p_{k+1} = r_{k+1} + \beta_k p_k$$

4.6 計算式の一部変更

- 変更後のほうが計算量が少ない
  一方，直交性は変更前の方が良い
- α の計算式

$$\alpha_k = \frac{(p_k, r_k)}{(p_k, Ap_k)} = \frac{(r_k, r_k)}{(p_k, Ap_k)}$$

- β の計算式 $r_{k+1} = r_k - \alpha_k A p_k$ 等を使用

$$\beta_k = \frac{-\alpha_k (r_{k+1}, Ap_k)}{\alpha_k (r_k, Ap_k)} = \frac{(r_{k+1}, r_k) - (r_{k+1}, \alpha_k A p_k)}{(r_k, r_{k+1}) + \alpha_k (r_k, Ap_k)} = \frac{(r_{k+1}, r_{k+1})}{(r_k, r_k)}$$

4.7 CG法の計算式(No.2)

初期値x_0を用意する.

$$p_0 = r_0 = b - Ax_0$$

$k = 0,1,2,\cdots$と収束するまで反復する.

$$\alpha_k = (r_k, r_k)/(p_k, Ap)$$

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k, \quad r_{k+1} = r_k - \alpha_k A p_k$$

$$\beta_{k+1} = (r_{k+1,} r_{k+1})/(r_k, r_k)$$

$$p_{k+1} = r_{k+1} + \beta_k p_k$$

5. CG法プログラム (No.1)

反復計算で $Ax = b$ の解 x を求める.

$p = r = b - Ax$,　　　　　x は初期値

以下 $\|r\|_2 \le \varepsilon$ (収束条件)となるまで反復する.

$q = Ap$,　$\lambda = (p, q)$,　$\alpha = (p, r) / \lambda$

$x = x + \alpha p$,　$r = r - \alpha q$

$\beta = -(r, q) / \lambda$

$p = r + \beta p$,

5.1 CG法プログラム (No.2)

反復計算で $Ax = b$の解xを求める.

$p = r = b - Ax$,　　　　　xは初期値

$\lambda_0 = (r, r)$

以下$\|r\|_2 \le \varepsilon$(収束条件)となるまで反復する.

$q = Ap$,　　$\alpha = \lambda_0 /(p, q)$

$x = x + \alpha p$,　$r = r - \alpha q$

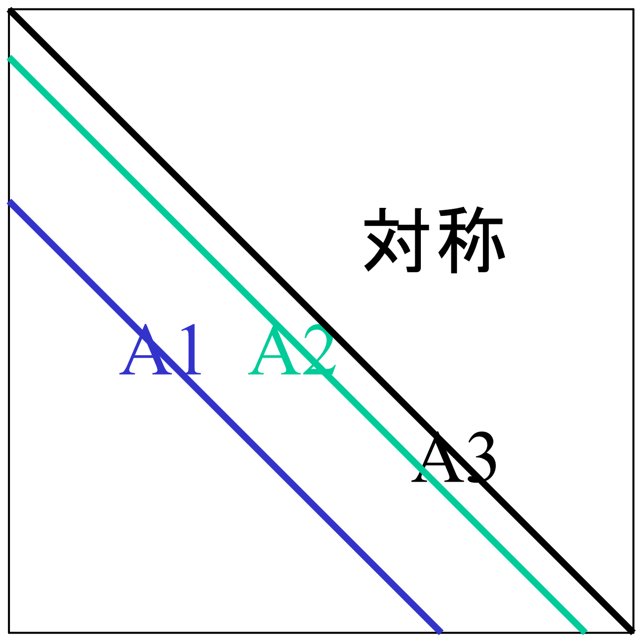
$\lambda_1 = (r, r)$,　$\beta = \lambda_1 / \lambda_0$

$p = r + \beta p$,　$\lambda_0 = \lambda_1$

5. 2 q=Apの計算(2次元)

- q=Apの計算

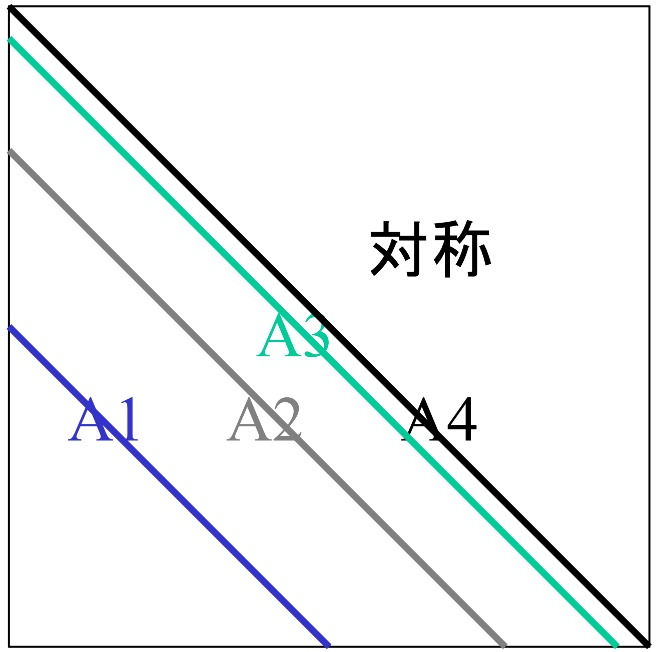
```
for j=1,ny
  for i=1,nx
    q(i,j)=A1(i,j)*p(i,j-1)
           +A2(i,j)*p(i-1,j)
           +A3(i,j)*p(i,j)
           +A2(i+1,j)*p(i+1,j)
           +A1(i,j+1)*p(i,j+1)
```



5. 3 q=Apの計算(3次元)

- q=Apの計算

```
for k=1,nz
 for j=1,ny
  for i=1,nx
   q(i,j,k)=A1(i,j,k)*p(i,j,k-1)
          +A2(i,j,k)*p(i,j-1,k)
          +A3(i,j,k)*P(i-1,j,k)
          +A4(i,j,k)*P(i,j,k)
          +A3(i+1,j,k)*p(i+1,j,k)
          +A2(i,j+1,k)*p(i,j+1,k)
          +A1(i,j,k+1)*P(i,j,k+1)
```



6. ICCG法

- 今回省略
- 必要に応じて、作成し説明する

7. MICCG法

- 今回省略
- 必要に応じて作成し説明する