

効率的な前処理による反復法 計算物理への適用例

NEC 曾谷勝義

1. はじめに

大型連立一次方程式を解く考えは、数値計算のかなり初期の頃からあった。その原点は古典派の代表である Gauss の消去法(1823) (直接法) に迄、遡る事が出来る。その後、物理学や工学の実用的な問題を、反復法による数値解法で考え出す人が次々と出てきた。その内の一人が Southwell(1946)である。彼の提唱したものが 'Iterative Method Relaxation' である。これは Jacobi(1837)等に見る古典的反復法に比べて収束の高速性を目指している。この解法は 'Noncyclic Iterative Method' であり、人々の洞察力が必要であった。これに対して Geiringer(1949)、Reich(1949)、Young(1950)、Frankel(1950)等は始めに手順を定めると、解の途中過程では変更しない 'Cyclic Iterative Method' を提唱した。これらの人々が提案した解法は、それまでに発表された古典的解法に比べて比較的高速性を保ちながら、解の安定とスムーズな反復展開が期待出来る。この時期に Hestenes (1952)らによって提案された共役勾配法 (CG法) は、対象とする行列は一部に制限されるが、数学の抽象論に基礎を置き、これは n 次元空間を考え、一次独立なベクトルを定義し、ある係数を求め、空間内を直交性を保って探索する事により、 n 次元の行列は、理論的には n 回の反復で収束する事が出来る考えを示した。これらをまとめて近代理論と呼ぶ事にする。

大型な反復計算は、その後も研究が続き、最近では 1976 年世の中に初めてスーパーコンピュータが出現してからは、産学とも大規模大容量の計算を可能とする対象物の選定と、そのモデルの数値解法に興味を持つ人が増えてきた。この高速なスーパーコンピュータの普及と共に、時代の要請からそれらに適する各種解法が次々提案されて来た。スーパーコンピュータ向けアルゴリズムのベクトル化、更に最近では並列型のスーパーコンピュータ迄登場してきた。

この論文では、スーパーコンピュータの普及と共に、最近各方面で研究されている現代理論として大型行列に対する行列の対称非対称の分類と考え方、行列の規則不規則の分類と考え方、及び行列の効率化の考えから、各種の前処理 (Preconditioning) を探求し、その高速解法の実現と計算物理への適用事例を報告する。

2．直接法と反復法

連立一次方程式に代表される数値解法は大別すると、直接法と反復法に分けることが出来る。行列における数値解法の原点とも言うべき Gauss の消去法は直接法の代表的なものである。この解法は係数行列に順次直接消去を行う方法で、有限回の操作でかなりの厳密解を得る事が出来る。行列の性質としては、密行列が適している。但し、大型行列には不向きである。例えば、次元数 $n = 5000$ の場合を考えると、その行列成分は

$5000 \times 5000 = 2.5 \times 10^7$ であり、それにかかる計算時間は、理論的に $\frac{n^3}{3}$ 回の乗算が必要で、この場合 $\frac{5000^3}{3} \approx 4 \times 10^{10}$ 回の計算ステップが必要とされる。

反復法の代表として Jacobi 法を改良した Gauss-Seidel 法を取り上げることが出来る。この解法は係数行列に僅かな変形を行った定行列を、1 ステップ前のベクトルに繰り返し乗じて解に近づく方法として反復を行っている。この反復法は係数行列そのものは変形を受けないが、係数行列の持つ性質によって収束の速さが変化し、場合によっては収束しないケースもあり得る。代表的な古典理論の反復法であり、中小規模な疎行列が適している。一口に言えば、直接法は係数行列の形は刻々と変化し、ゼロ要素に至る迄、ノンゼロ要素に置き換えて逐次計算して行く為、中小規模な密行列に適し、厳密解が期待出来るが、一般的に計算時間はかかる。一方、反復法は大規模な疎行列に適しており、この大規模疎行列は規則性を持つ事が多く、例えば共役勾配法を用いた場合、次元数 $n = 5000$ の場合を考えると、理論的にステップは 5000 回で終了する。しかし、係数行列の性質（条件数）に左右される事があり、反復する方法によってかなりの高速性が発揮出来るが、収束そのものに問題が含まれており、不安定な要因が混在する場合がある。

数値解法の歴史を辿ってみると、次のことが言える。

18 世紀から 19 世紀初めの計算方法の考え方は、経験主義による力学に基礎をおく物理法則に大きく依存するものであった。それらは古典数学としての強存在（解析的考え方）としての数値計算の確立であった。Gauss の消去法に代表される直接法としての解法は、まさにこの流れを引いていると考えることが出来る。この伝統的解析方法の進展に対して、その後批判的精神による解析方法の基礎的吟味により、ある転換期があった。もともと別な出発点から流れてきたものであるが、それは純粹に数概念の上に解析方法を構成する考えが一方で発達してきた。又、その時期迄考えられていた「無限小」の概念が確立した形をとり、連続的反復事象が極限まで続くと言う考えが出された。この代表的なものが Jacobi の反復法である。古典派 Gauss を原点とした直接法の流れとして、Jordan は行列を有界部分集合に見たてて、ある条件を満たす測度を対応させる考えから、Gauss の消去法を改良して Gauss-Jordan 法を提案した。

