数理解析研究所講究録 1265 巻 2002 年 39-44

不定値対称行列に対する共役勾配法の収束について

九州大学 大学院数理学研究院 鈴木 厚 (Atsushi Suzuki) *
田端 正久 (Masahisa Tabata) †
Department of Mathematical Sciences,
Kyushu University, Fukuoka 812-8581, Japan

概要

共役勾配 (CG) 法は, 正定値対称行列からなる連立方程式の解法として広く用いられている. 非圧縮流れの有限要素法による離散問題では, 正, 負, 零固有値を持つ一般の対称行列を係数行列に持つ連立方程式を解く必要がある. この問題を解くために, 一般の対称行列に対する共役勾配 (CG) 法の実行可能性について考える. CG 法が破綻しないための必要十分条件を示し, ほとんどすべての初期値に対して CG 法は破綻なく実行でき解が求められることを示す. ある遅い非圧縮流れ問題から得られる連立方程式に対する数値実験結果を示す.

1 はじめに

共役勾配 (CG) 法は, 正定値対称行列からなる連立方程式の解法として広く用いられている. CG 法は正負固有値を持つ対称行列に対しても, "破綻" しなければ適用可能であることが知られている [7]. また, 半正定値の場合にも適用可能である [5].

本稿では, 一般の対称行列に対する CG 法の実行可能性について考える. CG 法は非対称行列に対する双共役勾配 (BiCG) 法 [1] において, 行列を対称なものに制限し, 補助初期残差を初期残差に選択したものに等しい. このため [4, 6] による正則な行列に対する BiCG 法の破綻条件を適用することができる. CG 法の破綻条件はモーメント行列を用いて記述され, ほとんどすべての初期値に対して破綻しないことがわかる.

遅い非圧縮流れを記述するストークス問題の有限要素近似から得られる行列は対称ではあるが, 正, 負, 零固有値を持つ. この問題での CG 法の有効性を数値実験により示す.

2 一般対称行列からなる連立方程式

A を $N\times N$ 実対称行列とし, $\dim R(A)=M,\ 0<M\leq N$ とする. $\vec{b}\in R(A)$ なるベクトルに対し, 連立方程式

$$A\vec{x}=\vec{b} \tag{1}$$

を考える. この連立方程式の解は $R(A)$ で一意的であり, $\vec{x}=A^{\dagger}\vec{b}$ となる. ここに, $A^{\dagger}$ は A の一般化逆行列である.

*email : asuzuki@math.kyushu-u.ac.jp
†email : tabata@math.kyushu-u.ac.jp

定義 1 $\vec{V}$ を $\mathbb{R}^N$ の部分空間 ($\dim\vec{V} = m$) とする．"A が $\vec{V}$ で正則である" とは $m \times m$ 行列 $[(A\vec{v}^{(j)}, \vec{v}^{(i)})]$ が正則であるときを言う．ここに，$\{\vec{v}^{(i)}\}_{i=1,\ldots,m}$ は $\vec{V}$ の基底である．このとき，問題："任意の $\vec{v} \in \vec{V}$ に対して $(A\vec{x}, \vec{v}) = (\vec{b}, \vec{v})$ となる $\vec{x} \in \vec{V}$ を求めよ"，は一意解を持つ．その解を "(1) の $\vec{V}$ での解" と呼ぶことにする．

3　CG 法アルゴリズム

次の CG 法アルゴリズム [3, 7] を一般の対称行列 A からなる連立方程式 (1) に適用する．

アルゴリズム 1

$$
\begin{aligned}
&\vec{x}_0 \in R(A) \text{ を初期ベクトルとする.}\\
&\vec{r}_0 := \vec{b} - A\vec{x}_0\,;\\
&\vec{p}_0 := \vec{r}_0\,;\\
&\text{do } n = 0, 1, \ldots, \text{until } \vec{r}_n = 0\\
&\quad \alpha_n := (\vec{r}_n, \vec{r}_n)/(A\vec{p}_n, \vec{p}_n)\,;\\
&\quad \vec{x}_{n+1} := \vec{x}_n + \alpha_n \vec{p}_n\,;\\
&\quad \vec{r}_{n+1} := \vec{r}_n - \alpha_n A\vec{p}_n\,;\\
&\quad \beta_n := (\vec{r}_{n+1}, \vec{r}_{n+1})/(\vec{r}_n, \vec{r}_n)\,;\\
&\quad \vec{p}_{n+1} := \vec{r}_{n+1} + \beta_n \vec{p}_n\,;\\
&\text{enddo.}
\end{aligned}
$$

