

鞍点型問題に対する二重前処理法

橋本 弘 治

A Double Preconditioned Method for the Saddle Point Problems

Kouji Hashimoto

(2016年11月25日受理)

1 序

本研究では鞍点型問題に対する二重前処理法の有効性を示すことを目的としており、行列解析的手法により反復計算における条件数を実際問題で多く出現する (1,1) - ブロックの性質の良い行列の条件数で上から抑えることで効果的な前処理法を提案する。

そこで、以下の鞍点型問題について考える。

$$\begin{pmatrix} A & B^T \\ B & O_m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f \\ g \end{pmatrix}. \quad (1.1)$$

但し、 A は n 次半正定値対称行列であり、 B は $m \times n$ 行列、 O_m は m 次零行列である。また、 f と g はそれぞれ n 次と m 次の既知ベクトルである。

鞍点型問題は微分方程式や最適化問題から生じる問題であり^{[12][14]}、しばしば大規模問題となり、また、不定値問題となる。一般に、不定値問題に対する数値解法は正定値問題に対する数値解法と比べてその収束速度が遅くなることはよく知られている。近年、鞍点型問題に対して前処理 Uzawa アルゴリズムが多くの研究者によって研究され、多くの有益な研究成果が発表されている^{[3][5][6][9]}。これらのアルゴリズムはいくつかの仮定の下で、外反復により計算を行うものであり、上記 (1.1) - ブロックの係数行列を正定値行列として取り扱うことができる。

1.1 一意可解性

行列 U を m 次正定値対称行列とする。この時、 (A, B^T) が full-row rank ($\text{rank}(A, B^T) = n$) ならば $A(U) \equiv A + B^T U B$ が正定値となることから、問題 (1.1) を以下として考えていく。

$$\begin{pmatrix} A(U) & B^T \\ B & O_m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f(U) \\ g \end{pmatrix}. \quad (1.2)$$

但し、 $f(U) \equiv f + B^T U g$ である。ここで、(1.1) は (1.2)

と同値であることから、 $A(U)$ と $S(U) \equiv BA(U)^{-1}B^T$ が正則行列ならば鞍点型問題 (1.1) は一意解を持つ。そして、問題 (1.1) の厳密解 (x^*, y^*) は以下に与えられる。

$$y^* = S(U)^{-1}(BA(U)^{-1}f(U) - g), \quad x^* = A(U)^{-1}(f(U) - B^T y^*). \quad (1.3)$$

本研究では $S(U)$ についての線形方程式に対する内反復における前処理について考える。

1.2 背景と目的

近年、多くの研究者によって正定値対称問題に対する内反復法の研究が行われ、これらに対する前処理はより高速化している現状にあり^{[1][11]}、また、鞍点型問題に対する前処理法の研究も盛んに行われている^{[2][3][4][8][10]}。

殆どの物理現象や自然現象における数値モデルは有限要素法や有限差分法により数値計算が可能であるが、分割幅を細かくする(行列サイズが大きくなる)ことにより計算コストが増大することはよく知られている。また、この計算コストは行列サイズが大きくなることによるものと、条件数が悪化することにより反復回数が増加することの2つの要因がある。行列サイズが大きくなることによる計算コストの増大は大規模計算を考える上では止むを得ないものではあるが、並列計算や分散処理等の有効な手法が適用可能である。一方、条件数が悪化することによる計算コストの増加を抑える為には前処理等の理論的考察が必要となる。よって、有効な前処理により行列の次元に無関係な条件数を計画することが出来れば総計算コストを見積もること、および、抑えることが可能となる。

ここで、(1.3) より鞍点型問題は $S(U)$ の線形方程式へと帰着されるが、 $S(U)$ は定義された行列ではなく計算により得られる行列であり、逆行列が介在することで密行列に近いことからその前処理は非常に難しいことが予想される。よって、 $A(U)^{-1}$ を計算することなく良い条件数を計画する為に二重前処理法を提案する。そこで、基本となる CG 法を基盤とした Uzawa 型の具体的な数値計算アルゴリズムを以下しておく。これは、結果として $S(U)$ についての内反復となるが、 $A(U)^{-1}$ が介在すること

より実際には外反復となっている。

アルゴリズム (Q-Preconditioned Iterative Solution Method of the Uzawa-type)

For an initial guess y_0 ,

Solve 1 $x_0 = A(U)^{-1}f(U) - B^T y_0$;

Compute $r_0 = Bx_0 - g$; $p_0 = Q^{-1}r_0$;

