

滑らかでない方程式に対する Smoothing Newton 法

理化学研究所 松永 奈美 (Nami Matsunaga)

The Institute of Physical and Chemical Research (RIKEN)

1. はじめに

Smoothing Newton 法に関しては近年盛んに研究が進められており [1, 2, 3], 相補性問題や滑らかでない方程式の解を求めるのにかなり有効な方法として知られるようになってきている. この方法は, 滑らかでない方程式を解く際に Newton like 法および Smoothing 法を用い, 元の関数の一般化ヤコビアンに滑らかな近似関数のヤコビアンを用いて近似解を求めていくという方法であるが, 適当な条件の下では生成される点列 $\{x_k\}$ は有界であり, かつその集積点は元の方程式の解であることが証明されている. また, その収束に関しては大域的に超一次収束 (条件によっては二次収束) することが示されている.

陳ら [1] は, $-\Delta u + \max(0, q(u)) = \varphi(s, t)$ のタイプの 2 次元有界凸領域 Ω における Dirichlet 問題 (ただし, φ は Ω 上で与えられた関数, q は連続的に微分可能な単調増加関数) に対して, 有限差分近似にて離散化を行い Smoothing Newton 法を適用した場合の収束および誤差評価について報告を行っており, 適当な条件の下では境界付近では領域内部よりも誤差の精度が 1 次良くなることを証明している.

今回は, Smoothing Newton 法を用いた場合の誤差評価をより明確に示すため, 別の数値実験も新たに加えて誤差に関する詳細な報告を行う.

2. 対象とする方程式

ここでは, 次のような滑らかでない方程式 [1] を取り扱うこととする.

$$F(x) := Ax + b + \max(0, g(x)) = 0 \quad (1)$$

ただし, $A \in R^{n \times n}$ は既約優対角な L -行列, $b \in R^n$ であり, $g: R^n \rightarrow R^n$ は連続的に微分可能な単調増加関数, すなわち

$$(g(x) - g(y))^T \cdot (x - y) \geq 0 \quad (\forall x, y \in R^n)$$

を満たすものとする. ここで, n 次行列 $A = (a_{ij})$ が $a_{ij} \leq 0$ ($i \neq j$), かつ $a_{ii} > 0$ ($1 \leq i \leq n$) を満たすとき, 行列 A は L -行列と呼ばれる. また, 行列 A は正符号, すなわち 任意の $x \in \Omega$ に対して $x^T A x \geq 0$ を満たすと仮定する.

式 (1) は, 例えば [5] で考案された MHD 平衡解のモデルをもとに, 以下のような 2 次元有界凸領域における Dirichlet 問題を有限要素法や有限差分法を用いて離散化することによって得られる.

$$-\Delta u + \max(0, q(u)) = \varphi(s, t) \quad \text{in } \Omega, \quad (2)$$

$$u = \psi(s, t) \quad \text{on } \partial\Omega \quad (3)$$

ただし, φ, ψ は Ω 上で与えられた関数とし, q は連続的に微分可能な単調増加関数である

3. Smoothing Newton 法

ここでは, Smoothing Newton 法について紹介する [1, 2, 3].

$\rho: R \rightarrow R_+ := \{s \in R \mid s \geq 0\}$ を,

$$\kappa = \int_{-\infty}^{\infty} |s| \rho(s) ds < \infty \quad (4)$$

を満たす適当な密度関数とする. このとき, (1) における関数 $F = (F_1(x), \dots, F_n(x))^T$ の Chen-Mangasarian 近似関数: $f(x, \varepsilon) = (f_1(x, \varepsilon), \dots, f_n(x, \varepsilon))^T$ は,

$$f_i(x, \varepsilon) = (Ax + b)_i + \int_{-\infty}^{\infty} \max(0, g_i(x) - \varepsilon s) \rho(s) ds, \quad i = 1, \dots, n \quad (5)$$

で与えられる. ただし, 各添字 i は第 i 成分を表す. このとき, 次の命題が成り立つ.

