

PCR法と固有値分布

須賀 伸介 (筑波大・電情)

1 はじめに

疎な非対称行列を係数行列に持つ連立一次方程式の反復解法として、元の方程式に対して不完全LU分解(以後ILU分解と書く)による前処理を施した方程式に(CR法)法を適用するPCR法が注目されている。例えば移流拡散問題の差分近似によって得られる連立一次方程式の解法にPCR法が有効であることが確認され、さらに研究が進められている⁽¹⁾。

本稿では、2次元一相スラフアン問題の有限要素近似によって得られる連立一次方程式を例に取り上げ、その解法にPCR法を適用したときの解の収束性と係数行列の固有値分布との関係、反復法の初期ベクトルが解の収束に及ぼす影響について考察する。

スラフアン問題を時間に依存する基底関数を用いる有限要素法で離散化すると最終的に疎な非対称行列を係数行列に持つ連立一次方程式が現れる。スラフアン問題は非定常自由境界問題であるから、問題を解く領域が時間と共に変化する。従って各時刻毎に係数行列を計算して新しい連立一次方程式を解くことになり、固定領域の問題よりも計算時間が多くなる。また、各時刻毎に現れる連立一次方程式に対して毎回ILU分解による前処理を施していたのでは、さらに計算時間が増し、大規模問題に対しては実用的でなくなる。しかしながら、スラフアン問題では時刻 $t = \Delta t$ をある程度小さく選べば、さらに連立一次方程式の反復解法における初期ベクトルをうまく選べば、時刻 $t = \Delta t$ における連立一次方程式の係数行列に対するILU分解が、それ以後当分の間十分に前処理としての役割を果たすことが確認されている⁽²⁾。

今回の報告では、各時刻毎に現れる連立一次方程式に対する前処理には常に時刻 $t = \Delta t$ のILU分解を使用し、各時刻毎の前処理された係数行列の固有値分布及び係数行列の対称部分、反対称部分の固有値分布を求め、解の収束に要する反復回数との関係を考察する。また反復法の初期ベクトルに対する残差ベクトルを係数行列の固有ベクトルで展開して、初期残差ベクトルが含む固有ベクトル成分について調べ、初期ベクトルと反復回数との関係を考察する。

2. モデル問題

モデル問題はFig. 1に示すような中心に熱源、そのまわりに水の領域 Ω 、 Ω の外側を氷が覆う状態を考へる。 Ω の熱源側の境界 Γ_1 は固定境界で、 $S(x, y) = 0$ で表わされるものとする。氷側の境界 Γ_2 は自由境界で、 Γ_2 を表わす $S(x, y, t)$ は未知関数である。問題は $u(x, y, t)$ を領域内の温度を表す関数として次の(2-1) ~ (2-6)で与えられる

(2-1)	$u_t = \Delta u$	in Ω
(2-2)	$u(x, y, t) = g(x, y, t)$	on Γ_1
(2-3)	$u(x, y, t) = 0$	on Γ_2
(2-4)	$u(x, y, 0) = u^0(x, y)$	in Ω
(2-5)	$S(x, y, 0) = S^0(x, y)$	

(2-6)

$$S_t = -\chi \nabla u \cdot \nabla S \quad \text{on } \Gamma_2$$

ここで、 g, u^0, S^0 はそれぞれ熱源の温度、初期温度分布、初期自由境界を表す関数である。また(2-6)はステファン条件⁽³²⁾と呼ばれている。そして、 S_1, g, u^0, S^0 を与えて、 $u(x, y, t)$ と $S(x, y, t)$ を求めることがここでの問題である。尚、環状領域であることを考慮して実際には(2-1)~(2-6)を極座標表示した問題を解くこととする。