Cholesky は最小自乗法の考えから下三角行列と上三角行列（下三角行列の転置行列）に分解する事により、効率良く解ける事を提案した。こうした考えは、その後の計算機の発達と共に、理工学の分野で対象とした数式モデルが大型化するにつれていろいろな工夫がなされ、直接法反復法の進展として多くの解法に引き継がれた。物理学から機械建築土木にみる工学問題へ、又大気の流れ海洋の流れにみる流体解析へ、そして電気電子の発達と共に電磁場解析、回路解析へ、更に生化学生命科学的発達と共に分子科学の領域へと広がって来た。

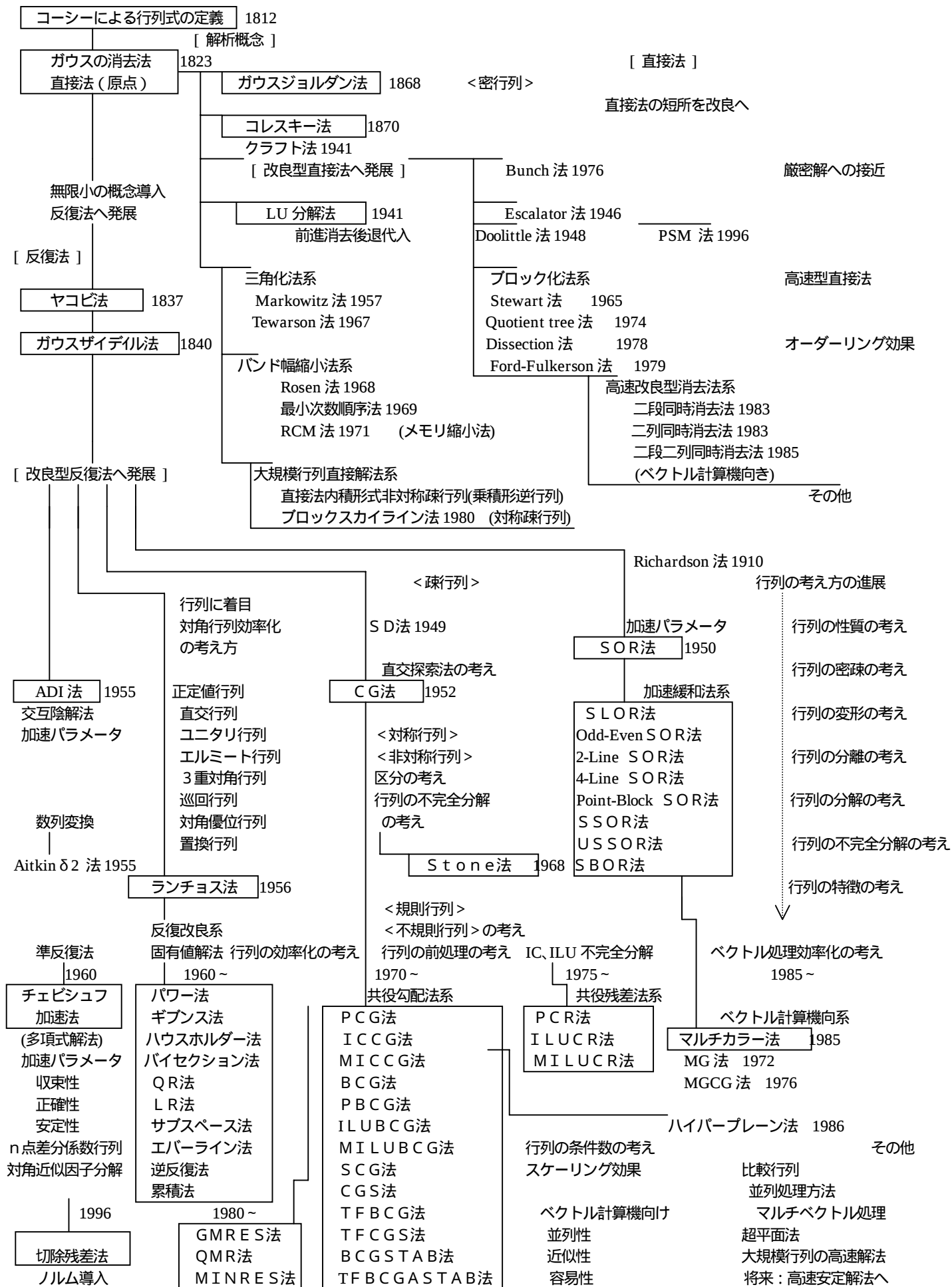
直接法は概念的にも掴み易く、対象とする規模やモデルによってはこの方法が適している場合もあり、それは計算解への安定性と厳密解への接近の長所があり、近年特に大型行列に対して、その高速性を目指して幾つもの改良型直接法の解法が提案されてきた。例えば、構造解析の分野では、数式モデルへの差分スキームの段階で、それまでの中心差分法から有限要素法、境界要素法が提案され、それに伴って数学のグラフ理論を応用したブロック化法や、バンド幅縮小法が研究されてきた。回路解析の分野では行列を隅に集めて、効率良く処理する手段として、三角化法が研究されて来た。最近では計算回数を減らす工夫として、行又は列の順序付けを行うオーダリングの考えがある。

これに対して反復法の進展は、繰り返して行う無限小の基で、行列をどの様に考えるか、から出発している。Jacobi 法、Gauss-Seidel 法を基礎にした改良型反復法の解法は、いずれも行列の性質そのものの効率化を追求しており、例えば近代理論の一つSOR法は、加速緩和因子を用いる事により、Gauss-Seidel 法より漸近収束率が優れている点にある。これら行列解法の考え方は、その後時代と共に発達して行く。例えば固有値問題が盛んに研究された1960年代、行列そのものに着目して、対角行列効率化が中心に研究されて来た。こうした行列の性質を歴史的に見ると、かなり初期には行列の疎密の考えが起こり、そして行列の変形の考えへと、そして行列の分離の考えへ、更に行列の分解の考えへ、やがて行列の不完全分解の考えへと進展して行く。これら行列に対する考えの進展には、計算機の発達と共に変化してきた様に思われる。

