

準線形固有値問題の反復解法について

岡山理科大学理学部 澤見 英男 (Hideo Sawami)
岡山理科大学理学部 仁木 滉 (Hiroshi Niki)

はじめに

準線形固有値問題 $Ax = \lambda(x)F(x)$ を 2 種類の反復法により解き比較する. 第 1 の方法として, ニュートン反復に SOR 法を組み合わせ用いる. このニュートン SOR 法では, 内部反復で最適加速係数を推定しながら SOR 反復計算し, さらにニュートン外部反復と併せて解ベクトルを推定する. これは, 固有値に依存した最適加速係数の値を事前に知ることが困難なこと, さらに準線形固有値問題では, 固有値と解ベクトルが非線形従属の関係にあるためである. 第 2 の方法として, 準線形問題を最小化問題に書き換え 1 次近似した後, 共役勾配法的手法を用いる. 共役勾配法は, 固有値の分布と関連した係数を生成しながら反復計算を行うが, 準線形固有値問題に適用した場合には, 反復計算の進行に伴い固有値の分布状態が変化する. このため, 正しい係数が生成できず収束が悪くなり, 推定固有ベクトルが初期固有ベクトルから大幅に変化する. 従って, 反復回数を少なくするための前処理を施すことは, 計算時間だけでなく変化の幅を少なくし解の精度を保つ上でも必要となる. 前処理行列として, 不完全コレスキー分解を用いる.

1 準線形固有値問題

以下の準線形固有値問題を差分法により離散化し, 反復計算により解く.

$$\begin{aligned} -\Delta u &= \lambda \tilde{F}(u)(x) \text{ in } \Omega \subset R^n \\ u &= 0 \text{ on } \partial\Omega \end{aligned} \quad (1)$$

ただし Δ はラプラス作用素, Ω は滑らかな境界 $\partial\Omega$ を持ち, λ は最小固有値である. また, 非線形写像 $\tilde{F}$ は, 以下に示すような $f(u)$ から導出される Nemitskii 作用素である.

$$\tilde{F}(u)(x) = f(u(x)), x \in \bar{\Omega} \quad (2)$$

ここで、 $f(u)$ は $\bar{\Omega}$ 上の実数値関数である。関数 $f(u)$ は充分滑かであり、以下を満たす定数 $c_1, c_2 \geq 0$ が存在することを仮定している。

$$|f(t)| \leq c_1 + c_2|t|^p, t \in R, |f_t(t)| \leq c_1 + c_2|t|^{p-1}, p = 5, t \in R \quad (3)$$

立方格子上で7点差分公式を適用すれば、次の非線形代数方程式系を得る。

$$Ax = \lambda(x)F(x) \quad (4)$$

ただし A は整合順序正定値行列であり、以下のように分割できる。

$$A = I - L - U \quad (5)$$

ここで I, L および U はそれぞれ単位行列、狭義下3角および狭義上3角行列である。非線形作用素 $F : (x_1, \dots, x_n)^T \rightarrow (f(x_1), \dots, f(x_n))^T$ は、式(2)を離散化して得られた対角行列である。

2 SOR-Zincenko 法

線形固有値問題の反復解法 [1,2,5,6] から、準線形固有値問題の反復解法を導出する。次の非線形方程式に関する Zincenko 反復 [7] は以下ようになる。

$$f(x) + g(x) = 0 \quad (6)$$

$$x^{k+1} = x^k - f'(x^k)^{-1}[f(x^k) + g(x^k)], k = 0, 1, 2, \dots \quad (7)$$

ただし f' は f のフレッシュェ微分である。関数 f と g は、以下を満たすものとする。

$$\|f'(x_1) - f'(x_2)\| \leq \kappa(r)\|x_1 - x_2\| \quad x_1, x_2 \in B(x_0, r) \quad (8)$$

$$\|g(x_1) - g(x_2)\| \leq \epsilon(r)\|x_1 - x_2\| \quad x_1, x_2 \in B(x_0, r) \quad (9)$$

