

PCR/PBCG法におけるGustafsson流の改良について

図書館情報大学 村田健郎

[内容梗概]

(Kenro Murata)

移流拡散方程式の差分解法における、

ILUCR (不完全LU使用のCR法)

ILUBCG (不完全LU使用のBCG法)

に対するGustafssonの変更についての試行例について報告する。

BCG系に対しては比較的安定に動作するがCR系については問題がある：

$0.5 \leq Pec \leq 2$ といった重要な領域で特に問題である。

この領域で使えそうなプログラムについての試案だけは提示した。

ごく僅かの部分的風上差分と、制限されたGustafssonの変更をかける公式：

$$W = (1 + \epsilon h + \theta' \cdot Pec \cdot h) di - (ILUの項) \\ + 0.98 \cdot SUPRESS \cdot (Gustafssonの項), \\ SUPRESS = \text{Max}(0, 1 - Pec / (4 + 5\omega))$$

を提案する。ここに、 Pec はセルベクレ数 $v \cdot h / k$ のこと、 ω は風上差分パラメータで $\omega = 1$ のとき純風上差分、 $\omega = 0$ のとき中心差分である。

1 はじめに：

移流項のない、純拡散の方程式、例えば、広義のポアソン方程式：

$$\text{div}(-k \nabla u) = f$$

あるいは

.... (1)

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \text{div}(-k \nabla u) = f$$

に対しては、ICCG法(不完全コレスキによる前処理をほどこしたCG法)、特にそれに、Gustafssonの変更を加えたMICCG法が大変に強力で、ちょっと他の方法には目移りする気が起こらない、というのが実感である。

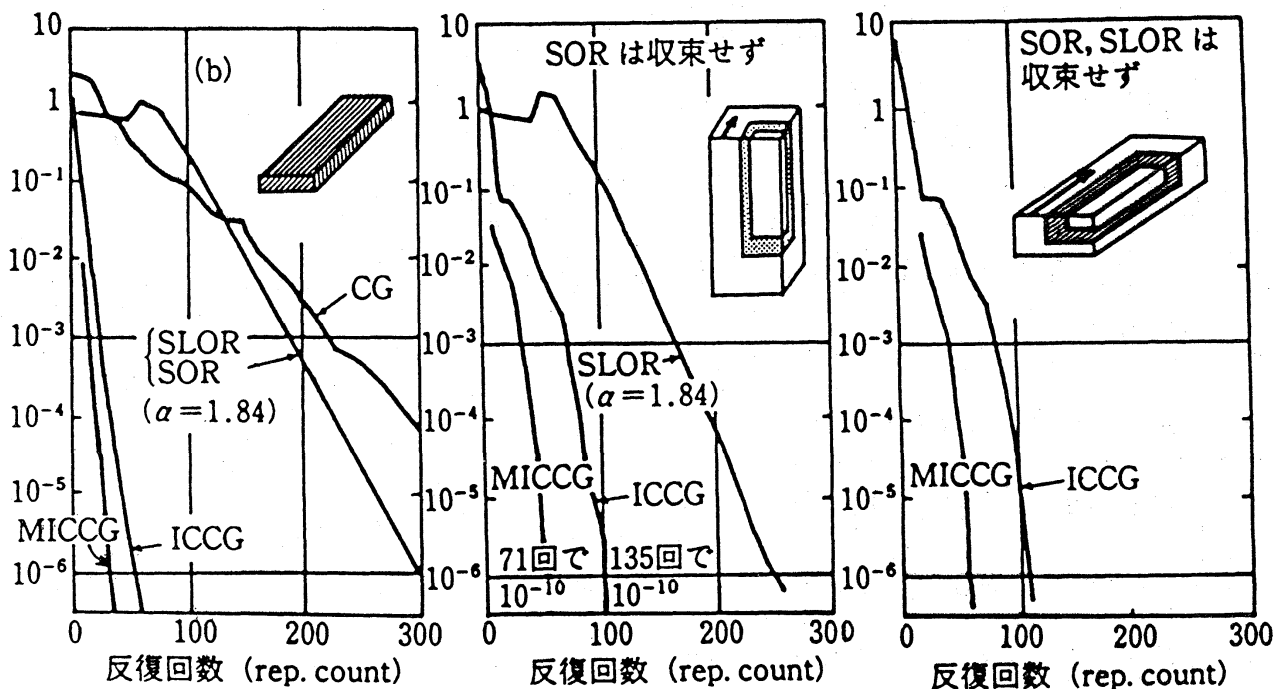
<図1(次頁)を見よ>

図1. $\text{div}(-k(x)\nabla u) = f(x)$, あみ目は $40 \times 40 \times 40$ に対する実測例. 白ぬき部 $k=0.01$, 斜線部 $k=1.0$ のもの.