一方、数学理論としての応答曲面による極値問題として研究された最急降下法（SD法）は、その後現代数学の弱存在として空間論のCG法系へ、そして汎関数残差論のCR法系へと発展して行く。近年の計算機の発達と共に、大型行列の研究に対しては、行列の対称非対称や、行列の規則不規則、行列の不完全分解、行列の前処理の効率化へ進んで行く。最近では、行又は列にある値を乗じて行列要素の大きさを揃えるスケーリングの考えがある。更にスーパーコンピュータの発達に合わせて、直接法反復法ともベクトル計算機向きの解法が幾つも提案されている。

以上の内容をまとめて、歴史的に見た数値解法の発展図を次に示したい。

3. 数値解法の発展図



4．数値解法の困難性

この節では、先ず数値計算が解析要求としての立場から、数値の解法としてどのような技術的背景があるか考えたい。次の連立一次方程式を考える。

$$\mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{b} \quad (4.1)$$

ここで移流項のない熱拡散方程式等を考えた場合、これはエネルギー最小の様な変分原理を満たしている。この時、差分スキームをデカルト座標で定式化すれば行列 $\mathbf{A}$ は対称化出来るが、座標を円筒座標や曲線座標とすると回転による微小微分角や交互微分項が現れ、行列 $\mathbf{A}$ は対称性が崩れ非対称となる。次の $\mathbf{M}$ 行列を定義する。

$$\mathbf{M} \text{ 行列 } \quad \left(\mathbf{A} = (a_{ij}) ; a_{ii} > 0 , a_{ij} \leq 0 , \mathbf{A}^{-1} \geq 0 \right)$$

行列 $\mathbf{A}$ が $\mathbf{M}$ 行列であれば、数値解法は比較的容易である事が知られている。従って差分形式を考える時、この $\mathbf{M}$ 行列に近づける為、従来からの中心差分法より、風上差分法が重宝される傾向にある。中心差分法が計算精度の面で良好な場合が多いが、安定収束の面で一考の余地があるのに比べて、風上差分法はより安定収束させる計算へ進める事が期待出来るが、反面計算精度の面で若干の問題を含む。次に条件数問題に関しては、熱伝導率等の媒体の係数が場所によって変化させると、この時方向やその場所によって、バラツキを生じ、こうしたモデルの場合は条件数が大きくなり、つまり Stiff な関係となり、数値解法が困難になってくる。

現実の解法には、数値解法アルゴリズム、プログラミング、コンピュータハードウェアに依存する記憶容量、処理速度等も問題となってくる。スーパーコンピュータを有効に活用する上で、計算の高精度を追求するあまり、差分法を2次にして離散化すると、近似式に使われる差分の点数が増え、効率的なベクトル計算は難しくなる。一般的に言える事は、更新された新しいデータを順次使うアルゴリズムでは収束する回数は少なく済むが、それに引き換え計算ステップは再帰的となり、ベクトル化は困難となる。古いデータのみ使うアルゴリズムでは、スーパーコンピュータの効率化を求めるベクトル化には向いており、ベクトルパイプラインを十分稼働させることが出来るが、収束の面で効率が良くない。幾つものアルゴリズムはこうした長短を持っている為、計算対象とする行列の性質により使い分ける必要がある。計算ステップにおけるアルゴリズムの収束速度とベクトルパイプラインの効率的な活用に対して、数学的な安定性を保ちながら収束性を良くし、出来る限りベクトル長の長い計算技法を求めてスーパーコンピュータの有効利用を計る必要がある。数値解法の困難性を考えるとき、以下の3点が言える。

$$\left(\begin{array}{c} \rightarrow \\ < \end{array} \quad \text{より困難性を示す} \right)$$

対称形 < 非対称形 / 正定値 < 非正定値 / 条件数小 < 条件数大

5 . 前処理法と効率化

大型行列における効果的解法としての共役勾配法系を考えるにおいて、この解法は計算の理論上 n 回の反復で真の解に到達する事が出来るが、実際の計算過程では丸め誤差の影響もあり、収束の為に n 回以上の反復を必要とする事がある。しかし、他の解法と違って、計算の理論上よりも少なく収束する場合もある。それは行列 A の固有値が重複（縮退）している場合であり、その重複している分だけ n 回よりも少ない回数で収束することが出来る。これは与えられたマトリックスに対し、適切な前処理を施す事により、少しでも密集固有値形に導き、条件数を改良するアプローチである。幾何学的には n 次元固有値空間における超楕円体が球体に近づく事を意味し、これにより数値解法が容易になってくる。前処理のあと勾配法を適用する事は、最短距離で解に収束させる事を意味している。行列の前処理の方法として A を正値対称行列とし、 P, Q を $n \times n$ 正則行列とする。ここで、(4.1)式に同値な方程式を次に定義する。

$$P^{-1} A Q^{-1} (Q x) = P^{-1} b \quad (5.1)$$

$$(5.1) \text{式で } B = P^{-1} A Q^{-1}, \quad c = P^{-1} b, \quad B y = c$$

を解き、次いで $Q x = y$ を解く。この P, Q は計算の容易性から、一般には対角行列や三角行列が選ばれる。この時、 B の条件数は A よりも良くなる行列である。この条件数を改良する方法として、以下の3ケースを示す。