For $k=0$ to convergence

Solve 2 $w_k = BA(U)^{-1}B^T p_k$;

Compute $y_{k+1} = y_k + \alpha_k p_k$;

Compute $r_{k+1} = r_k - \alpha_k w_k$;

Solve 3 $u_k = Q^{-1}r_{k+1}$;

Compute $p_{k+1} = u_k - \beta_k p_k$;

End

Solve 4 $x_{k+1} = A(U)^{-1}(f(U) - B^T y_{k+1})$;

数値モデルに現れる多くの鞍点型問題において、行列サイズに独立な定数 $\gamma > 0$ に対して $\|A\| \leq \gamma$ を満たすこと

から、 $\text{cond}\left(Q^{-\frac{1}{2}}S(U)Q^{-\frac{1}{2}}\right) < 1 + \varepsilon \|A\|$ を満たす前処理行

列 U と Q (但し、 $0 < \varepsilon \ll 1$) を計画することができれば高速な数値解法を提案することができる。従って、本研究では実際的な問題に対して理論的に保証された性質の良い前処理行列 U と Q を提案することを目的とする。

1.3 記号

この論文では $\lambda_{\max}(\cdot)$ と $\lambda_{\min}(\cdot)$ をそれぞれ最大と最小の固有値として表して、 $\text{cond}(\cdot)$ を 2-norm に対する条件数として表すことにする。また、 I_k を k 次単位行列として、 $\|\cdot\|$ を 2-norm として表す。更に、 B を full-row rank ($\text{rank}(B) = m$) と仮定する。

2 前処理

ここでは鞍点型問題に対する前処理について議論していく。そこで、 $A(U) \equiv A + B^T U B$ を正則行列として、 B を full-row rank と仮定する。この時、 $S(U) \equiv BA(U)^{-1}B^T$ は正則行列となる。さて、 $S(U)$ の性質を解析することは数値解法の収束において重要となる。一般には $S(U)^{-1}$ を近似的に考えることになるが、鞍点型問題において $S(U)$ は与えられた行列ではなく、 $A(U)^{-1}$ が介在することによりその解析は非常に難しいこともよく知られている。そこで、本研究では $A(U)^{-1}$ を用いずに実際に有効な前処理を紹介していく。

2.1 既存結果

初めに、鞍点型問題 (1.1) に良く用いられている前処理について紹介する。そこで、 Q を m 次の正定値対称行列とする。この時、問題 (1.2) は以下と同値となる。

$$\begin{pmatrix} I_n & 0 \\ 0 & Q^{-\frac{1}{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A(U) & B^T \\ B & O_m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_n & 0 \\ 0 & Q^{-\frac{1}{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ \frac{1}{Q^{\frac{1}{2}}} y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f(U) \\ Q^{-\frac{1}{2}} g \end{pmatrix}. \quad (2.1)$$

ここで、Chen と橋本の結果から容易に導かれる以下の不等式を示しておく。

補題^[7]: A を n 次正定値対称行列、 C を m 次半正定値対称行列 $S_C := BA^{-1}B^T + C$ 、とする。この時、 B が full-row rank ならば以下を満足する。

$$\|L^T S_C^{-1} L\| \leq \frac{\|A\|}{1 + \lambda_{\min}(L^{-1}CL^{-T})\|A\|}.$$

ここに、 L は $LL^T = BB^T$ を満たす m 次の正則行列である。

行列 V と W を m 次正定値対称行列とする。この時、 $A(V) := A + B^T V B$ が正定値であり、 B が full-row rank ならば、 $A(V+W)^{-1} = A(V)^{-1} - A(V)^{-1}B^T(W^{-1} + BA(V)^{-1}B^T)^{-1}BA(V)^{-1}$ であることから以下の等式が成り立つ^[10]。

$$BA(V+W)^{-1}B^T = S(V) - S(V)(W^{-1} + S(V))^{-1}S(V) = S(V)(I_m - (I_m + S(V)^{-1}W^{-1})^{-1}).$$

更に、 $(I_m + WS(V))^{-1} = I_m - (I_m + S(V)^{-1}W^{-1})^{-1}$ であることから以下の等式を得る。

$$(BA(V)^{-1}B^T)^{-1} = (BA(V+W)^{-1}B^T)^{-1} - W. \quad (2.2)$$

初めに、鞍点型問題 (1.2) に対する既存の前処理法について紹介する。まず、関係式 (2.2) は以下と同値である。

$$\left(W^{\frac{1}{2}}S(V)^{-1}W^{\frac{1}{2}}\right)^{-1} = \left(W^{\frac{1}{2}}S(V+W)^{-1}W^{\frac{1}{2}}\right)^{-1} - I_m.$$