反復100回当り M280Hにて110秒

S810/20にて1.5秒 (‘後のプログラム’による)

たて軸目盛は相対残差 $\|Ax^{(n)} - b\| / \|b\|$.



そこで当然、本命の移流拡散問題

$$\text{div}(-k\nabla u + bu) = f,$$

あるいは

.... (2)

$$\partial u / \partial t + \text{div}(-k\nabla u + bu) = f$$

に対しても類似の方法が使えないかという気になる。即ちCG法の代わりにBCG法、あるいはCR法をベースにしたもので非対称行列をうまく処理できないかというわけである。(プログラムBCG, CG, CG(1)は次頁)

BCG

x_0 を用意 ; $r_0 = r_0^* = b - Ax_0$; $p_0 = p_0^* = r_0$; $i = 0$

while $\|x_i\| > \text{eps} * \|b\|$ do

$$\alpha = (r_i, r_i^*) / (Ap_i, p_i)$$

$$x_{i+1} = x_i + \alpha p_i ; r_{i+1} = r_i - \alpha Ap_i ; \quad (1)$$

$$r_{i+1}^* = r_i^* - \alpha A^T p_i^*$$

$$\beta = (r_{i+1}, r_{i+1}^*) / (r_i, r_i^*)$$

$$p_{i+1} = r_{i+1} + \beta p_i ; p_{i+1}^* = r_{i+1}^* + \beta p_i^* ; i = i + 1$$

CR (これは原理を示すだけ. 実際には下記 CR(1))

x_0 を用意 ; $r_0 = b - Ax_0$; $p_0 = r_0$; $i = 0$

while $\|r_i\| > \text{esp} * \|b\|$ do

$$\alpha = (r_i, Ap_i) / (Ap_i, Ap_i) \quad (2)$$

$$x_{i+1} = x_i + \alpha p_i ; r_{i+1} = r_i - \alpha Ap_i$$

$$\beta = -(Ar_{i+1}, Ap_i) / (Ap_i, Ap_i)$$

$$p_{i+1} = r_{i+1} + \beta p_i ; i = i + 1$$

CR(1)