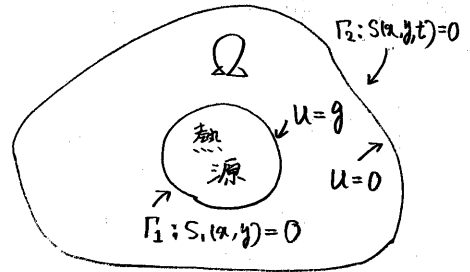


Fig. 1

3. 有限要素法による離散化

領域 Ω はSantosの方法⁽⁴⁾により三角形に分割される。節点における近似解 $\hat{u}$ を

$$(3-1) \quad \hat{u} = \sum_{i=1}^m a_i(t) \varphi_i(x, y, t)$$

とおく。基底関数 φ_i は時間 t の関数でもある⁽⁵⁾。(3-1)を用いると(2-1)の弱形式の離散形は次のようになる。

$$(3-2) \quad \sum_{j=1}^m \left[\frac{da_j}{dt} \iint_{\Omega} \varphi_i \varphi_j dx dy + a_j \iint_{\Omega} \left(\frac{\partial \varphi_i}{\partial x} \frac{\partial \varphi_j}{\partial x} + \frac{\partial \varphi_i}{\partial y} \frac{\partial \varphi_j}{\partial y} \right) dx dy + \iint_{\Omega} \varphi_i \frac{\partial \varphi_j}{\partial t} dx dy \right] = 0.$$

φ_j がその関数であるために(3-2)の左辺第3項目が現れる所が通常の有限要素法と異なる点である。(3-2)の時間微分を後退差分で近似すれば最終的に次の連立一次方程式が現れる。

$$(3-3) \quad \{M + \Delta t(K + N)\} a(t - \Delta t) = M a(t).$$

M, K はそれぞれ質量行列、剛性行列である。 N は

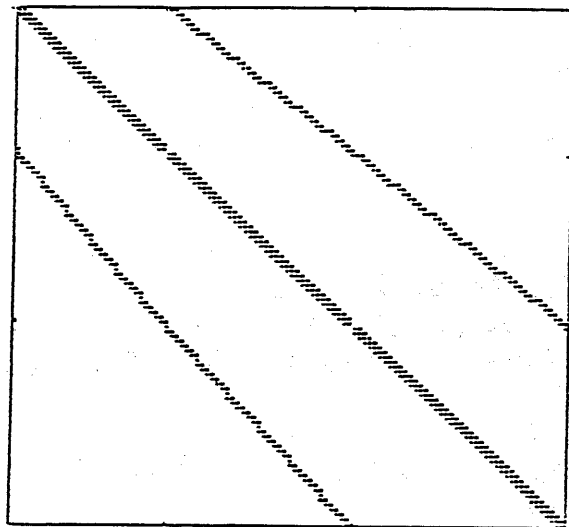


Fig. 2: 係数行列の形

$$(3-4) \quad N = \left[\iint_{\Omega} \varphi_i \frac{\partial \varphi_j}{\partial t} dx dy \right]$$

で与えられ、この項の影響で(3-3)の係数行列は非対称行列になる。Fig. 2に係数行列の形の一例を示す。

4. 数値解法

4.1 解法手順

以下にストラファソソ問題の解法手順を示す。

時刻 $t=0$ における状況設定

0). $g(x, y, 0)$, $S(x, y)$ を与える。 $u^0(x, y)$ は次式で与える

$$(4-1) \quad u^0(x, y) = \begin{cases} 0 & \text{in } \Omega \cup \Gamma_2 \\ g(x, y, 0) & \text{on } \Gamma_1 \end{cases}$$

時刻 $t=t_n (=m\Delta t)$ における計算

- 1). $t_n \leftarrow t_{n-1} + \Delta t$
 - 2). ストラファソソ条件の近似方程式より自由境界の増分 $\Delta S(t_n)$ を求める。
 $S(t_n) \leftarrow S(t_{n-1}) + \Delta S(t_n)$
 - 3). 2)で求めた新しい領域における M, K, N を計算
 - 4). 連立一次方程式(3-3)を解き、離散点での温度を求める。
- 1) ~ 4) を目標の時間まで繰り返す。

4.2 CR(1)法とPCR(1)法

解法手順4)における各時刻 t_n での連立一次方程式の解法としてはPCR(1)法を採用する。PCR(1)法の基本となる方法はCR(1)法⁶⁾である。今回用いるCR(1)法は $k=1$ に相当する方法、すなわち反復過程における方向ベクトル p を一つ前の段階の方向ベクトルとだけ直交するように選ぶCR(1)法である。以下に連立一次方程式 $Ax = b$ をCR(1)法で解く計算手順を示す。