すなわち、 $W^{\frac{1}{2}}S(V)^{-1}W^{\frac{1}{2}}$ の固有値を λ とすると

$$W^{\frac{1}{2}}S(V+W)^{-1}W^{\frac{1}{2}} \text{ の固有値は } \lambda(1+\lambda)^{-1} \text{ となり、これは}$$

λ に関して単調増加関数となることから以下の等式を得る。

$$\text{cond}\left(W^{\frac{1}{2}}S(V+W)W^{\frac{1}{2}}\right) = \frac{\lambda_{\min}\left(W^{\frac{1}{2}}S(V)W^{\frac{1}{2}}\right) + 1}{\lambda_{\max}\left(W^{\frac{1}{2}}S(V)W^{\frac{1}{2}}\right) + 1} \text{cond}\left(W^{\frac{1}{2}}S(V)W^{\frac{1}{2}}\right). \quad (2.3)$$

よって、 $V = \kappa_1 I_m$ および $W = \kappa_2 I_m$ とすると次の関係式が成り立つ。

$$\begin{aligned} \text{cond}(S(\kappa_1 I_m + \kappa_2 I_m)) &= \\ &= \frac{\kappa_2 \cdot \lambda_{\min}(S(\kappa_1 I_m)) + 1}{\kappa_2 \cdot \lambda_{\max}(S(\kappa_1 I_m)) + 1} \text{cond}(S(\kappa_1 I_m)). \end{aligned}$$

ここに、 κ_1 と κ_2 は正定数とする。よって、 κ_1 を固定した上で $\kappa_2 \cdot \lambda_{\min}(S(\kappa_1 I_m)) \gg 1$ を満たすように κ_2 を十分大きく定めると $U = (\kappa_1 + \kappa_2)I_m$ は問題(1.2)に対する良い前処理となる。

2.2 二重前処理

定理： (A, B^T) と B をfull-row rankと仮定する。この時、 $U = \kappa Q^{-1}$ として $Q = BB^T$ とすると以下を満足する。

$$\text{cond}\left(\left(BB^T\right)^{-\frac{1}{2}} S\left(\kappa\left(BB^T\right)^{-1}\right)\left(BB^T\right)^{-\frac{1}{2}}\right) \leq 1 + \frac{1}{\kappa} \|A\|.$$

但し、 κ は正定数である。

証明：初めに、関係式(2.3)より、 $W = \kappa_2 (BB^T)^{-1}$ とすると以下が成立する。

$$\begin{aligned} & \text{cond}\left(\left(BB^T\right)^{-\frac{1}{2}} S(V+W)\left(BB^T\right)^{-\frac{1}{2}}\right) \\ &= \frac{\kappa_2 \cdot \lambda_{\min}\left(\left(BB^T\right)^{-\frac{1}{2}} S(V)\left(BB^T\right)^{-\frac{1}{2}}\right) + 1}{\kappa_2 \cdot \lambda_{\max}\left(\left(BB^T\right)^{-\frac{1}{2}} S(V)\left(BB^T\right)^{-\frac{1}{2}}\right) + 1} \\ & \quad \text{cond}\left(\left(BB^T\right)^{-\frac{1}{2}} S(V)\left(BB^T\right)^{-\frac{1}{2}}\right). \quad (2.4) \end{aligned}$$

ここで、 $A \equiv A(V)$ 、 $L \equiv (BB^T)^{\frac{1}{2}}$ 、 $C \equiv O_m$ として補題を用いると以下の評価式が得られる。

$$\begin{aligned} & \lambda_{\min}\left(\left(BB^T\right)^{-\frac{1}{2}} S(V)\left(BB^T\right)^{-\frac{1}{2}}\right) \\ &= \frac{1}{\left\|\left(BB^T\right)^{\frac{1}{2}} S(V)^{-1}\left(BB^T\right)^{\frac{1}{2}}\right\|} \geq \frac{1}{\|A(V)\|}. \end{aligned}$$