命題 1 $R_{++} := \{s \in R \mid s > 0\}$ とする. (5) によって定義される関数 $f: R^n \times R_{++} \rightarrow R^n$ は, 次の 4 つの性質を満たす.

(i) 任意の $(x, \varepsilon) \in R^n \times R_{++}$ に対して,

$$|F_i(x) - f_i(x, \varepsilon)| \leq \kappa \varepsilon, \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (6)$$

となる.

(ii) f は変数 x に関して連続的に微分可能であり, 任意の $(x, \varepsilon) \in R^n \times R_{++}$ に対して,

$$f_x(x, \varepsilon) = A + D(x)g'(x) \quad (7)$$

となる. ただし, $D(x)$ は,

$$D_{ii}(x) = \int_{-\infty}^{-g_i(x)/\varepsilon} \rho(s) ds, \quad i = 1, 2, \dots, n$$

を満たす対角行列であり, $g'(x)$ は $g(x)$ のヤコビ行列 (かつ対角行列) である.

(iii) 任意の $x \in R^n$ に対して,

$$\lim_{\varepsilon \downarrow 0} f_x(x, \varepsilon) = f^0(x) \quad (8)$$

となる. ただし, $i = 1, 2, \dots, n$ に対して, 行列 f^0 の第 i 行は次式で定義される.

$$f_i^0(x) = \begin{cases} A_i + g'_i(x) & (g_i(x) > 0), \\ A_i & (g_i(x) < 0), \\ A_i + \left(\int_{-\infty}^0 \rho(s) ds \right) g'_i(x) & (g_i(x) = 0) \end{cases}$$

(iv) 任意の $x \in R^n$ に対して, f は次式を満たす. ただし, $\|\cdot\|$ はユークリッドノルムを表す.

$$\lim_{h \rightarrow 0} \frac{F(x+h) - F(x) - f^0(x+h)h}{\|h\|} = 0 \quad (9)$$

さて, Smoothing Newton 法のアルゴリズムは, 次のとおりである.

アルゴリズム 1 $\rho, \alpha, \eta \in (0, 1)$, 初期値 $x^0 \in R^n$ および $\sigma \in (0, (1 - \alpha)/2)$ を設定し, $\nu = \alpha/(2\sqrt{n}\kappa)$, $\beta_0 = \|F(x^0)\|$, $\varepsilon_0 = \nu\beta_0$ とする. このとき, $k \geq 0$ に対して, 次の手順に従って計算を行う.

Step 1 (Newton Like 法)

線形方程式 $F(x^k) + f^0(x^k)d = 0$ の解 $\hat{d}^k$ を探す. このとき, もし $\|F(x^k + \hat{d}^k)\| \leq \eta\beta_k$ ならば $x^{k+1} = x^k + \hat{d}^k$ とするが, そうでなければ Step 2 へ進む.

Step 2 (Smoothing と Line Search)

線形方程式 $F(x^k) + f_x(x^k, \varepsilon_k)d = 0$ の解 d^k を探す. 次に, $\Theta(x) = \|F(x)\|^2/2$, $\theta_k(x) = \|f(x, \varepsilon_k)\|^2/2$ とおき,

$$\theta_k(x^k + \rho^m d^k) - \theta_k(x^k) \leq -2\sigma\rho^m\Theta(x^k)$$

を満たすような最小の非負整数 $m = m_k$ を求め, $t_k = \rho^{m_k}$, $x^{k+1} = x^k + t_k d^k$ とする.