ただし $B(x_0, r)$ は中心が x_0 半径が r の R^n における球、 $\kappa(r)$ と $\epsilon(r)$ は区間 $[0, R]$ における非減少関数である。式(4)を式(5)を用い書き替えると以下が得られる。

$$(I - \lambda(x)F)x - (L + U)x = 0 \quad (10)$$

Zincenko 反復 (7) を上式に適用すると、次の反復式が得られる.

$$\lambda^k = \frac{(Ax^k, x^k)}{(F(x^k), x^k)} \quad (11)$$

$$x^{k+1} = x^k - [I - \lambda^k F'(x^k)]^{-1} [x^k - \lambda^k F(x^k) - (L + U)x^k] \quad (12)$$

ただし $f(x) = x - \lambda F(x)$, $g(x) = -(L + U)x$ として適用している. これより, 上式に対する Gauss-Seidel 反復が得られ, 以下のようにになる.

$$x_i^{k+1} = x_i^k - [I - \lambda^k F'(x^{k,i})]^{-1} [x^{k,i} - \lambda^k F(x^{k,i}) - (L + U)x^{k,i}] \quad (13)$$

ただし $x^{k,i} = (x_1^{k+1}, \dots, x_{i-1}^{k+1}, x_i^k, \dots, x_n^k)^T$ は, 第 $i-1$ 成分までポイントワイズに更新した推定固有ベクトルである. 同様にして SOR-Zincenko(extrapolated Gauss-Zincenko) 反復が得られ, 以下のようにになる.

$$\tilde{x}_i^{k+1} = x_i^k - [I - \lambda^k F'(x^{k,i})]^{-1} [x^{k,i} - \lambda^k F(x^{k,i}) - (L + U)x^{k,i}] \quad (14)$$

$$x_i^{k+1} = x_i^k + \omega(\tilde{x}_i^{k+1} - x_i^k) \quad (15)$$

上式は, ニュートン法を実行するため SOR 法を用いていることからニュートン SOR 法と呼ばれている [3]. ニュートン SOR 法では ニュートン法を外部反復に SOR 法を内部反復に用いるが, これが逆転した場合には SOR ニュートン法になる [3]. SOR 内部反復で用いる m 番目の加速係数を $\omega(m)$, $\omega(m)$ で k 回反復し得られる推定固有ベクトルを $x^k(m)$ とすると, 推定固有値 (Rayleigh 商) は以下のようにになる.

$$\lambda^k(m) = \frac{(Ax^k(m), x^k(m))}{(F(x^k(m)), x^k(m))} \quad (16)$$

収束の測度として, 以下に示す推定固有ベクトルの変化の比率を用いることにする.

$$\eta^k(m) = \frac{\|x^k(m) - x^{k-1}(m)\|}{\|x^{k-1}(m) - x^{k-2}(m)\|} \quad (17)$$

以上より, 加速係数を推定し反復する ニュートン SOR 法は, 以下のようにになる [6].

(i) 初期推定ベクトル $x^k(m)$ および $\omega(m)$ を選び, $m = k = 0$ とする

(ii) SOR-Zincenko 法 (14)-(15) により $x^{k+1}(m)$ を求める

(iii) 以下の収束判定を満たすまで SOR 反復を繰り返す

$$\eta^j(m) < 1 \text{ for } j = k-2, k-1, k \text{ and } k \geq 4 \quad (18)$$

式 (18) が満たされた場合, 新しい加速係数を以下により決定する

$$\begin{aligned} \omega(m+1) &= \eta^k(m) + 1, \text{ if } \omega(m) - 1 \geq \eta^k(m) \\ \omega(m+1) &= 2/[1 + (1 - \mu^2(m))]^{1/2}, \text{ otherwise} \end{aligned} \quad (19)$$

$$\text{ただし } \mu^2(m) = \frac{[\omega(m) + \eta^k(m) - 1]^2}{\eta^k(m)\omega(m)^2} \quad (20)$$

新しい加速係数が得られた場合は, $k = 0$ および $m = m + 1$ とする. 一方, 式 (18) が満たされなかったら, $k = k + 1$ とし, 加速係数は変更しない

(iv) ステップ (ii)-(iii) を収束するまで繰り返す

ニュートン SOR 法では, 問題の離散化にステンシルを用いる場合には行列成分を記憶せず, 解ベクトルのみ記憶して反復計算を実行できることを注記しておく.