よって、以下の不等式が得られる。

$$\begin{aligned} & \lambda_{\min}\left(\left(BB^T\right)^{-\frac{1}{2}} S(V)\left(BB^T\right)^{-\frac{1}{2}}\right) + \frac{1}{\kappa_2} \leq \\ & \lambda_{\min}\left(\left(BB^T\right)^{-\frac{1}{2}} S(V)\left(BB^T\right)^{-\frac{1}{2}}\right) \left(1 + \frac{1}{\kappa_2} \|A(V)\|\right). \quad (2.5) \end{aligned}$$

ここで、 κ_2 は正定数であることから、(2.4)と(2.5)から以下の不等式が得られる。

$$\begin{aligned} & \text{cond}\left(\left(BB^T\right)^{-\frac{1}{2}} S(V+W)\left(BB^T\right)^{-\frac{1}{2}}\right) \\ &= \frac{\kappa_2 \cdot \lambda_{\min}\left(\left(BB^T\right)^{-\frac{1}{2}} S(V)\left(BB^T\right)^{-\frac{1}{2}}\right) + 1}{\kappa_2 \cdot \lambda_{\max}\left(\left(BB^T\right)^{-\frac{1}{2}} S(V)\left(BB^T\right)^{-\frac{1}{2}}\right) + 1} \\ & \quad \text{cond}\left(\left(BB^T\right)^{-\frac{1}{2}} S(V)\left(BB^T\right)^{-\frac{1}{2}}\right) \\ & \leq \frac{\kappa_2 \cdot \lambda_{\min}\left(\left(BB^T\right)^{-\frac{1}{2}} S(V)\left(BB^T\right)^{-\frac{1}{2}}\right) \left(1 + \frac{1}{\kappa_2} \|A(V)\|\right)}{\kappa_2 \cdot \lambda_{\max}\left(\left(BB^T\right)^{-\frac{1}{2}} S(V)\left(BB^T\right)^{-\frac{1}{2}}\right) + 1} \\ & \quad \text{cond}\left(\left(BB^T\right)^{-\frac{1}{2}} S(V)\left(BB^T\right)^{-\frac{1}{2}}\right) \\ & \leq 1 + \frac{1}{\kappa_2} \|A(V)\|. \quad (2.6) \end{aligned}$$

ゆえに、 $V = \kappa_1 (BB^T)^{-1}$ とすると(2.6)と $B^T (BB^T)^{-1} B$ の最大固有値が1であることから以下の評価が得られる。

$$\begin{aligned} & \text{cond}\left(\left(BB^T\right)^{-\frac{1}{2}} S\left(\kappa_1 + \kappa_2\right)\left(BB^T\right)^{-1}\right)\left(BB^T\right)^{-\frac{1}{2}} \\ & \leq 1 + \frac{1}{\kappa_2} \|A\left(\kappa_1\left(BB^T\right)^{-1}\right)\| \\ & = 1 + \frac{1}{\kappa_2} \|A + \kappa_1 B^T\left(BB^T\right)^{-1} B\| \\ & \leq 1 + \frac{1}{\kappa_2} (\|A\| + \kappa_1). \end{aligned}$$

従って、 $\kappa := \kappa_1 + \kappa_2$ として $\kappa_1 \rightarrow 0$ とすることにより証明は完結する。■