Step 3 (解の検証)

- (a) もし $\|F(x^{k+1})\| = 0$ ならば, 計算を終了する.
- (b) もし $0 < \|F(x^{k+1})\| \leq \max\{\eta\beta_k, \alpha^{-1}\|F(x^{k+1}) - f(x^{k+1}, \varepsilon_k)\|\}$ ならば, $\beta_{k+1} = \|F(x^{k+1})\|$ かつ $\varepsilon_{k+1} = \min\{\nu\beta_{k+1}, \varepsilon_k/2\}$ とし, Step 1 へ戻る.
- (c) それ以外ならば $\beta_{k+1} = \beta_k$, $\varepsilon_{k+1} = \varepsilon_k$ とし, Step 1 へ戻る.

F の level 集合を $D(\Gamma) = \{x \in R^n \mid \|F(x)\| \leq \Gamma\}$ とする. このとき, 次の2つの定理が成り立つ [1].

定理 1 任意の初期値 $x^0 \in R^n$ に対して, アルゴリズム 1 は *well-defined* であり, 生成列 $\{x^k\}$ はすべて $D((1 + \alpha)\|F(x^0)\|)$ の中に存在し,

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|F(x^k)\| = 0$$

を満たす.

定理 2 式 (1) は一意解 x^* をもち, 列 $\{x^k\}$ は x^* に超一次収束する. また, もし g が x^* の近くで局所的に *Lipschitz* 連続な導関数をもつならば, その収束は二次収束である. さらに, g がアフィン関数ならば, 反復は有限回で終了する.

4. 有限差分法に対する誤差評価

式 (1), (2) に対して, Shortley-Weller 近似 (ラプラス作用素 Δu に対する一般化された5点差分近似) [4] を用いて離散化を行うものとする.

$P = (s, t)$ を Ω 上の任意の点, h, k を s 軸 および t 軸 方向のメッシュのキザミ幅, $P_{ij} = (s_i, t_j) = (ih, jk)$ を格子点とし, U_{ij} , u_{ij} を, それぞれ格子点 P_{ij} における近似解 U および厳密解 u の値を表すものとする. ここで, ある定数 $C > 1$ に対して集合 $D_C := \{P \in \Omega \mid \text{dist}(P, \partial\Omega) < C \min(h, k)\}$ を定義するとき, 次の定理が成り立つ [1, 6].

(i) $u \in C^{2,\gamma}(\bar{\Omega})$, $0 < \gamma < 1$ のとき,

$$|u_{ij} - U_{ij}| \leq \begin{cases} O(h^\gamma + k^\gamma) & (P_{i,j} \in \Omega/D_C), \\ O(h^{1+\gamma} + k^{1+\gamma}) & (P_{i,j} \in D_C) \end{cases}$$

が成り立つ.

(ii) $u \in C^4(\bar{\Omega})$ ならば,

$$|u_{ij} - U_{ij}| \leq \begin{cases} O(h^2 + k^2) & (P_{i,j} \in \Omega/D_C), \\ O(h^3 + k^3) & (P_{i,j} \in D_C) \end{cases}$$

が成り立つ.

5. 数値例

ここでは

$$\begin{aligned} -\Delta u + a \max(0, u) &= \varphi(s, t) && \text{in } \Omega = [0, 1] \times [0, 1], \\ u &= \psi(s, t) && \text{on } \partial\Omega \end{aligned}$$

の問題に従って2つの例を取り上げる. ただし, $a > 0$ とする.

例 1. (陳・松永・山本 [1]) $a = 1$ とし,

$$\varphi(s, t) = \begin{cases} (36\pi^2(s^2 + t^2) + a) \sin(6\pi st), & 0 < st < 1/6 \\ & \text{or } 1/3 < st < 1/2 \text{ or } 2/3 < st < 5/6, \\ 36\pi^2(s^2 + t^2) \sin(6\pi st), & \text{それ以外,} \end{cases}$$

かつ $\psi(s, t) = \sin(6\pi st)$ とする. このとき, 厳密解は

$$u = \sin(6\pi st)$$

である.