初期設定

r_0 を定める。
 $r_0 = b - Ax_0, \quad r_0 = r_0$

反復計算

$$\begin{cases} x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k \\ \alpha_k = \frac{(r_k, A p_k)}{(A p_k, A p_k)} \\ r_{k+1} = r_k - \alpha_k A p_k \\ p_{k+1} = r_{k+1} - \beta_k p_k \\ \beta_k = \frac{(A r_{k+1}, A p_k)}{(A p_k, A p_k)} \end{cases}$$

反復計算は相対残差が十分小さくなるまで繰り返す。

CR(1)法に前処理を行うPCR(1)法では、まず前処理として行列 A を次式で表すようにILLU分解する。

$$(4-2) \quad A = LU - R$$

ILLU分解は行列 A の非ゼロ成分だけをLU分解したものである。そして $Ax = b$ の代わり、これと同値な次の連立一次方程式

(4-3) $(LU)^{-1}Ax = (LU)^{-1}b$
をCR(1)法で解く。

5. スラフィン問題の数値実験結果

数値実験は Fig. 3 に示すような三角形分割された領域での問題に関して行った。この分割より得られる連立一次方程式の次元数は108となる。使用計算機はデータゼラル社MV4000（浮動小数点演算装置付）である。連立一次方程式の解法に要する時間はILU分解に約0.58(sec)、初期設定に約0.28(sec)、1回反復あたり約0.1(sec)である。自由境界の変化の様子には $\Delta t = 0.1$ として $30\Delta t$ まで求めた。Fig. 4 に、 $0.3\Delta t$ 毎に境界の変化の様子を表した図を示す。前にも述べたように、係数行列のILU分解は $t = \Delta t$ のときのみ実行し、以後 $30\Delta t$ まではこのILU分解を前処理を行った。

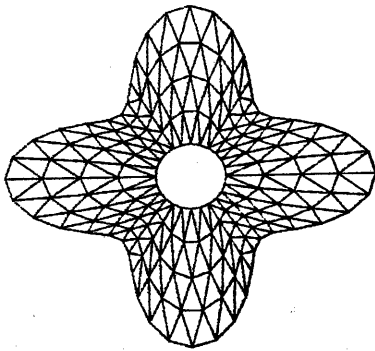


Fig. 3: 領域の三角形分解

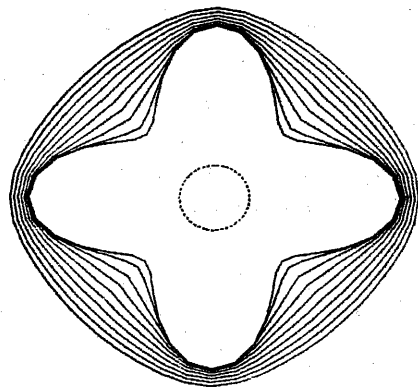


Fig. 4: 自由境界の変化の様子

連立一次方程式の反復解法の初期ベクトルと反復回数との関係を知るために、各時刻毎の反復解法の初期ベクトルとして、case A: 1スラップ前の連立一次方程式(3-3)の解 $\Omega(t-\Delta t)$ 、case B: これに質量行列 M を乗じた $(3-3)$ の右辺ベクトル $M\Omega(t-\Delta t)$ 、case C: 奇数番目の成分が-1、偶数番目の成分が1であるベクトルを選んで比較した。Table 1 にその結果を示す。

Table 1: 初期ベクトルと反復回数の関係

time step	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	15	20	25	30
初期ベクトル														
case A	5	4	4	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
case B	5	5	5	5	6	6	6	7	7	7	8	8	9	9
case C	5	5	5	6	6	7	7	7	7	8	9	9	10	10

6. 考察

6.1. 反復回数と固有値分布

Table 1 の結果からわかるように、初期ベクトルの選み方で time step が進むにつれて反復回数が違ってくる。case A については時刻 $t = \Delta t$ の ILU 分解が時刻 $t = 30\Delta t$ のときにも前処理として十分な役割を果たしているように見えるが、case C では時刻 $t = 30\Delta t$ では反復回数が $t = \Delta t$ のときの 2 倍になり、十分な前処理が行なわれていないと考えられる。

そこで、時刻 $t = \Delta t$ での ILU 分解の有効性を調べるために、まず、各時刻で現れる連立一次方程式の前処理をしない場合と前処理をした場合の係数行列の固有値分布を求めた。Fig. 5 には前処理をしない場合、Fig. 6 には前処理を行った場合の結果を示す。尚、固有値は、絶対値の小さい順に番号付けされているものとする。