x_0 を用意 ; $r = b - Ax_0$; $p = r$; $q = Ar$; $i = 0$

while $\|r\| > \text{eps} * \|b\|$ do

$$\mu = (q, q) ; \alpha = (r, q) / \mu \quad (3)$$

$$x_{i+1} = x_i + \alpha p ; r = r - \alpha q$$

$$a = Ar ; \beta = -(a, q) / \mu$$

$$p = r + \beta p ; q = a + \beta q ; i = i + 1$$

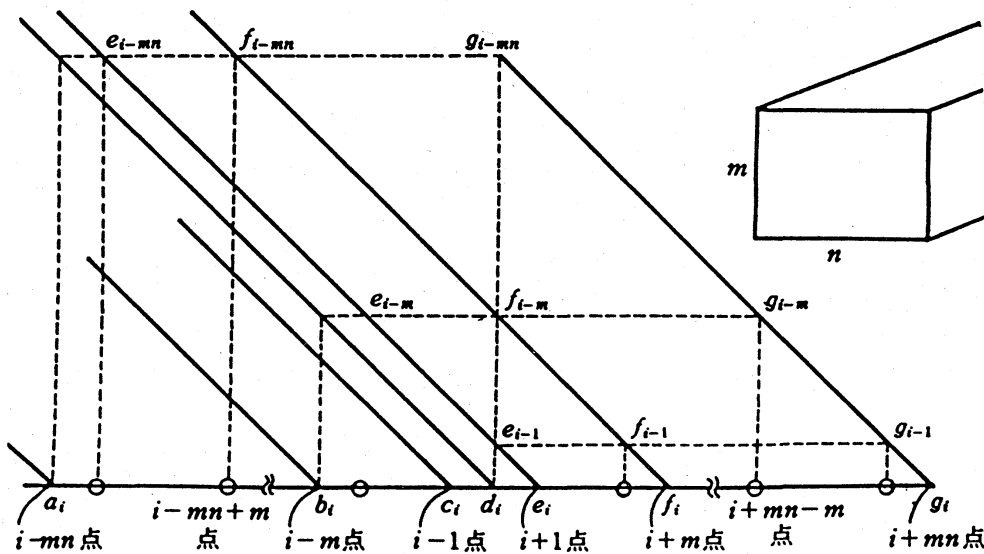
● Meijerink/Gustafsson流の不完全ガウス

Meijerink流の不完全ガウス $A = LDU - R$ を三次元の7点差分式に適用しよう。その最も簡単なものは、(文献(1), (2))

$$\begin{cases} w = a_i - a_i g_{i-mn} \tilde{d}_{i-mn} - b_i f_{i-m} \tilde{d}_{i-m} - c_i e_{i-1} \tilde{d}_{i-1} \\ \tilde{d}_i = w^{-1} \end{cases} \quad (6)$$

これにGustafsson流の変更をほどこしたものでは w を次のように変える:

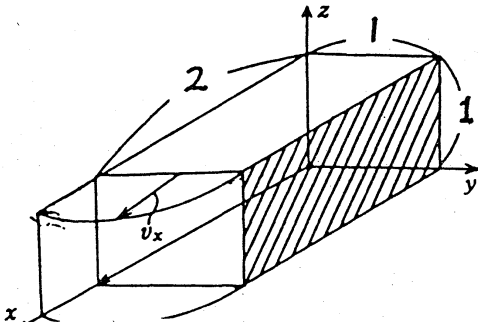
$$\begin{aligned} w = (1 + \varepsilon) a_i - a_i g_{i-mn} \tilde{d}_{i-mn} - b_i f_{i-m} \tilde{d}_{i-m} - c_i e_{i-1} \tilde{d}_{i-1} \\ \left. \begin{aligned} & - a_i e_{i-mn} \tilde{d}_{i-mn} - a_i f_{i-mn} \tilde{d}_{i-mn} \\ & - b_i e_{i-m} \tilde{d}_{i-m} - b_i g_{i-m} \tilde{d}_{i-m} \\ & - c_i f_{i-1} \tilde{d}_{i-1} - c_i g_{i-1} \tilde{d}_{i-1} \end{aligned} \right\} \quad (7) \end{aligned}$$



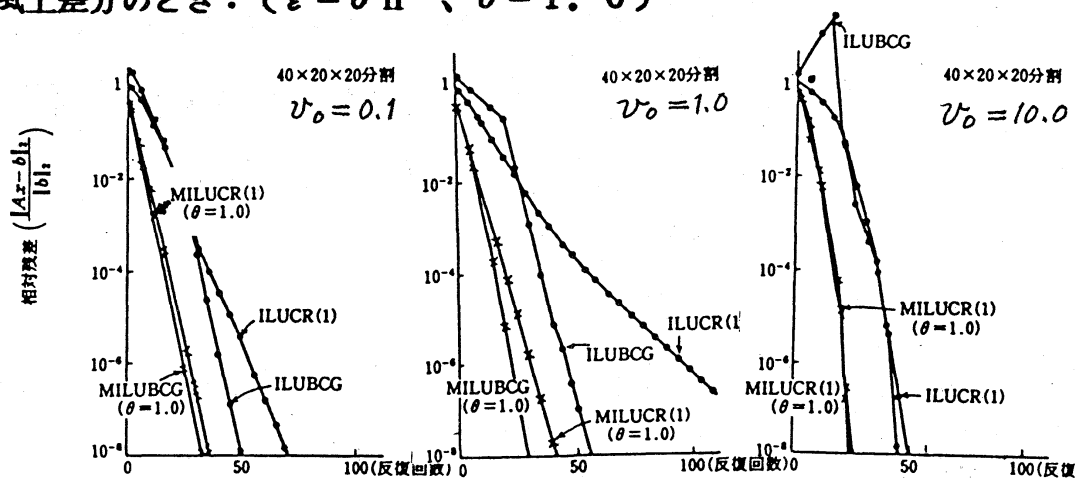
以上二種の不完全LDUによるところの方程式

$$(\text{LDU})^{-1} \mathbf{A} \mathbf{x} = (\text{LDU})^{-1} \mathbf{b} \quad \dots (8)$$