〔行列分離法〕(Matrix Splitting)

$A = L + I + U$, L ; 下三角行列 , I ; 単位行列 , U ; 上三角行列
 $P = I + \alpha L$, $Q = I + \alpha U$ ($= L^T$) とおき、最適な α により A の条件数を改良する。

〔行列分解法〕(Matrix Decomposition)

A はコレスキー分解によって、下三角行列 L と上三角行列 L^T の積で表現され、
 $A = L L^T$ に分解する事が出来る。

〔行列スケーリング法〕(Matrix Scaling)

D は A の対角要素からなる対角行列とする。

$$D = \text{diag} [a_{11}, a_{22}, \dots, a_{nn}] , \quad a_{ii} \geq 0$$

$$D^{-1/2} = \text{diag} \left[a_{11}^{-1/2}, a_{22}^{-1/2}, \dots, a_{nn}^{-1/2} \right] \quad (4.1) \text{式は次の形になる。}$$

$$D^{-1/2} A D^{-1/2} \left(D^{1/2} x \right) = D^{-1/2} b \quad \text{この場合}$$

$$D^{-1/2} A D^{-1/2} \text{ の対角要素は } 1 \text{ となる。}$$

6 . 前処理法の幾何学的解釈

条件数の改良の考えを以下に示す。固有値が密集している時、密集している個数のみ収束が早まる事が分かる。元の行列 A に対して、ある種の行列（非単位行列）を掛けると、条件数は悪くなり、又もとの行列 A に対して、ある種の行列（非単位行列）で割る（逆行列を掛ける）と条件数は良くなる。これは与えられたマトリックスに対し、適切な前処理を施す事（スケーリング効果）により、少しでも密集固有値形に導き、条件数を改良する事を意味している。もとの行列 A の最大固有値 $\lambda_{\max}$ 、最小固有値 $\lambda_{\min}$ とし、ある種の行列の最大固有値 λ_{11} 、最小固有値 λ_{1n} とすれば、

$$2 \text{ つの行列を掛ける事は } \lambda_{\max} \times \lambda_{11} / \lambda_{\min} \times \lambda_{1n} = \text{Ratio 1} \quad (6.1)$$

$$2 \text{ つの行列を割る事は } \lambda_{\max} \div \lambda_{11} / \lambda_{\min} \div \lambda_{1n} = \text{Ratio 2} \quad (6.2)$$

(6.1)、(6.2)式から $\text{Ratio 1} > \text{Ratio 2}$ となる事は明らかである。

つまり、ある種の行列で割ること（逆行列を掛ける事）によって、最大最小の比は小さくなる事が分かる。ある種の行列は、もとの行列 A をコレスキー分解した行列やもとの行列 A の対角行列を取り扱う事が望ましい。ここで A の対角行列を D とする。

$\tilde{A} = D^{-1/2} A D^{-1/2}$ と置き、(4.1)式を次の様な形にする。

$$\left(D^{-1/2} A D^{-1/2} \right) D^{1/2} x = D^{-1/2} b \quad (6.3)$$

ここで $D^{1/2} x \rightarrow \tilde{x}$, $D^{-1/2} b \rightarrow \tilde{b}$ と置くことによって

$$\tilde{A} \tilde{x} = \tilde{b} \quad (6.4)$$

この事は A をそのまま計算するよりも $\tilde{A}$ を計算するほうが速い事が予想できる。

Gerschgorin の定理を使って 2 次元平面状に幾何学的に解釈を行ってみる。

S は A に似た行列とする。 $S \neq 0$, $\tilde{A} = S^{-1/2} A S^{-1/2}$ を作成する。

ここで λ は次の和集合（ $\cup$ ）として定義される。

$$\lambda \in \bigcup_{i=1}^n \left\{ a_{ii} - \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}| , a_{ii} + \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}| \right\} \quad (6.5)$$

従って、 A の固有値 $\lambda_{\max}$ は以下の範囲になる。

$$\min_i \left\{ a_{ii} - \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}| \right\} \leq \lambda \leq \max_k \left\{ a_{kk} + \sum_{l=1, l \neq k}^n |a_{kl}| \right\} \quad (6.6)$$

$\tilde{A}$ の固有値 $\tilde{\lambda}$ とすると、以下の範囲になる。

$$\min_i \left\{ 1 - \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}| / \sqrt{a_{ii}} \sqrt{a_{jj}} \right\} \leq \tilde{\lambda} \leq \max_k \left\{ 1 - \sum_{l=1, l \neq k}^n |a_{kl}| / \sqrt{a_{kk}} \sqrt{a_{ll}} \right\} \quad (6.7)$$

つまり $\lambda_{\max} / \lambda_{\min} > \tilde{\lambda}_{\max} / \tilde{\lambda}_{\min}$ となる。いま $a_{11} < a_{22}$ と仮定する。
($a_{11} > a_{22}$ の場合は、以下の説明で最大固有ベクトルが x_2 軸に隣接した楕円体)

$$\begin{aligned} (\mathbf{x}, \mathbf{A} \mathbf{x}) &= \sum_{i,j=1}^n a_{ij} x_i x_j = 1 \\ \mathbf{x} &= (0, \dots, 0, x_{ii}, 0, \dots, 0) \end{aligned} \quad (6.8)$$