$n \geq 1$ に対しクリロフ部分空間を定義する:

$$K_n(A, \vec{r}_0) := \mathrm{span}[\vec{r}_0,\ A\vec{r}_0,\ \ldots,\ A^{(n-1)}\vec{r}_0]\,.$$

N_0 を $K_n(A, \vec{r}_0) = K_{n+1}(A, \vec{r}_0)$ を満たす最小の数とする．$\{\lambda_i\}_{i=1,\ldots,N}$ を A の固有値，$\{\vec{v}^{(i)}\}_{i=1,\ldots,N}$ を対応する 固有ベクトルとする．

命題 1 N_0 は $(\vec{r}_0, \vec{v}^{(i)}) \neq 0$ を満たすすべての i に対する固有値の集合 $\{\lambda_i\}$ で相異なるものの個数に等しい．

命題 2
1. A は $K_{N_0}(A, \vec{r}_0)$ で正則である．
2. $K_{N_0}(A, \vec{r}_0)$ での $A\vec{u} = \vec{r}_0$ の解は $A^{\dagger}\vec{r}_0$ に等しい．

CG 法の探索ベクトル $\vec{p}_n$，残差ベクトル $\vec{r}_n$ に対し次の関係が成立する．

補題 1 ある $n(\leq N_0)$ が存在し，すべての $0 \leq l < n$ に対して

$$(A\vec{p}_l, \vec{p}_l) \neq 0 \text{ かつ } \vec{r}_l \neq 0$$

が成立すれば, すべての $1 \leq m \leq n$ に対して次が成り立つ.

1. $(\vec{r}_m, \vec{z}) = 0 \quad (\forall \vec{z} \in K_m(A, \vec{r}_0))$.
2. $(A\vec{p}_m, \vec{z}) = 0 \quad (\forall \vec{z} \in K_m(A, \vec{r}_0))$.
3. $\mathrm{span}[\vec{r}_0, \vec{r}_1 \ldots, \vec{r}_m] = \mathrm{span}[\vec{p}_0, \vec{p}_1 \ldots, \vec{p}_m] = K_{m+1}(A, \vec{r}_0)$.

行列 A が $R(A)$ で正定値である場合, $(A\vec{p}_l, \vec{p}_l) > 0$ より, 探索ベクトルに対する仮定は満たされることに注意する. この補題よりが成り立つ.

補題 2 $0 \leq m < N_0$ に対して 1. と 2. は同値である.
1. $0 \leq \forall l \leq m$ に対し $(A\vec{p}_l, \vec{p}_l) \neq 0$ が成り立つ.
2. $0 \leq \forall l \leq m$ に対し A は $K_{l+1}(A, \vec{r}_0)$ で正則である.

アルゴリズム 1 の CG 法は非対称行列に対する BiCG 法において, 行列を対称なものに制限し, 補助初期残差を初期残差に選択したものに等しい. このため正則な行列に対する BiCG 法の破綻条件 [4, 6] と同等の破綻条件が得られる.

$1 \leq m \leq N_0$ に対し, $m \times m$ のモーメント行列 [6] を定義する.

$$[\mathcal{A}_m(\vec{r}_0)]_{ij} := (A^{(i+j-1)}\vec{r}_0, \vec{r}_0) \quad (1 \leq i, j \leq m).$$

補題 2 より, アルゴリズム 1 が破綻しないための必要十分条件を示す次の定理が成り立つ.

定理 1 $0 \leq m < N_0$ に対して 1. と 2. は同値である.
1. $0 \leq \forall l \leq m$ に対し $(A\vec{p}_l, \vec{p}_l) \neq 0$ が成り立つ.
2. $1 \leq \forall l \leq m+1$ に対し $\det \mathcal{A}_l(\vec{r}_0) \neq 0$ が成り立つ.

系 1 $1 \leq m \leq N_0$ に対して $\det \mathcal{A}_m(\vec{r}_0) \neq 0$ の時, CG 法は途中で破綻せず,

$$\vec{x}_{N_0} = A^\dagger(\vec{b} - A\vec{x}_0) + \vec{x}_0 = A^\dagger\vec{b}$$

となる. すなわち (1) の解を求めることができる.