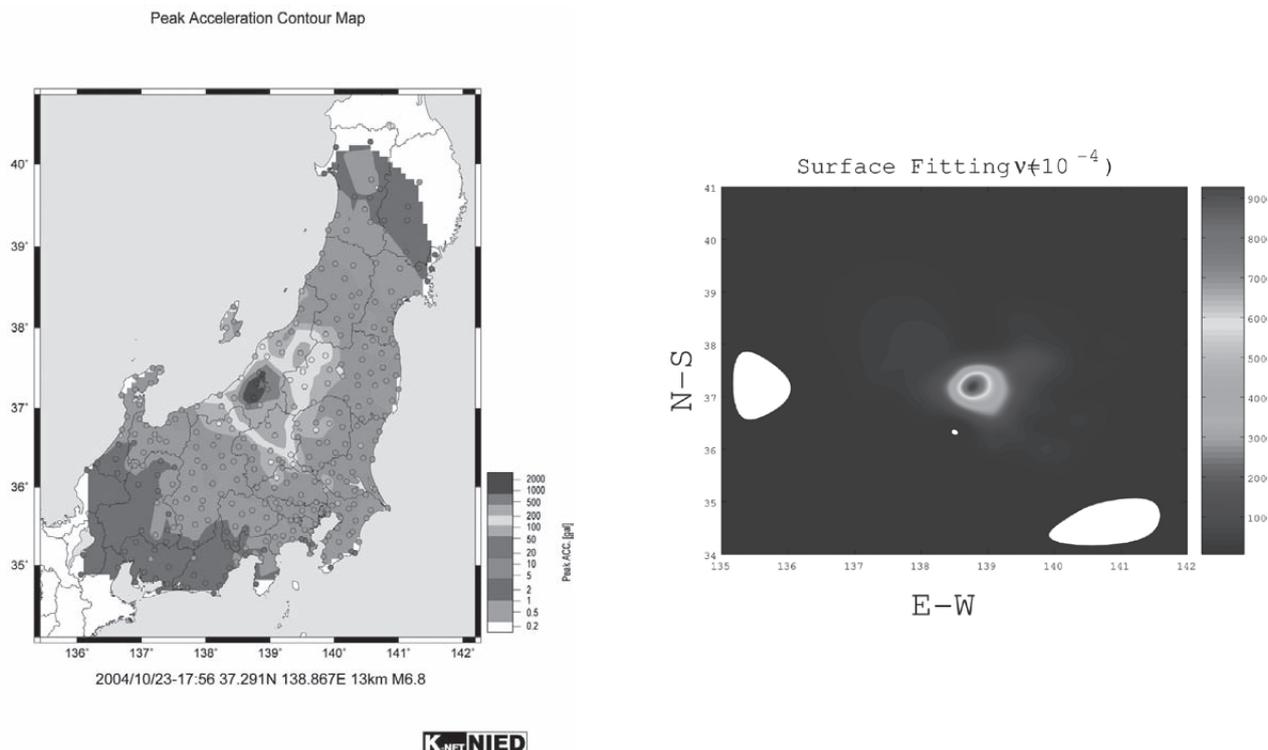


図2：例2の加速度分布図（左：K-Net）と近似解（右： $\nu = 10^{-4}$ ）

例2：第1新潟中越地震（2004年10月23日17:56発生（37.291N, 138.867E, 13Km, M6.8），観測点 c=327，提供：K-Net 防災科学技術研究所 強震観測網）

計算時間は $Q=BB^T$ が総じて小さくなっている。また、例2においても行サイズの増大に伴って総計算時間は $Q=BB^T$ が小さくなっていることが確認できる。

3.2 数値結果

以下に示す数値計算結果はすべて Dell Precision 650 Workstation Intel Xeon CPU 3.20GHz を用いて MATLAB により行った。また、 A_1 と BB^T の連立方程式は直接法（Cholesky 分解および Gauss の消去法）を用いて、 $A+BB^T$ UB の連立方程式は前処理付き CG 法（打ち切り基準： 10^{-12} ）を用いて数値計算を行った。

初めに、例1と例2の固有値の計算結果を以下に示す。

数値的誤差を含んでいる為に $\|A_1\|$ の値に変動が見られるが、この場合、行列の次元に関わらず $\|A_1\| \leq 5.3334$ と評価できることが分かっている。また、 $\|A\| = \max(\nu \|A_1\|, \|A_3^T A_3\|)$ であり、どちらの例においても $\|A\|$ は行列の次元に関わらず安定していることが数値結果より確認できる。

次に、数値解法に対する数値結果を以下に示す。

既存の数値解法 ($Q=I_m$) と本研究にて提案している二重前処理法 ($Q=BB^T$) を比較した結果を表2-1と表2-2に表している。例1と例2のどちらも $Q=I_m$ では行列サイズの増大に伴って反復回数が増加しているが、 $Q=BB^T$ では反復回数が殆ど一定となっていることが確認できる。当然に $Q=BB^T$ では1回の反復に必要とする計算コストが $Q=I_m$ に比べて大きい、特に例1で確認できるように総

表1-1：例1の固有値の計算結果

m (h^{-1})	$\ A_1\ $	$\ A_3^T A_3\ $	$\lambda_{\min}(A_3^T A_3)$
3481 (60)	3.9963	5.6031	$4.7695e-4$
6241 (80)	3.9979	4.1814	2^{-52}
9801 (100)	3.9986	2.9200	2^{-52}

表1-2：例2の固有値の計算結果

m (h^{-1})	$\ A_1\ $	$\ A_3^T A_3\ $	$\lambda_{\min}(A_3^T A_3)$
9801 (100)	3.9986	3.4708	0
39601 (200)	3.9996	1.8753	0
89401 (300)	3.9998	1.5538	0