例 2. $a = 2$ とし, $\varphi(s, t) = 0$, かつ

$$\psi(s, t) = \begin{cases} 2(s + t - 1), & st = 0 \\ e^{s+t-1} - e^{-(s+t-1)}, & \text{それ以外} \end{cases}$$

とする. このとき, 厳密解は

$$u = \begin{cases} 2(s + t - 1), & s + t \leq 1 \\ e^{s+t-1} - e^{-(s+t-1)}, & \text{それ以外} \end{cases}$$

である.

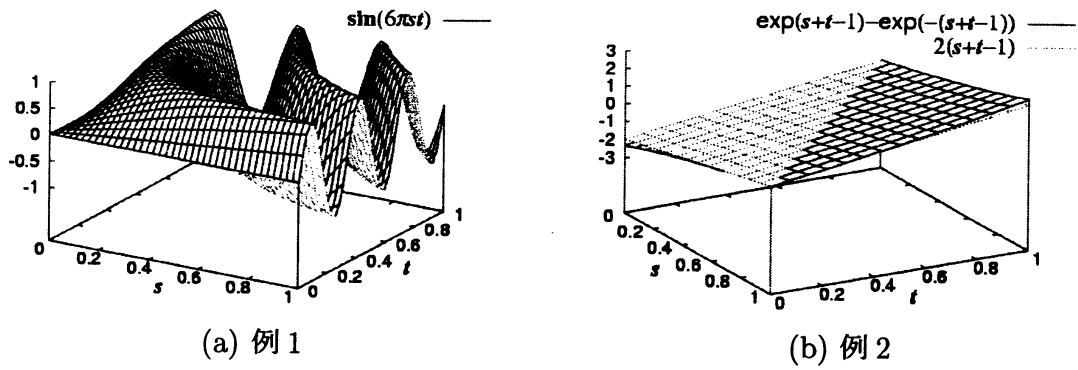


図 1: 厳密解のグラフ

図 1 は, それぞれの例の厳密解のグラフを表す. また, Smoothing Newton 法における密度関数は, 次の 3 つの関数を用いた [1, 3].

$$(S1) \quad \rho(s) = \frac{e^{-s}}{(1+e^{-s})^2}, \quad (S2) \quad \rho(s) = \frac{2}{(s^2+4)^{\frac{3}{2}}}, \quad (S3) \quad \rho(s) = \begin{cases} 1 & (|s| \leq 0.5) \\ 0 & (\text{それ以外}) \end{cases}$$

さらに, 図 2 のように一様なメッシュ幅 $h = k$ をもつメッシュを張り巡らせ, 等分割の場合 (メッシュ 1) と不等分割が生じる場合 (メッシュ 2) における領域内部の点と境界に隣接した点での誤差の比較も行った. なお, メッシュ 2 における不等分割点での最小メッシュ幅は $h/2$ とした.

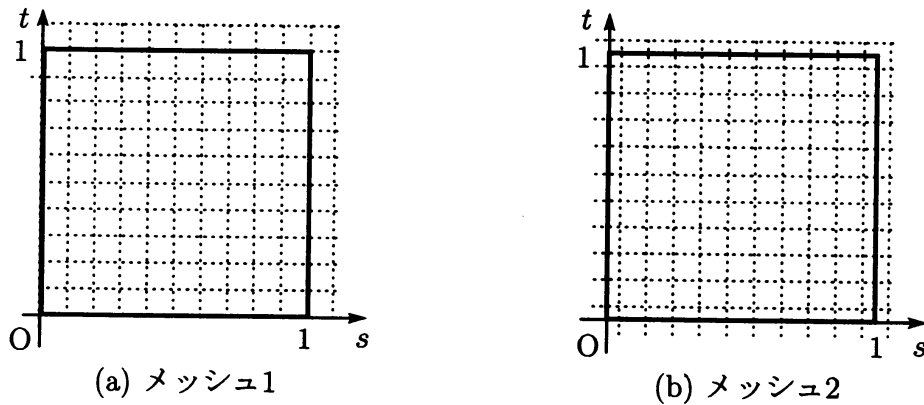


図 2: メッシュの張り方

アルゴリズムの各パラメータは, それぞれ

$$x^0 = (1, 1, \dots, 1), \quad \rho = 0.75, \quad \alpha = 0.56, \quad \eta = 0.87, \quad \sigma = 0.2$$

とおき, 収束判定条件を $\|F(x^{k+1})\| \leq 10^{-8} \ (\forall k)$ として計算を行った. 今回は, Step2 を通過せず数回の反復ですべて収束した.