$x_i = \pm 1 / \sqrt{a_{ii}}$ となり、(6.8)式は n 次元空間における楕円体を形成する。

n 次元楕円体の x_i に対する切片は $\pm 1 / \sqrt{a_{ii}}$ の位置である。(図 6.1)
行列 $\mathbf{A}$ に対して、第 k, k' 番目の固有値 λ と固有ベクトル $\mathbf{v}$ の関係は

$$\sum_{i'=1}^p v_{ki} \mathbf{A}_{ii'} = \lambda_k v_{ki} \quad (6.9)$$

$$\sum_{i'=1}^p v_{k'i'} \mathbf{A}_{ii'} = \lambda_{k'} v_{k'i'} \quad (6.10)$$

を満足する。この(6.9)式に $v_{k'i'}$ を (6.10)式に v_{ki} を掛けて i について加えると
(6.9)、(6.10)式の左辺は等しくなり

$$\sum_{i'=1}^p v_{ki} v_{k'i'} \mathbf{A}_{ii'} = \lambda_k \sum_{i=1}^p v_{ki} v_{k'i'} \quad (6.11)$$

$$\sum_{i'=1}^p v_{ki} v_{k'i'} \mathbf{A}_{ii'} = \lambda_{k'} \sum_{i=1}^p v_{ki} v_{k'i'} \quad (6.12)$$

(6.11)式、(6.12)式から

$$(\lambda_k - \lambda_{k'}) \sum_{i=1}^p v_{ki} v_{k'i'} = 0 \quad (6.13)$$

(6.13)式で

$$\lambda_k \neq \lambda_{k'} \quad \text{ならば、} \quad \sum_{i=1}^p v_{ki} v_{k'i'} = 0 \quad \text{が成立しなければならない。}$$

つまり固有ベクトルは互いに直交する事を意味している。

$$\text{ここで、} \quad \lambda_{\max} = \max_{\mathbf{x} \neq 0} (\mathbf{x}, \mathbf{A} \mathbf{x}) / (\mathbf{x}, \mathbf{x}) \quad (6.14)$$

$$\lambda_{\min} = \min_{\mathbf{x} \neq 0} (\mathbf{x}, \mathbf{A} \mathbf{x}) / (\mathbf{x}, \mathbf{x}) \quad (6.15)$$

である。 $\tilde{\mathbf{A}}$ に関する n 次元楕円体は次式で表現される。

$$(\mathbf{x}, \tilde{\mathbf{A}} \mathbf{x}) = 1 \quad \text{であるから、(6.8)式と同じく次式で示される。}$$

$$(\mathbf{x}, \tilde{\mathbf{A}} \mathbf{x}) = \sum_{i,j=1}^n \tilde{a}_{ij} x_i x_j = 1 \quad (6.16)$$

いま $\mathbf{S}$ を対角行列とすれば

$$\tilde{\mathbf{A}} = \mathbf{S}^{-1/2} \mathbf{A} \mathbf{S}^{-1/2} \quad \text{とすると} \quad \tilde{a}_{ii} = 1 \quad (i = 1, \dots, n)$$

n 次元楕円体 $(\mathbf{x}, \tilde{\mathbf{A}} \mathbf{x}) = 1$ の x_i 軸切片は $x_i = \pm 1$ ($i = 1, \dots, n$)

となる。 $\tilde{A}$ で構成される n 次元空間における楕円体を考える。

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \mathbf{x} \\ \tilde{A} \mathbf{x} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \mathbf{x} \\ \mathbf{S}^{-1/2} \mathbf{A} \mathbf{S}^{-1/2} \mathbf{x} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \mathbf{S}^{-1/2} \mathbf{x} \\ \mathbf{A} \mathbf{S}^{-1/2} \mathbf{x} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (6.17)$$

$$\mathbf{y} = \mathbf{S}^{-1/2} \mathbf{x}, \quad \mathbf{x} = \mathbf{S}^{1/2} \mathbf{y} \quad (6.18)$$

$$x_i = \sqrt{a_{ii}} y_i, \quad (i = 1, 2, \dots, n)$$

従って、スケーリング後の楕円体 $(\mathbf{x}, \tilde{A} \mathbf{x}) = 1$ において、各 x_i の切片が ± 1 を通る事から、最大固有ベクトル軸は x_1 から 45° 近く回転した形になり、元の楕円体 $(\mathbf{x}, \mathbf{A} \mathbf{x}) = 1$ を各 x_i 方向に $\sqrt{a_{ii}}$ 倍引き伸ばした楕円体となり、より球体に近い形を作る。(図 6.2) n 次元空間楕円体の最大固有値、最小固有値から

$$\min_{\mathbf{x} \neq 0} (\mathbf{x}, \mathbf{x}) / (\mathbf{x}, \tilde{A} \mathbf{x}) = 1 / \tilde{\lambda}_{\max} \quad (6.19)$$

$$\max_{\mathbf{x} \neq 0} (\mathbf{x}, \mathbf{x}) / (\mathbf{x}, \tilde{A} \mathbf{x}) = 1 / \tilde{\lambda}_{\min} \quad (6.20)$$

となる。つまり、条件数の大きい行列に対して、

$$\tilde{A} = \mathbf{S}^{-1/2} \mathbf{A} \mathbf{S}^{-1/2}$$

によるスケーリングする事によって、幾何学的には長軸と短軸の比が 1 に近づくき、より球に近い楕円体になる(条件数が 1 に近づく)事を意味する。

元の問題 $\mathbf{A}$ の固有値、固有ベクトルの
幾何学的表現(二次元図)