3 CG 法

次の最小化問題を CG 法により解く.

$$J(x + \alpha p) = (r(x + \alpha p), x + \alpha p) \quad (21)$$

$$r(x) = Ax - \lambda F(x) \quad (22)$$

式 (21),(22) に対する CG 法は, 以下ようになる.

$$\text{初期推定固有ベクトル } x^0 \in R^n \text{ を与え } \lambda^0 = \frac{(Ax^0, x^0)}{(x^0, x^0)} \text{ を計算, } k = 0 \quad (23)$$

$$r^0 = Ax^0 - \lambda^0 F(x^0), p^0 = r^0 \quad (24)$$

$$x^{k+1} = x^k + \alpha_k p^k \quad \text{推定固有ベクトルの更新} \quad (25)$$

以下の最小化問題の解 α_k を求める.

$$J(x^k + \alpha_k p^k) \leq J(x^k + \alpha p^k), \forall \alpha \in R, \alpha_k \in R \quad (26)$$

$$\lambda^{k+1} = \frac{(Ax^{k+1}, x^{k+1})}{(x^{k+1}, x^{k+1})} \quad \text{推定固有値の更新} \quad (27)$$

$$r^{k+1} = \lambda^{k+1} F(x^{k+1}) - Ax^{k+1}, p^{k+1} = r^{k+1} + \beta_k p^k \quad (28)$$

$$\beta_k = \frac{(r^{k+1}, r^{k+1} - r^k)}{(r^k, r^k)} \quad (29)$$

ところで、上記 CG 法では最小化問題 (26) を解く必要がある。ニュートン法を用いることも考えられるが、式 (21) の非線形項 F にのみ補間係数 γ を導入し、以下の線形近似により簡略化して解く [4].

$$\begin{aligned} \tilde{J}(x + \alpha p) &= (A(x + \alpha p) - \lambda F(x + \alpha \gamma p), x + \alpha p) \\ &\approx (Ax, x) - \lambda(F, x) \\ &\quad + \alpha\{2(Ap, x) - \lambda(F, p) - \gamma\lambda(F'p, x)\} \\ &\quad + \alpha^2\{(Ap, p) - \gamma\lambda(F'p, p)\} \end{aligned} \quad (30)$$

ただし F および F' はそれぞれ $F(x)$ および $F'(x)$ を表しており、補間係数 γ は α^2 に関する係数の和を正にするよう選ぶものとする。通常は $\gamma = 1$ としている。

4 前処理付き CG 法

前処理行列に incomplete Cholesky decomposition (ICCG) および modified incomplete Cholesky decomposition (MICCG) $(U')^{-1}D^{-1}(L')^{-1}$ を用いる。ただし $U' = I + U$, $L' = I + L$ としている。ICCG および MICCG 法は、対角行列 D のみが異なっておりその成分は以下ようになる [8].

ICCG 法:

$$d_i^{-1} = 1 - u_{ri}d_r - u_{si}^2d_s - u_{ti}^2d_t \quad (31)$$

MICCG 法:

$$\begin{aligned} d_i^{-1} &= (1 + \epsilon) - u_{ri}^2d_r - u_{si}^2d_s - d_{ti}^2d_t \\ &\quad - u_{ri}u_{rj}d_r - u_{ri}u_{rk}d_r \\ &\quad - u_{si}u_{so}d_s - u_{si}u_{sp}d_s \\ &\quad - u_{ti}u_{tv}d_t - u_{ti}u_{tw}d_t \end{aligned} \quad (32)$$

対角行列の成分計算に用いる上三角行列の成分 $\{u_{ri}, u_{rj}, u_{rk}\}$, $\{u_{si}, u_{so}, u_{sp}\}$, $\{u_{ti}, u_{tj}, u_{tv}, u_{tw}\}$ の指数に関しては、 $i > \{r, s, t\}$, $r < \{k, j\}$, $s < \{o, p\}$, $t < \{u, v\}$ が成立している。また、前処理行列の正定値性を保つため導入した係数は、 $\epsilon = 0.2h^2$ としている。 h は格子寸法である。前処理行列の各成分と差分ステンスルとの関係を、図 1 に示す。前処理付き共役勾配法による反復計算は、以下ようになる。