表2-1：例1の Uzawa 型 Q- 前処理付き外反復解法の計算結果

Preconditioner	κ	ν	$h^{-1} = 60$		$h^{-1} = 80$		$h^{-1} = 100$	
			反復回数	時間(sec)	反復回数	時間(sec)	反復回数	時間(sec)
$U = \kappa Q^{-1}$								
$Q = I_m$	10	10^{-2}	27	458.8	36	1577.7	44	3938.7
$Q = BB^T$	10	10^{-2}	8	132.3	7	255.5	7	422.4
$Q = I_m$	100	10^{-2}	10	101.0	12	280.1	15	642.3
$Q = BB^T$	100	10^{-2}	4	77.4	4	167.1	3	235.2

表2-2：例2の Uzawa 型 Q- 前処理付き外反復解法の計算結果

Preconditioner	κ	ν	$h^{-1} = 100$		$h^{-1} = 200$		$h^{-1} = 300$	
			反復回数	時間(sec)	反復回数	時間(sec)	反復回数	時間(sec)
$U = \kappa Q^{-1}$								
$Q = I_m$	10	10^{-3}	17	458.8	31	6620.7	45	33812.6
$Q = BB^T$	10	10^{-3}	7	303.5	7	1750.4	7	4803.0
$Q = I_m$	10	10^{-4}	8	453.0	12	4121.7	16	16356.4
$Q = BB^T$	10	10^{-4}	7	793.4	7	4608.1	6	11341.1

4 結論

行列 A が正定値の場合に論文 [7] において提案された前処理法を拡張して、行列 A が半正定値の場合における鞍点型問題に対して、 BB^T を二重に適用した二重前処理法を提案した。前処理行列を BB^T とすることにより条件数の見積もりが容易に可能となると共に、多くの数理モデルにおいて $\|A\|$ は行列サイズに無関係な定数で抑えられることが殆どであり、大規模計算が必要となる鞍点型問題においては計算コストが抑えられる理論的に保証された有効な前処理を提案することが出来た。

参考文献

- [1] O. Axelsson; Iterative Solution Methods, Cambridge University Press, London, 1996.
- [2] O. Axelsson and M. Neytcheva; Eigenvalue estimates for preconditioned saddle point matrices, Numer. Linear Algebra Appl. 13 (2005), pp.339-360.
- [3] M. Benzi, G. H. Golub, and J. Liesen; Numerical Solution of Saddle Point Problems, Acta Numerica, 14 (2005), pp.1-137.
- [4] M.A. Botchev and G.H. Golub; A class of nonsymmetric preconditioners for saddle point problems, SIAM J. Matrix Anal. 27 (2006), pp.1125-1149.
- [5] J. Bramble, J. Pasciak and A. Vassilev; Analysis of the inexact Uzawa algorithm for saddle point problems, SIAM J. Numer. Anal. 34 (1997), pp.1072-1092.
- [6] X. Chen; On preconditioned Uzawa methods and SOR methods for saddle point problems, J. Comp. Appl. Math. 100 (1998), pp.207-224.
- [7] X. Chen and K. Hashimoto; Numerical validation of solutions of saddle point matrix equations, Numer. Linear Algebra Appl. 10 (2003), pp.661-672.
- [8] H.S. Dollar and A.J. Wathen; Approximate factorization constraint preconditioners for saddle-point matrices, SIAM J. Sci. Comput. 27 (2006), pp.1555-1572.
- [9] H.C. Elman and G.H. Golub; Inexact and preconditioned Uzawa algorithm for saddle point problems, SIAM J. Numer. Anal. 31 (1994), pp.1645-1661.
- [10] G.H. Golub, C. Greif and J.M. Varah; An algebraic analysis of a block diagonal preconditioner for saddle point systems, SIAM J. Matrix Anal. 27 (2006), pp.779-792.
- [11] A. Greenbaum, Iterative Methods for Solving Linear Systems (Frontiers in Applied Mathematics Vol.17), SIAM, Philadelphia, PA., 1997.
- [12] M. Hegland, S. Roberts and I. Altas; Finite element thin plate splines for surface fitting, Computational Techniques and Applications: CTAC97 World Scientific (1997), pp.289-296.
- [13] M.H. Schultz; Spline Analysis, Prentice-Hall, London, 1973.
- [14] M. Tabata and D. Tagami; A finite element analysis of a linearized problem of the Navier-Stokes equations with surface tension, SIAM J. Numer. Anal. 38 (1999), pp.40-57.