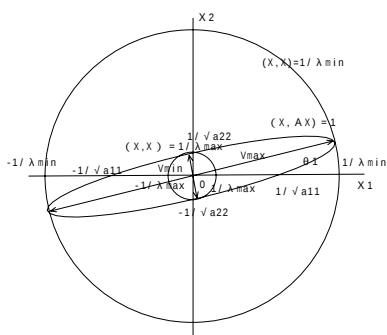
$\mathbf{A}$ の最大固有値 $\lambda_{\max}$, 最大固有ベクトル $\mathbf{V}_{\max}$

$\mathbf{A}$ の最小固有値 $\lambda_{\min}$, 最小固有ベクトル $\mathbf{V}_{\min}$

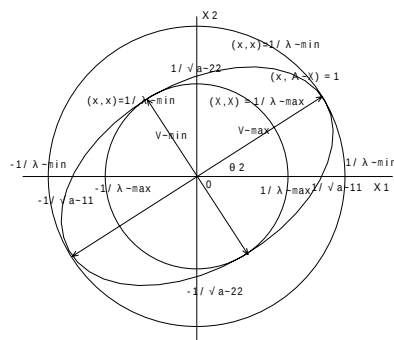
スケーリング後 $\tilde{A}$ の固有値、
幾何学的表現(二次元図)

$\tilde{A}$ の最大固有値 $\tilde{\lambda}_{\max}$, 最大固有ベクトル $\tilde{\mathbf{V}}_{\max}$

$\tilde{A}$ の最小固有値 $\tilde{\lambda}_{\min}$, 最小固有ベクトル $\tilde{\mathbf{V}}_{\min}$



(図 6.1)



(図 6.2)

$(\mathbf{x}, \mathbf{A} \mathbf{x}) = 1$: n 次元空間における元の楕円体

$(\mathbf{x}, \tilde{A} \mathbf{x}) = 1$: n 次元空間におけるスケーリング後の楕円体

$(\mathbf{x}, \mathbf{x}) = 1 / \lambda_{\max}$: 楕円体に内接する球体

$(\mathbf{x}, \mathbf{x}) = 1 / \tilde{\lambda}_{\max}$: 楕円体に内接する

$(\mathbf{x}, \mathbf{x}) = 1/\lambda \min$: 楕円体に外接する球体	$(\mathbf{x}, \mathbf{x}) = 1/\tilde{\lambda} \min$: 楕円体に外接する球体
最大固有ベクトル軸及び最小固有ベクトルの軸	新しい角度(対角行列はスケーリング後の固有ベクトル軸)
はそれぞれX1軸、X2軸から角度 θ_1 をなす。	は、元の問題Aの固有ベクトル軸から回転し、 θ_2
最大固有値と最小固有値の比(条件数)が大きくなるに従って、隣接する角度 θ_1 は小さくなり、各固有ベクトルの軸はX1軸に近くなる。この時、 $\theta_1 = \pi/4 \times \lambda \min/\lambda \max$ で表現される。	は 45° に隣接する角度に位置する。この時、 $\theta_2 = \pi/4 \times \tilde{\lambda} \min/\tilde{\lambda} \max$ で表現される。

7. 三項対角近似因子分解パラメータ

幾つか考えられている前処理法の一つに、三項対角近似因子分解法 (Tridiagonal Approximate Factorization Method) がある。これは行列 $\mathbf{A}$ の対角行列と複数の副対角行列に分けて、計算の効率化を計るものである。この三項対角近似因子分解にある種のパラメータを導入し、基礎反復として双対共役勾配法を適用する。

TF加速パラメータ : このTF法はパラメータ ω を導入する事で、TF加速法を用いる事が出来る。前処理行列として、 $\mathbf{M}_{TF}$ を定義する。

行列 $\mathbf{A}$ の対角行列 $\mathbf{D}$ 、X方向の微分に関する副対角要素から構成される行列を $\mathbf{A}_X$ 、同じくY方向の行列を $\mathbf{A}_Y$ とする。前処理行列を次式により定義する。

$$\mathbf{M}_{TFO} = (\mathbf{D} + \omega_1 \mathbf{A}_X) \mathbf{D}^{-1} (\mathbf{D} + \omega_2 \mathbf{A}_Y) \quad (7.1)$$

とおく事により、収束の加速を少しでも高める事が出来る。この考え方はガウスザイデル法の改良を目指して発展したSOR法の加速パラメータの考え方と同じである。チェビシェフ準反復法の考えを導入して、マトリックスのパラメータを変えた定義を行う。

$\mathbf{A}_X$ 、 $\mathbf{A}_Y$ にはそれぞれ異なる加速パラメータを定義する。

(7.1) 式は反復の段階でX, Yの因子毎にLU分解を行うと、

$$(\mathbf{D} + \omega_1 \mathbf{A}_X) = \mathbf{L}_X \mathbf{U}_X, \quad (\mathbf{D} + \omega_2 \mathbf{A}_Y) = \mathbf{L}_Y \mathbf{U}_Y$$

とする事が出来る。(7.1) 式は

$$\mathbf{M}_{TFO} = \mathbf{L}_X \mathbf{U}_X \mathbf{D}^{-1} \mathbf{L}_Y \mathbf{U}_Y \quad (7.2)$$

とする事が出来、このLU分解は、ある変換により(7.2)式の $\mathbf{L}_X \mathbf{U}_X$, $\mathbf{L}_Y \mathbf{U}_Y$ の対角を1にする事が出来る。