表 1 および表 2 は, 2 つの例における誤差 $\|x^k - \bar{x}\|$ および反復回数を示している. ただし, $x^k = (\dots, U_{ij}^k, \dots)^T$ かつ $\bar{x} = (\dots, u_{ij}, \dots)^T$ とする. なお, 確認のため 陳ら [1] の計算データも載せているが, これはメッシュ 1 の場合と同じ条件であることに注意する.

陳らの結果 (1998)			
h	1/50	1/100	1/150
S1	$0.18 \times 10^0, 3$	$0.92 \times 10^{-1}, 3$	$0.61 \times 10^{-1}, 3$
S2	$0.18 \times 10^0, 3$	$0.92 \times 10^{-1}, 3$	$0.61 \times 10^{-1}, 3$
S3	$0.18 \times 10^0, 3$	$0.92 \times 10^{-1}, 3$	$0.61 \times 10^{-1}, 3$

メッシュ1			
h	1/50	1/100	1/150
S1	$0.18 \times 10^0, 3$	$0.92 \times 10^{-1}, 3$	$0.61 \times 10^{-1}, 3$
S2	$0.18 \times 10^0, 3$	$0.92 \times 10^{-1}, 3$	$0.61 \times 10^{-1}, 3$
S3	$0.18 \times 10^0, 3$	$0.92 \times 10^{-1}, 3$	$0.61 \times 10^{-1}, 3$

メッシュ2			
h	1/50	1/100	1/150
S1	$0.18 \times 10^0, 3$	$0.90 \times 10^{-1}, 3$	$0.60 \times 10^{-1}, 3$
S2	$0.18 \times 10^0, 3$	$0.90 \times 10^{-1}, 3$	$0.60 \times 10^{-1}, 3$
S3	$0.18 \times 10^0, 3$	$0.90 \times 10^{-1}, 3$	$0.60 \times 10^{-1}, 3$

表 1: 例 1 における誤差 $\|x^k - \bar{x}\|$ および 反復回数

メッシュ1			
h	1/50	1/100	1/150
S1	$0.70 \times 10^{-3}, 2$	$0.35 \times 10^{-3}, 3$	$0.23 \times 10^{-3}, 3$
S2	$0.70 \times 10^{-3}, 2$	$0.35 \times 10^{-3}, 3$	$0.23 \times 10^{-3}, 3$
S3	$0.70 \times 10^{-3}, 2$	$0.35 \times 10^{-3}, 3$	$0.23 \times 10^{-3}, 3$

メッシュ2			
h	1/50	1/100	1/150
S1	$0.68 \times 10^{-3}, 2$	$0.35 \times 10^{-3}, 3$	$0.23 \times 10^{-3}, 3$
S2	$0.68 \times 10^{-3}, 2$	$0.35 \times 10^{-3}, 3$	$0.23 \times 10^{-3}, 3$
S3	$0.68 \times 10^{-3}, 2$	$0.35 \times 10^{-3}, 3$	$0.23 \times 10^{-3}, 3$

表 2: 例 2 における誤差 $\|x^k - \bar{x}\|$ および 反復回数

これらの表より、いずれの例においてもメッシュの張り方の違いによる影響は全くなく、安定して少ない反復回数で収束していることが分かる。また、メッシュ2の場合のほうがメッシュ1の場合よりも若干精度が良いという結果を得ているが、これはメッシュ2の場合のほうが境界に隣接している点がより境界に近いということと、未知数として計算される点の数が若干多くなっている影響のためだと思われる。