に対してBCG法とCR法を試みた。問題はx方向にだけ流れがあり速度分布が $v = v_0 (1 - y^5)$ 、すなわちそのvの変化がyに依存するだけという流れ場における(40×20×20)の三次元熱拡散問題である：

$$\begin{cases} -\nabla^2 u + v_x \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \\ u|_{x=0} = 1, \quad u|_{y=1} = 0, \\ \text{他の4面では } \nabla u \cdot \mathbf{n} = 0 \end{cases}$$


純風上差分のとき：($\varepsilon = \theta h^2$ 、 $\theta = 1.0$)



M280Hにて反復100回当り BCG系 45.4秒, CR系 26.6秒。

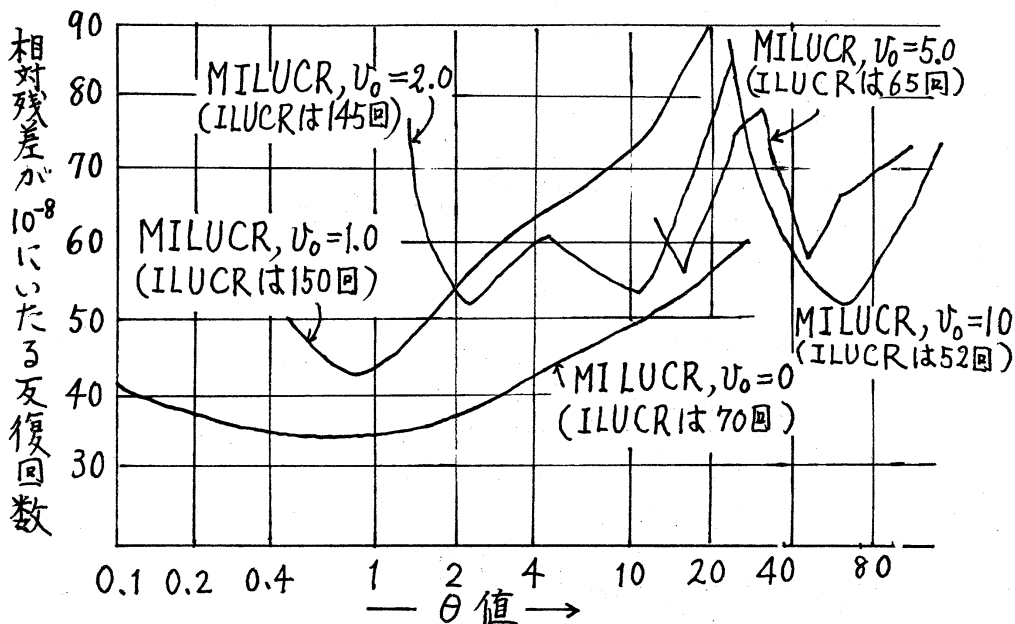
純風上差分のときは問題はない。そしてこのときには、MILUCR(1)の方がMILUBCGよりも速い。

ところが中心差分の場合は、話が大変こみ入って来る。特にCR系の方が問題が多かった。M行列になるならないの問題も、不完全ガウスがうまく行なわれる行なわれないの問題も、CR系、BCG系以前の話であって、両者共通である。にもかかわらず、CR系の方が、Cell Pe (セルペクレ数) が、1.0以下のときすでに問題なのである：(文献(2)より)

(文献(2)より) $\varepsilon = \theta h^2$ としたときの

$\nu_0 = 0, 1.0, 2.0, 5.0, 10.0$

の各々の場合についての収束状況の, θ 依存性.