4 CG 法が破綻しない初期値の選択

モーメント行列の行列式に対して次が成り立つ.

補題 3 すべての $1 \leq m \leq M$ に対し, $m \times m$ のモーメント行列の行列式に関して,

$$\det \mathcal{A}_m(\vec{y}) \neq 0 \tag{2}$$

がほとんどすべての $\vec{y} \in R(A)$ に関して成り立つ.

これは, 行列 A の固有値 λ_i と固有ベクトル $\vec{v}^{(i)}$ を用いて, モーメント行列の行列式を固有値 $\{\lambda_i\}$ の多項式で書きくだすことより示すことができる. また, 正則な実行列 A に対する BiCG 法が, 初期補助残差を初期残差に選ぶとき, ほとんどすべての初期値に対して破綻しないための十分条件が A が少なくとも 1 つの実固有値を持つことである [4] ことからもわかる.

定理 2 (1) に対する CG 法はほとんどすべての初期値に対して破綻せず, 解を求めることがで

5 有限要素離散化ストークス方程式

3 次元の有界領域 Ω 内で, 流速 u と圧力 p が

$$-2\nabla\cdot D(u)+\nabla p=f\,,\qquad \nabla\cdot u=0$$

を満し, 境界で斉次ディリクレ境界条件 ($u=0$) を課すストークス方程式を考える. $D(u)$ は変形速度テンソル, f は外力を表す既知関数である. $\mathcal{T}_h$ を $\bar{\Omega}$ の正則な四面体分割とする. ここに h は四面体要素の最大直径を表す. 近似領域を Ω_h, その境界を Γ_h とする. $S_h(\Omega_h)\subset H^1(\Omega_h)\cap C^0(\bar{\Omega}_h)$ を P1 要素からなる有限要素空間とし, 流速, 圧力に次の有限要素空間を導入する.

$$\begin{aligned}
X_h &:= S_h(\Omega_h)^3,\ \ M_h := S_h(\Omega_h),\\
V_h &:= \{v_h\in X_h\ ;\ v_h(P)=0\quad (\forall P\in\Gamma_h)\}\,,\\
Q_h &:= \{q_h\in M_h\ ;\ (q_h,\,1)_h=0\}\ .
\end{aligned}$$

ここに P は境界 Γ_h 上の節点である. $u_h, v_h\in X_h$ と $p_h, q_h\in M_h$ に対し, 次の双一次形式を定義する.

$$\begin{aligned}
a(u_h,v_h) &:= 2\int_{\Omega_h} D(u_h):D(v_h)\,dx,\\
b(v_h,q_h) &:= -(\nabla\cdot v_h,\,q_h)_h\,,\\
d_h(p,q) &:= \textstyle\sum_{K\in\mathcal{T}_h} h_K^2(\nabla p,\,\nabla q)_K\,.
\end{aligned}$$

h_K は要素 K の直径, $(\cdot,\cdot)_h$ は Ω_h での L^2 内積, または $(L^2)^3$ 内積, $(\cdot,\cdot)_K$ は K 上の L^2 内積である.

ペナルティー型安定化有限要素法 [2] による離散化ストークス方程式は, "任意の $(v_h,q_h)\in V_h\times Q_h$ に対し,

$$\begin{aligned}
a(u_h,v_h)+b(v_h,p_h) &= (f,\,v_h)_h\,,\\
b(u_h,q_h)-\delta d_h(p_h,q_h) &= 0
\end{aligned}$$

を満す $(u_h,p_h)\in V_h\times Q_h$ を求めよ", となる. ここに, 正定数 δ は安定化パラメータである.