2 つの図を見ると、ここで選んだ行列を前処理として用いることで、 λ_1 に固有値の最小絶対値を 1 に近づけること、 λ_2 に time step が進むにつれて固有値の絶対値は大きくなり、特に最大絶対値がかなり大きくなることばかりわかる。

今の問題では非対称行列を取っているために、係数行列の固有値分布を求めただけでは残差ノルムの収束性の評価はできない。ところで連立一次方程式

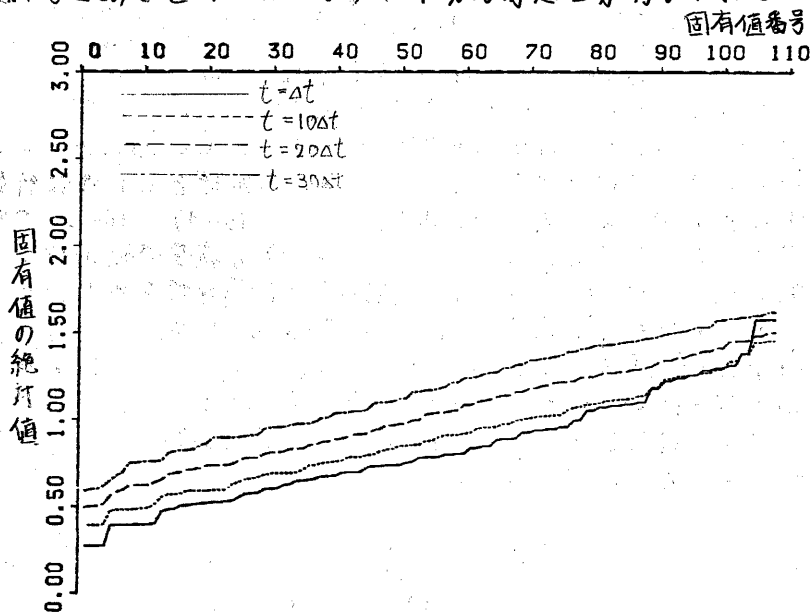


Fig. 5: 前処理をしない行列の固有値分布の変化。

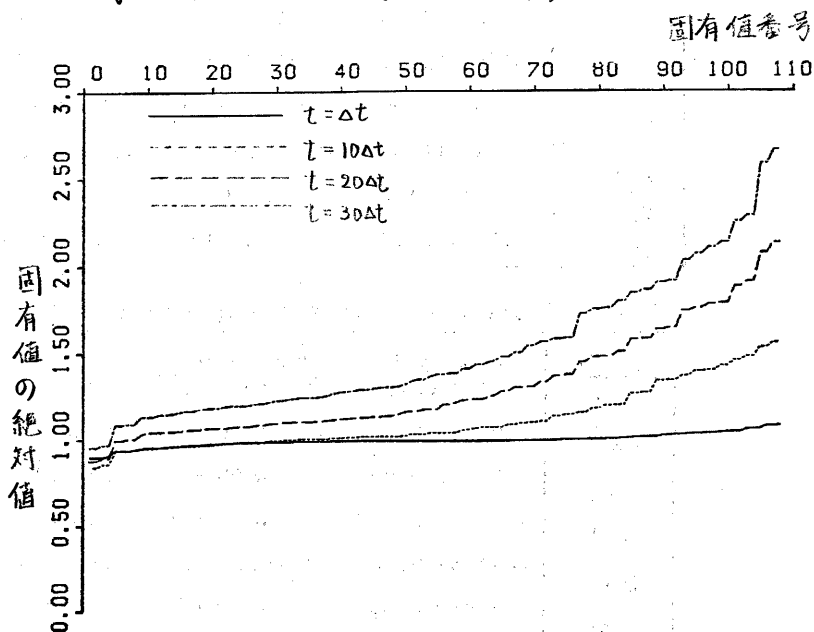


Fig. 6: 前処理した行列の固有値分布の変化。

$Ax=b$ の係数行列 A を対称部分 M と反対称部分 R に $A=M-R$ と分解すると、 M が正定値ならば CR (ϵ) 法の中心反復目の残差ノルム $\|Y\|_2$ の上限の評価が次の 2 つの式で与えられることが知られている⁽⁴⁾。

$$(6-1) \quad \|Y\|_2 \leq \left[1 - \frac{\lambda_{\min}(M)^2}{\lambda_{\max}(A^T A)} \right]^{1/2} \|Y_0\|_2$$

$$(6-2) \quad \|Y\|_2 \leq \left[1 - \frac{\lambda_{\min}(M)^2}{\lambda_{\min}(M)\lambda_{\max}(M) + P(R)^2} \right]^{1/2} \|Y_0\|_2$$