次に、境界に隣接した点とそれ以外の領域内部の点での精度の関係を詳しく調べるために、 $B_{error} := \max_{P_{ij} \in D_C} |u_{ij} - U_{ij}|$ および $I_{error} := \max_{P_{ij} \in \Omega/D_C} |u_{ij} - U_{ij}|$ を定義する。ただし、 C は $1 < C < 1.5$ を満たす定数とし、ここでの U_{ij} は各計算において収束判定条件を満たしたときの近似解を表すものとする。このとき、 I_{error}/h^l ($l = 2, 3$) および B_{error}/h^l ($l = 2, \dots, 3$) のグラフは、図 3 から図 6 にて示される。これらのグラフから分かるように、領域内部においては誤差は $O(h^2)$ であること、境界に隣接している点では $O(h^3)$ に近い

精度であることが確認できる。ただし、例1のメッシュ2の場合は、境界付近の点でのメッシュ幅の違いだけでなく厳密解の関数の局所的な変化の大きさが影響しているためか、境界に隣接した点での精度に若干のずれが生じている。

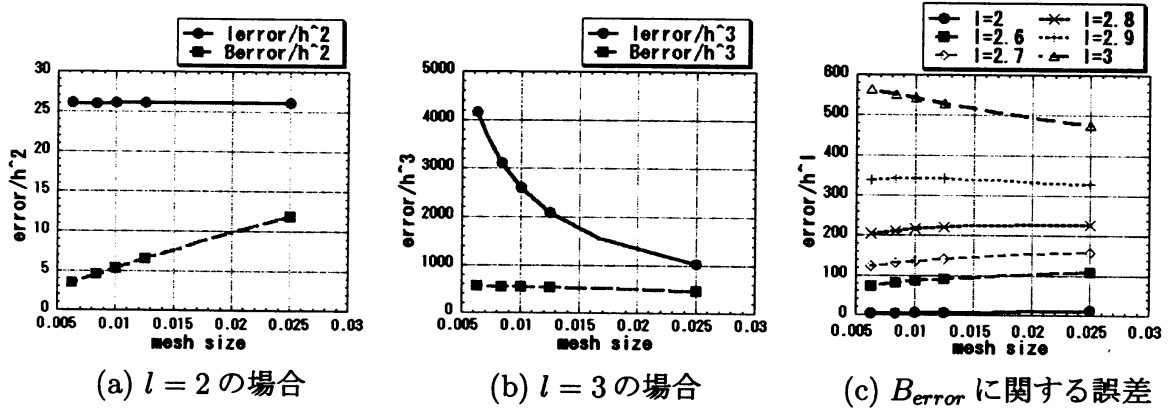


図 3: 例 1 (メッシュ1) における B_{error}/h^l , I_{error}/h^l のグラフ

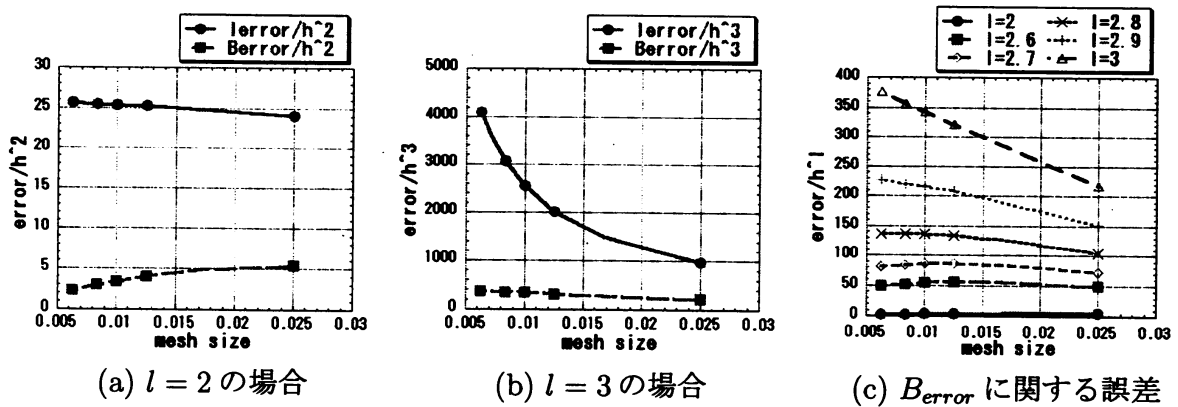


図 4: 例 1 (メッシュ2) における B_{error}/h^l , I_{error}/h^l のグラフ

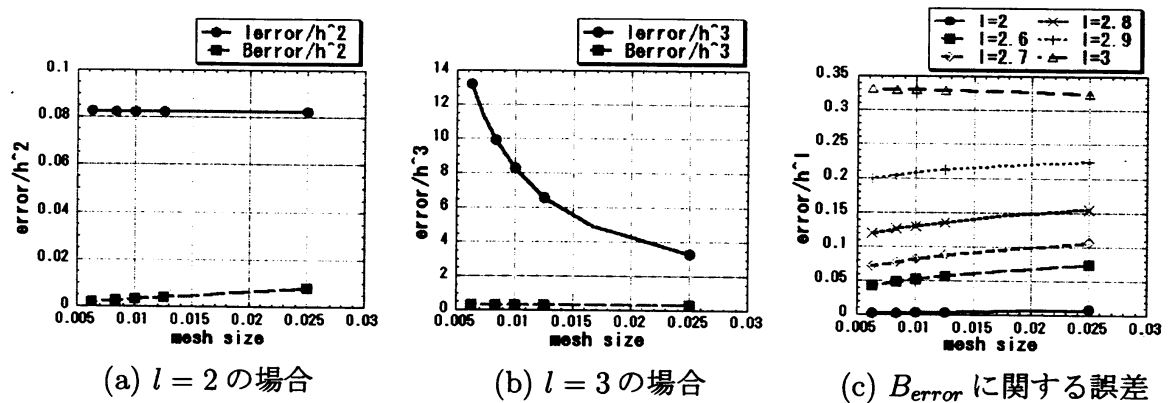


図 5: 例 2 (メッシュ1) における B_{error}/h^l , I_{error}/h^l のグラフ

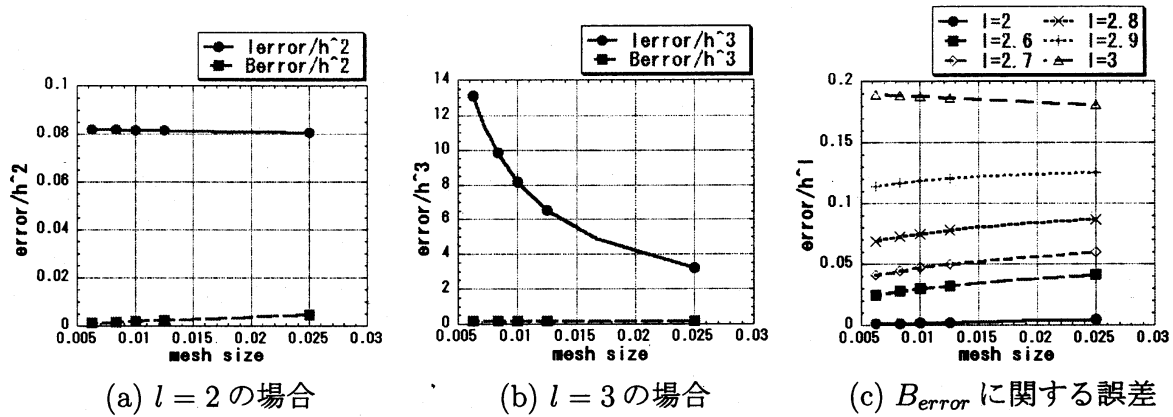


図 6: 例 2 (メッシュ 2) における B_{error}/h^l , I_{error}/h^l のグラフ

また、図 7 は、密度関数 S1 および メッシュ 1 (メッシュ幅 $h = k = 1/100$) を使った場合の各例の誤差 $|u_{ij} - U_{ij}|$ の分布図を表している。密度関数 S2, S3 を使った場合も同様の分布であった。また、メッシュ 2 の場合もほとんど同じ分布であった。