$n_X:=\mathrm{dim}X_h$, $n_M:=\mathrm{dim}M_h$ とする. $\Lambda_\Gamma\subset\{1,\ldots,n_X\}$ ($\#\Lambda_\Gamma=n_\Gamma$) を境界 Γ_h 上の流速自由度に対応する基底関数の添字集合とする. 有限要素空間に対応する数ベクトル空間は

$$\begin{aligned}
\vec{X} &:= \mathbb{R}^{n_X}, &\quad \vec{V} &:= \{\vec{v}\in\vec{X}\ ;\ (\vec{v},\vec{e}^{(j)})=0\ (j\in\Lambda_\Gamma)\},\\
\vec{M} &:= \mathbb{R}^{n_M}, &\quad \vec{Q} &:= \{\vec{q}\in\vec{M}\ ;\ (M\vec{q},\vec{1})=0\}
\end{aligned}$$

となる. ここに $\vec{e}^{(j)}$ は標準基底 ($[\vec{e}^{(j)}]_i=\delta_{ij}$), $\vec{1}$ は $[\vec{1}]_i=1$ なるベクトルである. M は M_h での質量行列である. A, B, D を双一次形式 $a(\cdot,\cdot)$, $b(\cdot,\cdot)$, $d(\cdot,\cdot)$ に対応する剛性行列, $\vec{f}$ を外力 f に対応する荷重ベクトルとする. $\vec{Z}:=\vec{X}\times\vec{M}$ ($n_Z:=\mathrm{dim}\vec{Z}$), $\vec{Y}:=\vec{V}\times\vec{Q}$ ($n_Y:=\mathrm{dim}\vec{Y}$) とする. 有限要素離散化ストークス方程式の行列表現は, "任意の $(\vec{v},\vec{q})\in\vec{V}\times\vec{Q}$ に対し

$$\left(\begin{pmatrix}A & B^T\\ B & -\delta D\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\vec{u}\\ \vec{p}\end{pmatrix},\begin{pmatrix}\vec{v}\\ \vec{q}\end{pmatrix}\right)=\left(\begin{pmatrix}\vec{f}\\ 0\end{pmatrix},\begin{pmatrix}\vec{v}\\ \vec{q}\end{pmatrix}\right)$$

を満たす $(\vec{u},\vec{p}) \in \vec{V} \times \vec{Q}$ を求めよ", となる.

$P_{\vec{V}}$, $P_{\vec{Q}}$ をそれぞれ, $\vec{X}$ から $\vec{V}$ への, $\vec{M}$ から $\vec{Q}$ への正射影とする. $\mathcal{P} := \begin{pmatrix} P_{\vec{V}} & 0 \\ 0 & P_{\vec{Q}} \end{pmatrix}$, $\mathcal{A} := \begin{pmatrix} A & B^T \\ B & -\delta D \end{pmatrix}$ とする. $a(\cdot,\cdot)$ と $d_h(\cdot,\cdot)$ はそれぞれ V_h, Q_h で強圧的であることより, A と D はそれぞれ, $\vec{V}$, $\vec{Q}$ で正定値であり, 次が成立する.

命題 3
1. $\mathcal{PAP}$ は $\vec{V} \times \vec{Q}$ で正則である.
2. $\mathcal{PAP}$ は $n_V(= n_X - n_\Gamma)$ 個の正の固有値と $n_Q(= n_M - 1)$ 個の負の固有値, $n_\Gamma + 1$ 個の 0 固有値を持つ.

6 数値結果

A と D の不完全修正コレスキー分解 [3] をそれぞれ $\tilde{L}_A\tilde{D}_A\tilde{L}_A^T$, $\tilde{L}_D\tilde{D}_D\tilde{L}_D^T$ とする. 前処理行列を

$$\mathcal{P}\begin{pmatrix} (\tilde{L}_A\tilde{D}_A\tilde{L}_A^T)^{-1} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\delta}(\tilde{L}_D\tilde{D}_D\tilde{L}_D^T)^{-1} \end{pmatrix}\mathcal{P}$$

とする. 領域を $\Omega = \{x \in \mathbb{R}^3\ ;\ 0.5 < |x| < 1\}$ とし, 厳密解が

$$u = \Big(\sin x_1 - x_1 \cos x_2 \quad 2(\sin x_2 - x_2 \cos x_3) \quad 2\sin x_3 - x_3(\cos x_2 + \cos x_1)\Big)^T$$
$$p = \sin x_1 + \sin x_2 + \sin x_3 + c$$

であるストークス方程式の有限要素解を求めた. 表 1 に連立方程式の自由度と, 有限要素解の相対誤差を示す. 図 1 にアルゴリズム 1 の各反復ステップでの初期残差に対する相対残差のグラフを示す. 表 1 と 図 1 から, 前処理付き CG 法により離散化ストークス方程式の解が効率良く求められることがわかる.