ここで、 $\lambda_{\max}(M)$ 、 $\lambda_{\min}(M)$ は行列 M の絶対値最大、最小の固有値を表す。また $P(R)$ は行列 R のスペクトル半径を表すものとする。尚、ここで M と R は (3-3)、(4-2) の M と R とは全く無関係であることに注意されたい。Table 2、3 には各時刻における係数行列を A としたとき、前処理をした係数行列と前処理をしない係数行列の M 、 R 、 $A^T A$ の固有値のうち、(6-1)、(6-2) の評価に必要な値を示す。次にこれらの値を用いて、(6-1)、(6-2) の減衰係数の値を求めた。Table 4 は (6-1) Table 5 は (6-2) についての減衰係数を前処理を行う場合とそうでない場合にそれぞれ求めた結果を示す。Table 4、Table 5 を見ると、(6-1) 又は (6-2) で前処理の有知性を判断するならば時刻 $t=15\Delta t$ 付近で、前処理を行った場合の減衰係数は前処理を行わない場合のそれに近い値となり、前処理の効果は殆どないと言える。このことは Table 1 で case B、case C の時刻 $t=15\Delta t$ 以後の反復回数が増え続けることに対応している。

Table 2. 前処理をした係数行列についての $\lambda_{\min}(M)$ 、 $\lambda_{\max}(M)$ 、 $P(R)$ 、 $\lambda_{\max}(A^T A)$

time step	$\lambda_{\min}(M)$	$\lambda_{\max}(M)$	$P(R)$	$\lambda_{\max}(A^T A)$
Δt	.8967140E+00	.1084022E+01	.2344242E-01	.1175165E+01
$5\Delta t$	.8638575E+00	.1255248E+01	.5491371E-01	.1576945E+01
$10\Delta t$	.8388365E+00	.1567477E+01	.6636536E-01	.2459524E+01
$15\Delta t$	.8498733E+00	.1859796E+01	.7232451E-01	.3462753E+01
$20\Delta t$	.8772700E+00	.2139223E+01	.7822400E-01	.4581590E+01
$25\Delta t$	.9128520E+00	.2409227E+01	.8705664E-01	.5811092E+01
$30\Delta t$	.9526579E+00	.2671788E+01	.9674597E-01	.7146639E+01

Table 3. 前処理をしない係数行列についての $\lambda_{\min}(M)$ 、 $\lambda_{\max}(M)$ 、 $P(R)$ 、 $\lambda_{\max}(A^T A)$

time step	$\lambda_{\min}(M)$	$\lambda_{\max}(M)$	$P(R)$	$\lambda_{\max}(A^T A)$
Δt	.2709800E+00	.1587687E+01	.5988602E-02	.2520803E+01
$5\Delta t$	.3235377E+00	.1507863E+01	.1833937E-01	.2273708E+01
$10\Delta t$	.3872437E+00	.1465330E+01	.1738049E-01	.2147237E+01
$15\Delta t$	.4433193E+00	.1474647E+01	.1662612E-01	.2174603E+01
$20\Delta t$	.4946543E+00	.1514513E+01	.1605813E-01	.2293750E+01
$25\Delta t$	.5434691E+00	.1570237E+01	.1558987E-01	.2465672E+01
$30\Delta t$	.5908042E+00	.1633475E+01	.1519051E-01	.2668263E+01

Table 4. (6-1)の減衰係数

time step	前処理をしない場合	前処理を行う場合
Δt	.9708703E+00	.3157592E+00
5 Δt	.9539621E+00	.5267751E+00
10 Δt	.9301625E+00	.7139094E+00
15 Δt	.9096239E+00	.7914132E+00
20 Δt	.8933263E+00	.8320228E+00
25 Δt	.8802117E+00	.8566021E+00
30 Δt	.8691847E+00	.8730093E+00

Table 5. (6-2)の減衰係数.