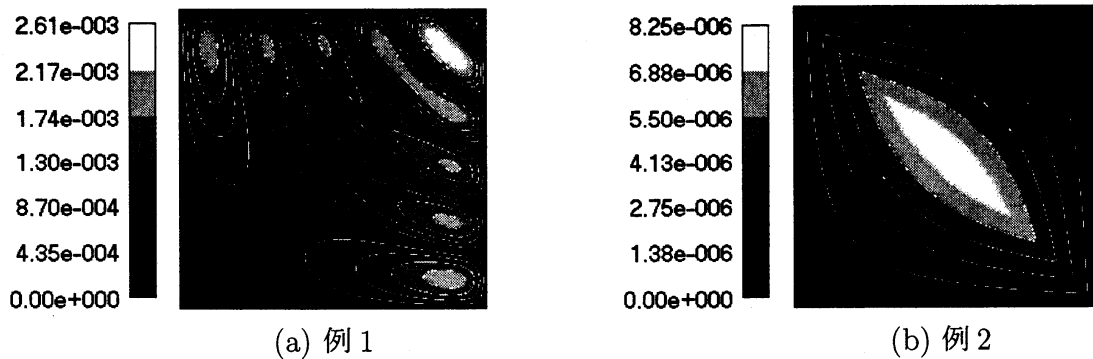


図 7: $|u_{ij} - U_{ij}|$ の分布図

6. まとめ

今回は、メッシュの張り方を変えて不等分割点が生ずる場合についても数値計算を行ったが、メッシュの張り方にそれほど依存することなく有限回で安定して近似解を求めることができた。また、滑らかでない方程式に対して Shortley-Weller 近似を用いて離散化を行い、Smoothing Newton 法を用いて計算を行ったが、境界に隣接した点では領域内部の点よりも精度が 1 次良くなることが確認され、Smoothing Newton 法の有効性を改めて示すことができた。

謝辞

この場をお借りいたしまして、本研究に関して多大なご助言を賜りました島根大学総合理工学部 陳小君助教授に心から感謝の意を表します。

参考文献

- [1] X.Chen, N.Matsunaga and T.Yamamoto, Smoothing Newton methods for nonsmooth Dirichlet problems, *Reformulation - Nonsmooth, Piecewise Smooth, Semismooth and Smoothing Methods* (M.Fukushima and L.Qi, eds.), Kluwer Academic Publisher(1998), 65-79.
- [2] X.Chen, Z.Nashed and L.Qi, Smoothing methods and semismooth methods for nondifferentiable operator equations, *SIAM J. Numer. Anal.*, **38**(2000), 1200-1216.
- [3] X.Chen and Y.Ye, On homotopy-smoothing methods for box-constrained variational inequalities, *SIAM J.Control Optim.*, **37**(1999), 589-616.
- [4] G.E.Forsythe and W.R.Wasow, *Finite Difference Methods for Partial Differential Equations*, Wiley, 1960.
- [5] F.Kikuchi, Finite element analysis of a nondifferentiable nonlinear problem related to MHD equilibria, *J. Fac. Sci. Univ. Tokyo Sect. IA, Math.*, **35**(1988), 77-101.
- [6] T.Yamamoto, On the accuracy of finite difference solution for Dirichlet problems, 京都大学数理解析研究所講究録 No.1040(1998), 135-142.