行列 $\mathbf{A}$ は疎な規則性非対称5点差分形式とする。ここで(4.1)式に対して行列の異方性とX方向因子、Y方向因子における加速パラメータの効率化の考案として $\mathbf{A}$ の性質を見極める。そこで定性的分類として、 $\mathbf{A}$ の非対称性が大きい場合、 $\mathbf{A}$ の非対称性が小さい場合についての検討を実施する。

BCG法概略 (TF加速パラメータの基礎反復法として用いる)

$$\tilde{\mathbf{A}} = \begin{bmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{A}^T \end{bmatrix}, \quad \tilde{\mathbf{x}} = \begin{bmatrix} \mathbf{x} \\ \mathbf{x}^* \end{bmatrix}, \quad \tilde{\mathbf{b}} = \begin{bmatrix} \mathbf{b} \\ \mathbf{b}^* \end{bmatrix} \quad \text{として}$$

双対な方程式

$\tilde{\mathbf{A}} \tilde{\mathbf{x}} = \tilde{\mathbf{b}}$ を定義し、次の停留値を共役勾配法により求める。

$$F(\tilde{\mathbf{x}}) = \langle (\tilde{\mathbf{x}} - \hat{\mathbf{x}}), \tilde{\mathbf{A}}(\tilde{\mathbf{x}} - \hat{\mathbf{x}}) \rangle_{\tilde{\mathbf{H}}} \quad (7.3)$$

(7.3)式で、 $\hat{\mathbf{x}}$ は真の解、 $\tilde{\mathbf{H}} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{H} \\ \mathbf{H} & \mathbf{0} \end{bmatrix}$ 、 $\tilde{\mathbf{A}}$ は $\tilde{\mathbf{H}}$ に関して自己随伴である。

$$\langle \tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{y}} \rangle_{\tilde{\mathbf{H}}} \equiv (\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{H}} \tilde{\mathbf{y}}) \equiv (\tilde{\mathbf{H}} \tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{y}}) \quad \text{の形で表現出来る。}$$

8. 計算物理への適用事例

1) 概要

主プラズマ(完全電離プラズマ)と周辺プラズマ(中性子を含む比較的低い温度のプラズマ)の異なったプラズマの結合系における相互作用、及びその基礎的物理機構を解明する為、磁気流体力学、二流体混合型シミュレーションコードに対して適用する。オリジナル版のコードはADI法による。

2) 方程式 <主プラズマに対する磁気流体方程式系>

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) &= 0 \\ \rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} &= \mathbf{j} \times \mathbf{B} - \nabla p \\ \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} &= -\nabla \times \mathbf{E} \\ \mathbf{j} &= 1/4\pi\mu_0 \cdot \nabla \times \mathbf{B} \\ \mathbf{E} &= \mathbf{v} \times \mathbf{B} + \eta \mathbf{j} \\ \frac{\partial p}{\partial t} + \nabla \cdot (p \mathbf{v}) &= (\gamma - 1)(-p \nabla \cdot \mathbf{v} + \eta \mathbf{j}^2) \end{aligned}$$

$\mathbf{v}$: 速度、 $\mathbf{j}$: 電流、 $\mathbf{B}$: 磁場、 $\mathbf{E}$: 電場、 ρ : 質量密度、
 p : 圧力、 η : 電気抵抗、 γ : 断熱定数

<周辺プラズマに対する二流体方程式系>

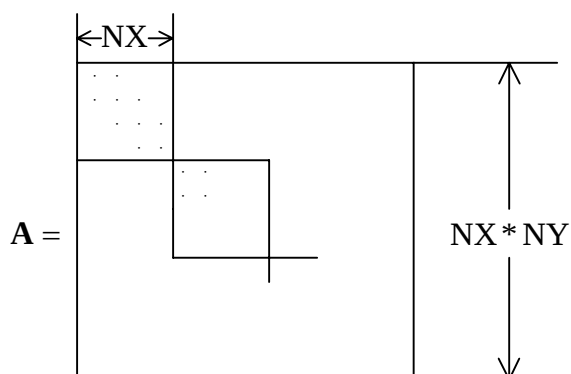
$$\begin{aligned} \frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot (n \mathbf{v}_j) &= S_j - \alpha (n^2 - n_0^2) \\ m_j n \cdot d\mathbf{v}_j/dt &= q_j n (\mathbf{E} + \mathbf{v}_j \times \mathbf{B}) - \nabla p_j + R_j \end{aligned}$$

$j = i \text{ (ion) or } e \text{ (electron)}$

$\mathbf{v}_j$: j 種による粒子の速度、 R_j : j 種による衝突による摩擦力、
 S_j : j 種による電流が流れ込んだり電離する事などによる密度増加の源泉項、
 m_j : j 種による質量、 q_j : j 種による電荷、 p_j : j 種による圧力、
 n : 密度、 n_0 : 背景プラズマの数密度、 α : 再結合率、 $\mathbf{v}_n$: 中性粒子の速度、
 μ_{Hj} : ホール移動度、 μ_{pj} : ベターゼン結合度、 $\mu_{\parallel}$: 磁場と平行な方向の移動度