time step	前処理をしない場合	前処理を行う場合
Δt	.8293382E+00	.1732570E+00
5 Δt	.7855808E+00	.3137118E+00
10 Δt	.7358701E+00	.4666359E+00
15 Δt	.6994996E+00	.5445359E+00
20 Δt	.6735029E+00	.5912447E+00
25 Δt	.6539922E+00	.6224031E+00
30 Δt	.6384010E+00	.6447445E+00

6.2 初期ベクトルと反復回数との関係

6.1の結果から、連立一次方程式の反復法の初期ベクトルを case B $\times$ は case Cのように選ぶと、時刻 $t=15\Delta t$ あたりで前処理用の LU 分解を新しく求めた方が反復回数が減り、計算時間が少なくて済むと考えられる。ところが、Table 1 の case A では、time step が進んで (6-1) $\times$ は (6-2) の減衰係数が 1 に近くなるにもかかわらず反復回数は増えない。その理由としては初期ベクトルとしてイテラティブ前の連立一次方程式の解を選んでいるので、初期ベクトル自身が解に非常に似たベクトルになっていることが挙げられる。

共役傾斜法 (CG 法) に関しては、初期残差ベクトルが含んでいる係数行列 A の固有ベクトル成分の数が反復回数に影響を及ぼすことが知られている⁽³⁾。従って初期残差ベクトルがすべての固有ベクトル成分を一樣に含むような初期ベクトルを選べば、そのときの反復回数は次元数に近い数になることになる。そこで、時刻 $t=30\Delta t$ における前処理を行った後の係数行列の固有ベクトルを求め、初期残差ベクトルがそれらの成分を一樣に含むような初期ベクトルを選び時刻 $t=30\Delta t$ における連立一次方程式を解いたところ、反復回数は 13 回であった。これは Table 1 に示した結果のどの場合よりも多い数字で、この初期ベクトルは悪いベクトルである。

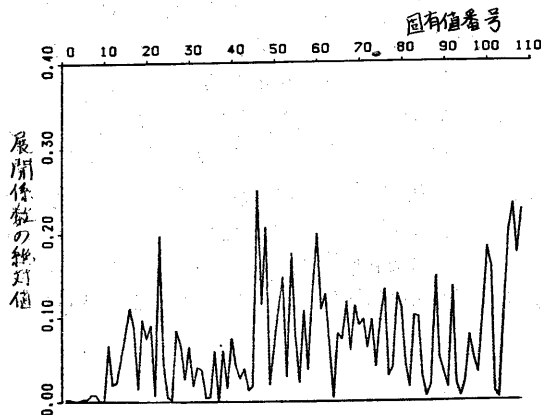


Fig. 7: 初期ベクトルの展開係数 (case A)

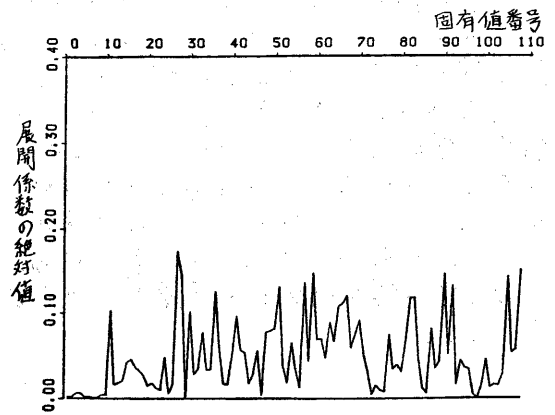


Fig. 8: 初期ベクトルの展開係数 (case B)

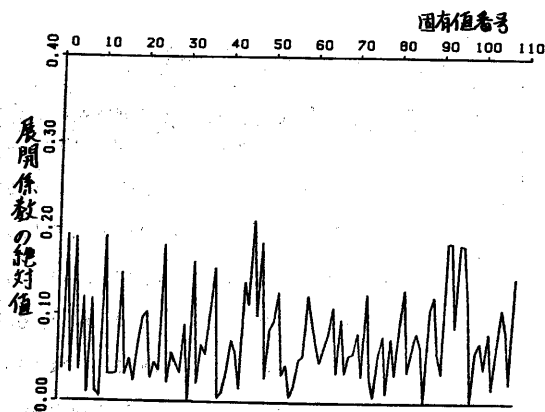


Fig. 9: 残差ベクトルの展開係数 (case C).