このように ν に依存して θ 依存性が変動したのでは実用にならない。

$\varepsilon = \theta h^2$ の代わりに

$$\varepsilon = \theta' \nu_0 h^2 / k \quad (k \text{ は拡散係数})$$

とすれば、最適を与える θ' 値を狭い範囲に収めることができるが、それぐらいの手当てでは済まない。 $\nu_0 = 4$ (セルベクレ数 0.5) 以上では、とても使えそうにない。実用上、セルベクレ数 4 程度までは、安定に動作する汎用的なプログラムが欲しい。汎用性のためにはパラメータ依存性が十分鈍くなければならないし、望むべくはパラメータは自動的に設定されて欲しい。

以下、部分的風上差分の導入を含む、安定化プログラム作成のための試案と、試行例について報告する。

2 M行列になる、ならないの問題について

M行列であることは、不完全ガウスが可能のための十分条件であって、必要

というわけでわないが、やはり安定な不完全ガウスを差分法による離散化方程式に施すための目安になる。文献(1)，(2)からその要点を抜粋する：

[例1] 長方形の場合 Ω における線形定常問題：

$$\operatorname{div}(-\nabla u + b(x)u) = f(x)$$

$$u|_{\Gamma_1} = 0, \quad \nabla u \cdot n|_{\Gamma_2} = 0, \quad \nabla u \cdot n|_{\Gamma_2'} = 0$$

を基礎式：

$$\int_{\Gamma} (-\nabla u + b(s)u) \cdot n ds = \int_{\Omega} f(x) dx \quad (1)$$

による差分法によって離散化せよ。ただし、

$$b = (b, 0).$$

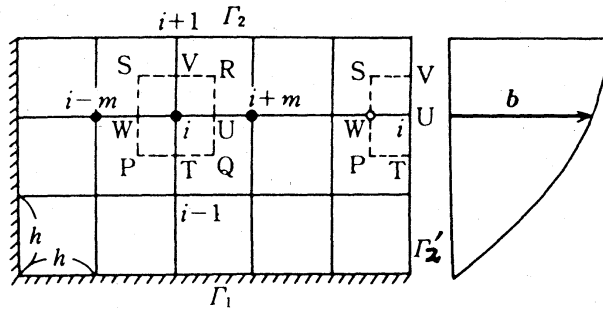


図2

[解] いわゆる中心差分による場合(図2参照)

内点 i に関する方程式は

$$\begin{aligned} & \left(-1 - b_w \frac{h}{2}\right) u_{i-m} - u_{i-1} + \left(4 + (b_u - b_w) \frac{h}{2}\right) u_i \\ & - u_{i+1} + \left(-1 + b_u \frac{h}{2}\right) u_{i+m} = f_i h^2 \end{aligned} \quad (2)$$

境界 Γ_2, Γ_3 上の点 i に関してはそれぞれ、

$$\begin{aligned} & \left(-\frac{1}{2} - b_w \frac{h}{4}\right) u_{i-m} - u_{i-1} + \left(2 + (b_u - b_w) \frac{h}{4}\right) u_i \\ & + \left(-\frac{1}{2} + b_u \frac{h}{4}\right) u_{i+m} = f_i h^2 / 2 \end{aligned} \quad (3)$$

$$\begin{aligned} & \left(-1 - b_w \frac{h}{2}\right) u_{i-m} - \frac{1}{2} u_{i-1} + \left(2 + \left(b_u - \frac{b_w}{2}\right) h\right) u_i \\ & - \frac{1}{2} u_{i+1} = f_i h^2 / 2 \end{aligned} \quad (4)$$

となる。 $\Gamma_2 \cap \Gamma_2'$ の頂点はまた特別になる。

ともかく $u = (u_1, \dots, u_n)^T$ に関する、非対称
行列 A を係数とする連立一次方程式： $Au = f$

を得る。このとき行列 A が M 行列：

$$a_{ii} > 0, a_{ij} \leq 0, A^{-1} \geq 0 \quad (5)$$

となるためには、

$$|bh/2| < 1, \quad (6)$$

すなわち ‘セル・ペクレ数を2以下にせよ’ が必要である。

上の例で、 $b_u = b_w$ ，かつ Γ_2' 境界条件がないなら、その必要十分条件は簡単で (6) だけでよいが、一般の場合には厄介である。

強制的に M 行列にするために、しばしば風上差分法が適用される。例えば (2) に対し、もし b_u が正ならば、 ω を導入して、

$$\begin{aligned} & \left(-1 - b_w \frac{h}{2}\right) u_{i-m} - u_{i-1} \\ & + \left(4 + (b_u - b_w) \frac{h}{2} + \omega b_u \frac{h}{2}\right) u_i - u_{i+1} \\ & + \left(-1 + (1 - \omega) b_u \frac{h}{2}\right) u_{i+m} = f_i h^2 \end{aligned} \quad (7)$$