(i) 初期推定ベクトル x^0 を与え、 $k = 0$, $p^0 = 0$ とし以下を計算

$$r^{-1} = r^0 = (U')^{-1}D^{-1}(L')^{-1}[-Ax^0 + \lambda^0 F(x^0)] \quad (33)$$

(ii) ベクトルと係数の計算

$$r^k = (U')^{-1} D^{-1} (L')^{-1} [-Ax^k + \lambda^0 F(x^k)] \quad (34)$$

$$p^k = r^k + \beta^k p^{k-1}, \beta^k = \frac{(r^k - r^{k-1}, r^k)}{(r^{k-1}, r^{k-1})} \quad (35)$$

(iii) 解の更新と係数の計算

$$x^{k+1} = x^k + \alpha^k p^k \quad (36)$$

$$\alpha^k = \frac{2(\bar{A}x^k, p^k) - \lambda\{\gamma(\bar{F}'p^k, x^k) + (\bar{F}'p^k, p^k)\}}{2\{r^k \lambda^k (\bar{F}'p^k, p^k) - (\bar{A}p^k, p^k)\}} \quad (37)$$

$$\bar{A} = (U')^{-1} D^{-1} (L')^{-1} A, \bar{F} = (U')^{-1} D^{-1} F, \bar{F}' = (U')^{-1} D^{-1} F'$$

(iv) $k = k + 1$ とし, (ii)-(iii) を収束するまで繰り返す

既に述べたように, ICCG 法および MICCG 法は対角行列のみ異なっている.

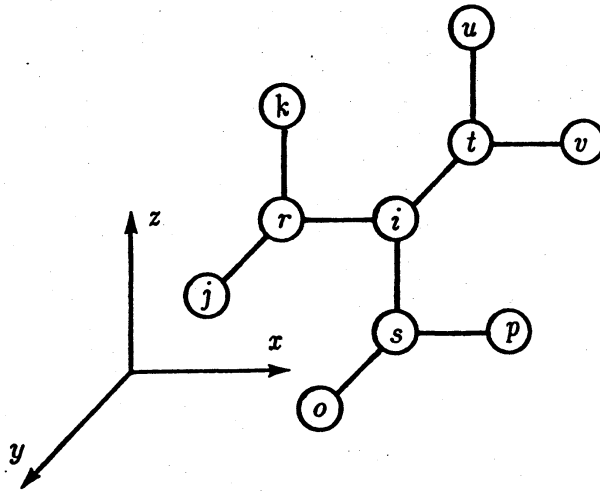


図 1 3次元立方格子上的前処理用差分ステンシル
格子点の番号付けは, 各座標軸の正の方向に向かって行う.

ところで, 本共役勾配法では反復計算中で2回以上使われるベクトルも記憶して, 演算量を削減している. また前処理付き共役勾配法では, 前処理に用いる対角行列をベクトルとして記憶し演算量を削減している. 前処理に用いる三角行列 L' と U' の逆行列による演算は, 問題の離散化にステンシルを用いているので, 前進消去と後退代入により実現でき, その成分を記憶する必要が無いことを注記しておく.

5 数値例

準線形固有値問題の反復解法として、ニュートン SOR 法, CG 法, ICCG 法および MICCG 法を以下の問題に適用し、収束に必要な反復回数の比較を行う。

$$-\Delta u = \lambda(u) \sin(u), \text{ in } \Omega = (0, 1) \times (0, 1) \times (0, 1) \quad (38)$$

$$u = 0 \text{ on } \partial\Omega \quad (39)$$

単位立方形の領域 Ω を格子寸法 $h = \frac{1}{32}, \frac{1}{64}, \frac{1}{128}$ の立法格子で分割し、7 点差分ステンシルを用いて離散化した。収束判定の条件としては、以下を用いる。

$$\frac{|\lambda^k - \lambda^{k-1}|}{|\lambda^k|} \leq 10^{-6} \quad (40)$$

各反復法の収束に要する反復回数を表 1 に、各種共役勾配法による反復回数の補間係数 γ による影響を表 2 に示す。共役勾配法の反復回数の制御を目的とした補間係数を導入したが、CG 法は係数の変化に対し敏