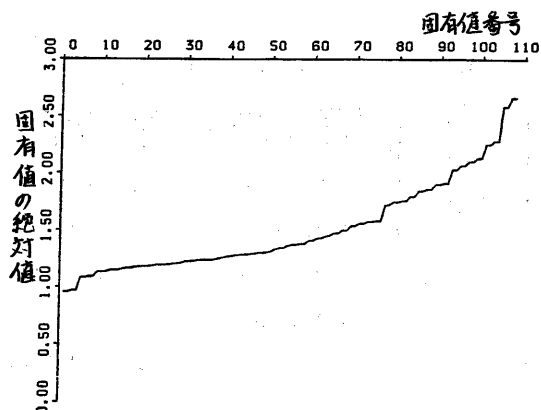


Fig. 10: $t=30\Delta t$ の前処理を行った係数行列の固有値分布.

と考えられる。従って、CRU法に対しても上記のCG法についての性質と似た傾向を示すと考えられる。次に case A, B, C の初期ベクトルから得られる初期残差ベクトルを固有ベクトル展開し、その展開係数の絶対値を求めた。Fig. 7 ~ Fig. 9 に case A ~ case C についての結果を示す。係数の並べ方は Fig. 5 の固有値の並べ方に対応している。また参考のために対応する固有値分布を Fig. 10 に示す。Fig. 7, Fig. 8 において、絶対値が 0 に近い値の係数の数はほぼ等しいのに対し、Fig. 9 のそれは他の 2 つの場合より少ない。このことは case A と case C の $t=30\Delta t$ における反復回数の違いに関連すると考えられる。しかし、case B についての判断は Fig. 8 からだけでは明らかでなく、さらに検討が必要であろう。

7. まとめ

2次元一相スラフアン問題を例に取り上げ、PCR(1)法の収束について考察を行った。この際、全体の計算時間を考慮して前処理のためのILU分解は時刻 $t=\Delta t$ のときだけ行い、以後このILU分解を前処理として用いた。そして、この方法による前処理の有効性を検討した。その結果、実際の反復回数、(16-1)又は(16-2)の残差ベクトルの上限などから、時刻 $t=15\Delta t$ 付近で前処理としての効果は弱くなることがわかった。しかし、case A については時刻 $t=30\Delta t$ まで計算しても反復回数は増えないという結果が得られた。そこで、case A での初期残差ベクトルを時刻 $t=30\Delta t$ における係数行列の固有ベクトルで展開し、展開係数を求めた。その結果、係数の中に 0 に近いものが相当含まれており、CG法に関する議論が適用できるとすれば、case A の初期ベクトルはかなり性質の良いものであることがわかった。たゞ、case B についての展開係数の分布は係数 A と似ているにもかかわらず反復回数は case A より多くなる。従って、初期残差ベクトルだけでなく反復の途中の残差ベクトルを展開して係数の変化を調べるなど、さらに検討が必要であろう。

参考文献

- (1) 村田健郎：CR(長)法の加速について，京都大学数理解析研究所講義録，No.514, pp 92~109, 1984.
- (2) 須賀伸介，南知行，森正武：スラフソン問題の有限要素解析に現れる非対称行列に対するPCR法，京都大学数理解析研究所講義録，刊行予定.
- (3) 山口昌哉，野木達夫：スラフソン問題，産業図書，1977.
- (4) V.R.B. Santos : A Direct Method for Solving Two-dimensional One Phase Stefan Problems, Mem. Numer. Math., Vol 16 pp 39~63, 1979.
- (5) M. Mori : Stability and Convergence of a Finite Element Method for Solving the Stefan Problem, Publ. RIMS, Kyoto Univ., Vol 12, No2, 1976.
- (6) Y. Saad : The Lanczos Biorthogonalization Algorithm and Other Oblique Projection Methods for Solving Large Unsymmetric Systems, SIAM J. Num. Anal., Vol 19, pp 485~506, 1982.
- (7) Stanley C. Eisenstat, et al, : Variational Iterative Methods for Nonsymmetric Systems of Large Equations, SIAM J. Num. Anal., Vol 20, No2, pp 345~357, 1983.
- (8) 野寺 隆 : 大型疎行列に対するPCG法, Seminar on Mathematical Sciences, Keio Univ., No7, 1983.