この数値実験では, 前処理行列を $R(A)$ で正定値なもので構成したが, $\mathcal{A}$ 全体の不完全修正コレスキー分解などにより, 正, 負, 零固有値を持ち $R(A)$ で正則な対称行列で構成することが考えられる.

謝辞

BiCG 法の破綻条件に関する論文 [4, 6] をお教えいただいた名古屋大学 杉原 正顯 教授に感謝します. 本研究において, 第一著者は科学研究補助金, 奨励研究 (A), No. 12740068, 第二著者は科学研究補助金, 基盤研究 (B)(2), No. 11554003 の援助を受けた.

表 1 : 自由度と有限要素の誤差

n_Z	n_X	n_M	n_Γ	n_Y
470,160	352,620	117,540	39,180	430,979

h	$\|\|u - u_h\|\|_1/\|\|u\|\|_1$	$\|\|p - p_h\|\|_0/\|\|p\|\|_0$
7.5207×10^{-2}	4.0151×10^{-2}	1.8363×10^{-2}

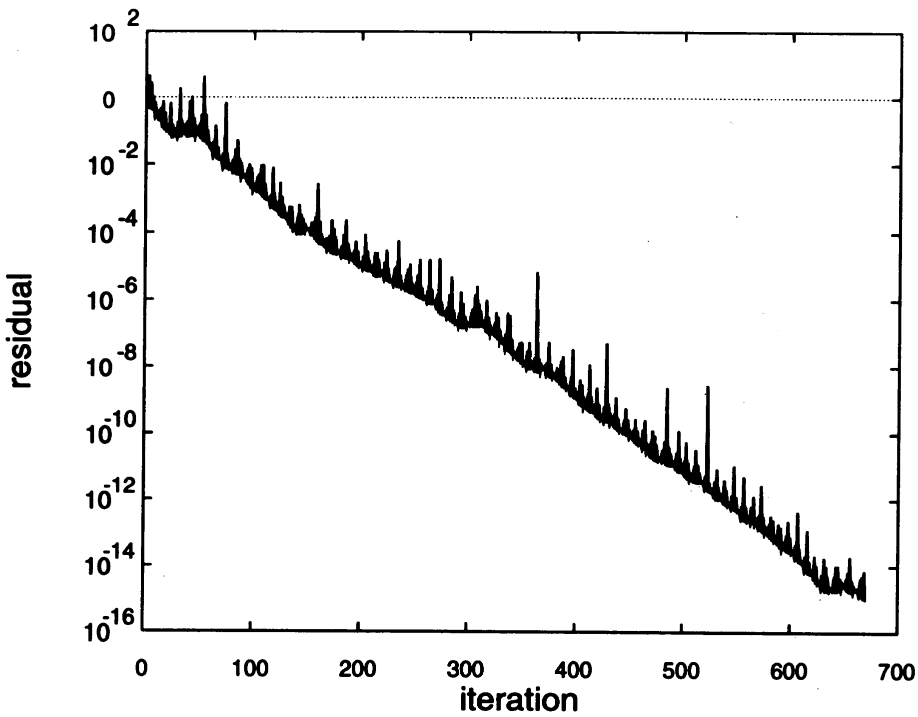

図 1：前処理付き CG 法の収束履歴

参考文献

[1] R. Barrett et al.: *Templates for the Solution of Linear Systems: Building Blocks for Iterative Methods*, SIAM, 1994.

[2] F. Brezzi, J. Douglas, Jr.: Stabilized mixed methods for the Stokes problem, *Numer. Math.*, **53**, 225–235, 1988.

[3] G. H. Golub, C. F. Van Loan: *Matrix Computations* (3rd edn). The John Hopkins University Press, 1996.

[4] W. Joubert: Lanczos methods for the solution of nonsymmetric systems of linear equations, *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, **13**, 926–943, 1992.

[5] E. F. Kaasschieter: Preconditioned conjugate gradients for solving singular systems, *J. Comput. Appl. Math.*, **24**, 265–275, 1988.

[6] Y. Saad: The Lanczos biorthogonalization algorithm and other oblique projection methods for solving large unsymmetric systems, *SIAM J. Numer. Anal.*, **19**, 485–506, 1982.

[7] 森 正武, 杉原 正顕, 室田 一雄: 線形計算, 岩波講座 応用数学 12. 岩波書店, 1994.