	1/h=	32	64	128	vectors
SOR		306	451	706	1
CG		57	84	146	8
ICCG		26	37	79	9
MICCG		18	13	19	9

表 1 各種格子寸法に関するニュートン SOR, CG, ICCG および MICCG 法の反復回数
共役勾配法の補間係数 $\gamma = 1$. vectors はベクトルの本数である。

	$\gamma =$	0.0	0.6	0.8	1.0	1.2	1.4
1/h=32	CG	1137	48	55	57	60	53
	ICCG	31	24	24	26	25	25
	MICCG	33	22	19	18	18	28
1/f=64	CG	*	81	85	84	61	74
	ICCG	78	40	39	37	41	37
	MICCG	61	15	16	13	16	13
1/h=128	CG	*	160	147	146	146	143
	ICCG	317	66	88	79	71	69
	MICCG	64	21	23	19	21	27

表 2 各種補間係数 γ に対する反復回数
表中の*は反復計算が発散したことを意味している。

感で発散する場合もあるが、前処理付き共役勾配法 ICCG 法と MICCG 法はそうではないことがわかった。

次に、固有ベクトルの大きさと固有値との関係をニュートン SOR 法により求め、図 2 に示す。このため、ニュートン SOR 法の各反復終了毎に、固有ベクトルの 2 乗ノルムの大きさを規定値とするため、ス

ケーリングにより修正している。一方、共役勾配法ではこのようなベクトルの修正を行うことは、問題の非線形性のため本質的な困難を伴うことから、適用できないことを注記しておく。