とする。 $\omega=1$ のときが純風上差分、 $\omega=0$ のときが中心差分である。風上差分は計算を安定化する代りに精度を落す。

(以上文献(1))

一般に $\text{div } b = 0$ のとき、内点の方程式 (2) の u の係数が4だけとなって話が簡単になることがわかるが、もうすこし M 行列になるための十分条件を検討してみると、まず $\text{div } v = 0$ 、固定境界条件 Γ_1 だけのときは話が簡単で、 Γ_2 、 Γ_2' 境界条件が加わる毎に、順に話が面倒になることがうかがわれる：

係数行列が M 行列であるための十分条件の検定に関し、

【定理】 (Vargaの本)

$$a_{ii} > 0, a_{ij} \leq 0, B := I - D^{-1}A, \\ \text{但し } D \text{ は } \text{diag}(a_{11}, \dots, a_{nn}) \text{ とするとき、} \\ A^{-1} \geq 0 \Leftrightarrow \rho(B) < 1, \quad (8)$$

もし B が既約、 $B \geq 0$ かつ

$$\min_i \sum_j b_{ij} < \max_i \sum_j b_{ij}$$

のときは、

$$\min_i \sum_j b_{ij} < \rho(B) < \max_i \sum_j b_{ij} \quad (9)$$

この定理によって上の例の場合、十分条件: (内点に関しては)

$$0 \leq (b_U - b_W) \quad (10)$$

を得て、もし $\text{div } b = 0$ 、固定境界のみならば(6)だけでよいことになるのである。(文献(2))

3 計算の安定化法

予備検討の結果、 a_{ii} の頭に付ける $(1 + \varepsilon)$ の ε については、MILUCR(1)に対し、

$$\varepsilon = \theta' \cdot v_0 \cdot h^2 / k \quad (1)$$

即ちセルベクレ数 $Pec := v_0 \cdot h / k$ を使うとき

$$\varepsilon = \theta' \cdot Pec \cdot h \quad (1')$$

の形にすると、 $0 < Pec < 5$ の範囲で、 θ' の最適値が $0.05 < \theta' < 0.1$ の範囲に収まることを知った。但し、 $\omega = 0$ 、即ち純中心差分の場合の θ' 依存性は $0.5 < Pec$ のとき急峻で使用に耐えないことも経験されたので、部分的風上差分のデータもとった。

それによると、 $\omega = 0.4$ のときようやく(1')の設定で $0.5 \leq Pec \leq 5$ でのデータが円滑にとれた。

ところで、 $\omega = 0.2$ では、 $1.0 < Pec \leq 5$ のときMILUCRの方が単純ILUCRに劣った。結局、「 $\omega = 0.2 \sim 0.0$ となると a_{ii} の頭の

($1+\varepsilon$)の ε をどうえらんでも $1.0 \leq Pec \leq 5$ の領域ではこのままではMILUCRは使えない。」ことがわかった。

そこで、(既にMICCGに適用のとき効果が実証済みの) ‘後の方法’ をここでも応用することを試みた。即ち、Gustafssonの補正項を全面的にかけるのではなく、部分的にかけるのである。但し、そのかける程度を Pec に依存させねばならない：結局、(7)式を、内容梗概に示したような形を取らせることにしたわけである。

この方法によって、ようやく $\omega=0$ の場合にも、 $Pec \leq 5$ の全域でMILUCR(1)が使えるようになった。 θ' 値は0.025~0.1がよい。但し $\omega=0$ のときは θ' の選択範囲がややせまくなる。