これら2つの異なった方程式系で表されるそれぞれのシミュレーション領域が、磁力線によって結ばれ、物理場の情報を交換するものが、この数値上の基本モデルである。

3) 計算格子のモデル

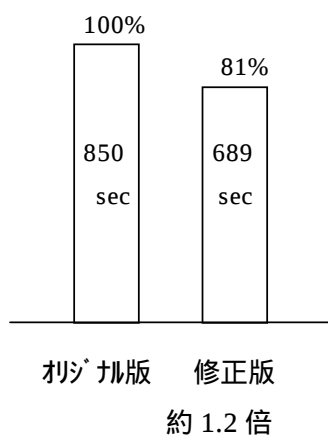


4) シミュレーションコードのチューニングとソルバ置換による実行時間の比較

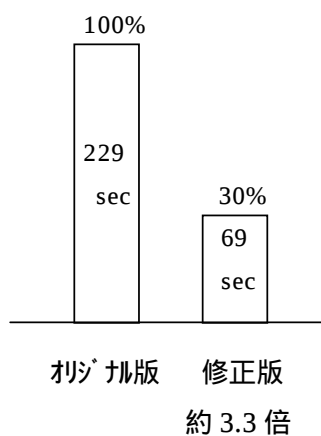
(NEC スーパーコンピュータ SX5 使用)(ベクトル化率オリジナル版 95.2%、改良版 95.8%)

(5 点差分 オリジナル版 ADI 法 → 改良版 TFBCG パラメータ法)

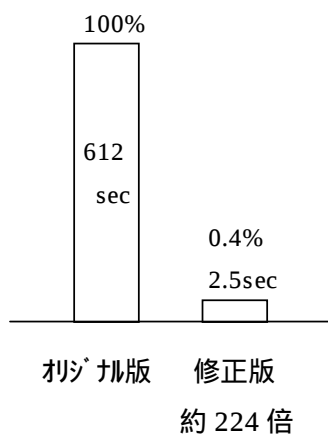
ソース修正による実行時間



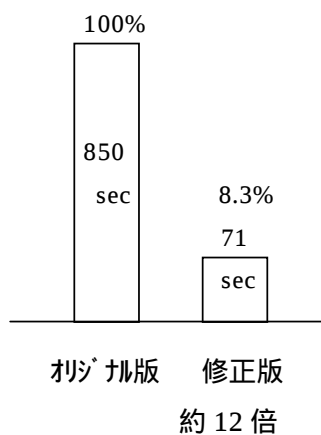
修正サブルーチンの実行時間



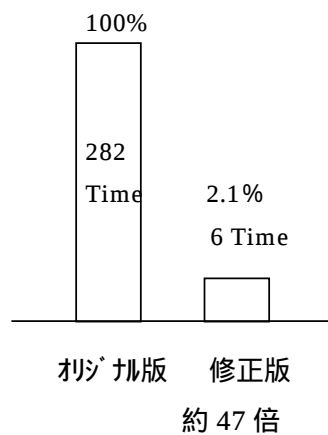
ソルバのみの実行時間(5 点差分)



プログラム全体の実行時間



該当ルーチン 1 回あたりの繰り返し数



9. まとめ

この論文では数値解法発展の歴史と、その時代の数理科学思想の流れを示し、そして近年研究されてきた前処理法による効率化に関して説明し、計算物理への適用事例を報告した。特に前処理法による効率化では、三項対角近似因子分解に2つのパラメータを導入する事により、SOR法にみる加速の効用も加味して研究を行った。この因子分解の後、基礎反復法として非対称に強い双対共役勾配法を用いている。

対象とした問題が計算物理の電磁流体2流体問題で、オリジナル版が電磁流体で良く使われてきたADI法である為、比較的安定して解く事が出来た。CG法系は条件数がある程度の範囲に入り、特にパラメータの高速化については、モデルの適用が制限される場合もあるが、今回は適合したケースであった。

数多くの数値解法の中で、最適な解法を求めて行く為には、行列のモデルとその性質を条件数、対称非対称性、規則不規則性、疎密関係、行列の分離、分解、スケーリング、収束性、正確性、安定性、その他幾つかの観点から見つめ直す事が重要である。

参考文献

- [1] 有馬朗人, スーパーコンピュータ, 日本物理学会編, 培風館, 1985.
- [2] Axelsson, O., Solution of Linear Systems of Equations, Lecture Notes in Mathematics 572, Springer-Verlag, 1977.
- [3] Doi, S. and Harada, N., Tridiagonal Approximate Factorization Method : A Preconditioning Technique for Solving Nonsymmetric Linear Systems Suitable to Supercomputers, National Aero Space Laboratory, Special Paper 7, 1987.

- [4] E.Wachspress, Iterative Solution of Elliptic Systems ,Prentice-Hall,Englewood, Cliffs, N. J. 1966.
- [5] 藤野清次, 竹内敏己, 差分システムの再考によるベクトル計算機向き不完全 LU 分解について, 日本応用数理学会論文誌, VOL.4, No.2, 1994.
- [6] Gentzch, W., A fully vectorizable SOR variant, Parallel Computing, 4, 1987.
- [7] Gustafsson, I., A Class of First Order Factorization Method, BIT, No.18, 1978.
- [8] 村田健郎, 小国力, 三好俊郎, 小柳義夫, 工学における数値シミュレーション, 丸善, 1988.
- [9] 名取亮, 野寺隆, 大規模行列における反復解法, 情報処理, Vol.28, No.11, 1987.
- [10] 曾谷勝義, 最適な固有値解法の評価, 日本統計学会, 1987.
- [11] 曾谷勝義, 計算物理における反復解法の評価, 日本応用数理学会予稿集, 1994.
- [12] 後保範, ベクトル計算機向き ICCG 法, 京都大学数理解析研究所講究録, No.514, 1984.