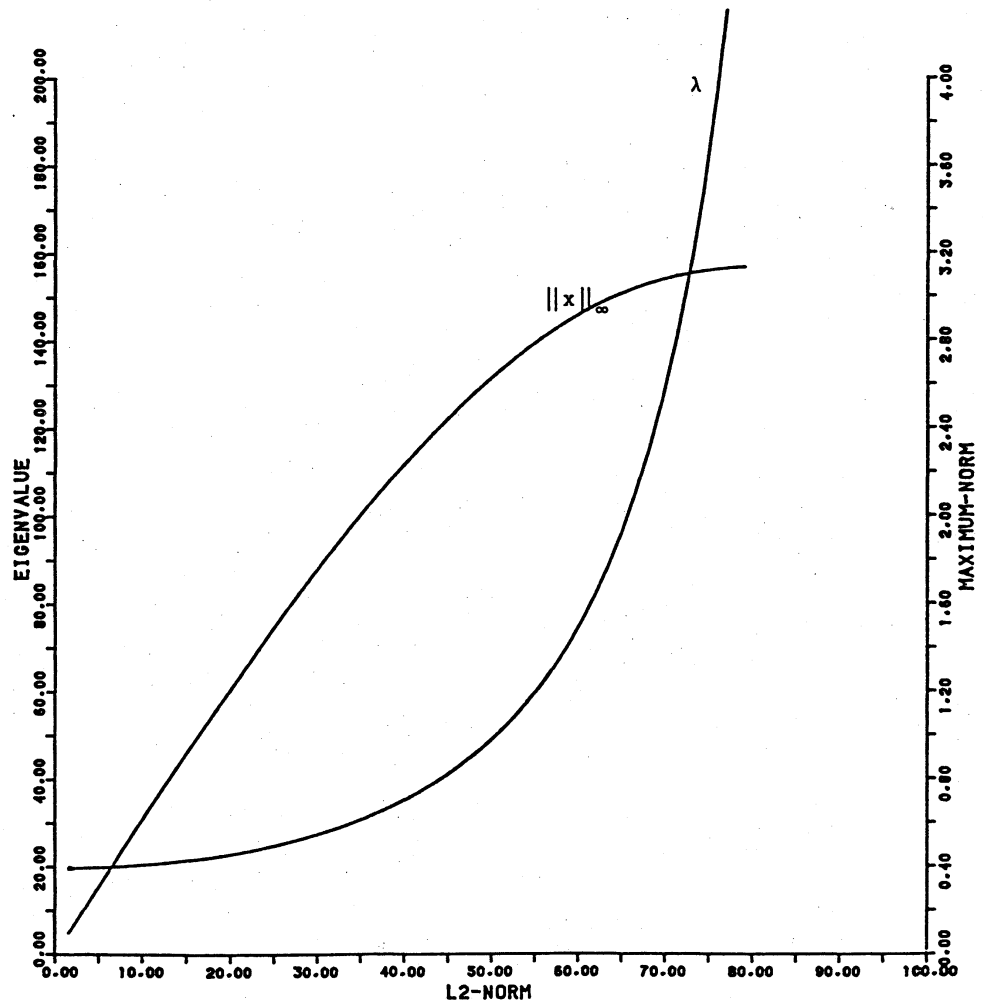


図 2 固有ベクトルの大きさと固有値との関係
横軸は固有ベクトルの 2 乗ノルム，縦軸は一様ノルムと固有値， $h = 1/128$ ，ニュートン SOR 法による。

6 結論

ニュートン SOR 法および各種共役勾配法を準線形固有値問題に適用した。数値例では、行列の成分を差分ステンシルにより生成しているため、行列成分の記憶は不要である。前処理行列による演算でも、差分ステンシルを用いた前進消去と前処理行列の対角成分による除算および差分ステンシルを用いた後退代入によるため、前処理行列の対角成分のみベクトルとして記憶すればよい。さらに、共役勾配法では、計算の

重複を避けるためにも解ベクトル以外のベクトルを記憶する必要がある。このため、反復計算に必要な記憶容量は前処理付き共役勾配法が最も多く、ICCG 法と MICCG 法はニュートン SOR 法に対し、9 倍の記憶領域を用いている。そして、MICCG 法はニュートン SOR 法の約数十分の 1 の反復回数で収束している（計算時間で比較して、約 20 分の 1）。これより、記憶容量の制約と固有ベクトルの大きさに対する制約が無ければ、準線形固有値問題の解法として MICCG 法が適しているといえる。

一方、共役勾配法は反復途中での固有ベクトルの修正に対して敏感に反応するので、固有ベクトルの大きさを規定した場合、収束速度が大幅に低下する。しかし、ニュートン SOR 法は固有値と固有ベクトル間の非線形性の影響を受けにくいことから、反復途中で固有ベクトルの測度を用いてその大きさを修正し、固有値と固有ベクトルとの関係を精密に求める場合に適用するのがよい。

参考文献

- (1) D.J.Evans, On preconditioned iterative method for solving $(A - \lambda B)x = 0$, *Computing*, 32(1984)139-152.
- (2) K.Georg, On the convergence of an interval iteration method for nonlinear elliptic eigenvalue problem, *Numer.Math.*, 32(1979)69-74.
- (3) J.M.Ortega and W.C.Rheinboldt, *Iterative Solution of Nonlinear Equations in Several Variables* (Academic Press, 1970).
- (4) O.Pironneau, *Optimal Shape Design for Elliptic Systems* (Springer-Verlag, 1984).
- (5) A.Ruhe, SOR-method for the eigenvalue problem with large sparse matrices, *Math.Compt.*, 28(1974)695-710.
- (6) H.Sawami and H.Niki, Optimum overrelaxation parameter for the SOR method for solving the eigenvalue problem, *SIAM J.Alg.Disc.Math.*, 6(1984)278-282.
- (7) T.Yamamoto, A note on a posteriori error bound of Zabrejko and Nguen for Zincenko's iteration, *Numer.Funct.Anal.Optimiz.*, 9(1987)987-1004.
- (8) J.A.Meijerink and H.A. van der Vorst, An iterative method for linear systems, of which the coefficient matrix is symmetric M-matrix, *Math.Compt.*, 31, No.137(1977)148-162.