BCG系は、 $Pec < 0.025$, $Pec > 0.5$ の領域でCR系の成績のよいものに負けるが、安定なのがよい。

取得したデータの一部を次頁に示す。尚、プログラミングとデータ取得については、日立製作所ソフトウェア工場、後保範氏をゆづらわした。深謝したい。

【文献】

(1) 村田「科学技術計算と高速算法」Computer Today
(サイエンス社) No. 2 1984/7

(2) 村田「移流拡散方程式の数値解法」

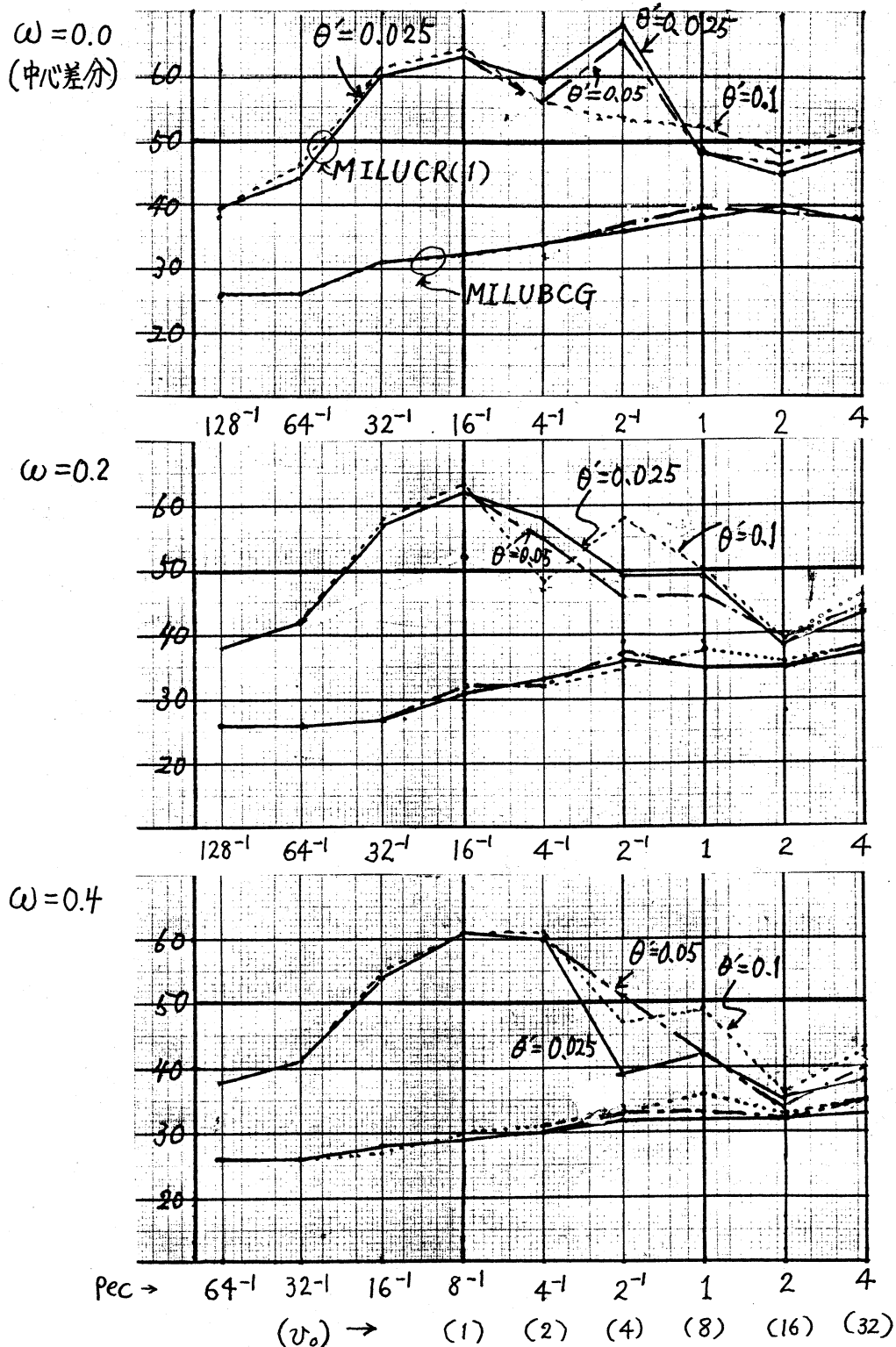
スーパーコンピュータ～現状と将来～ 講習会テキスト
1984/7

(3) Varga「Matrix Iterative Analysis」
1962

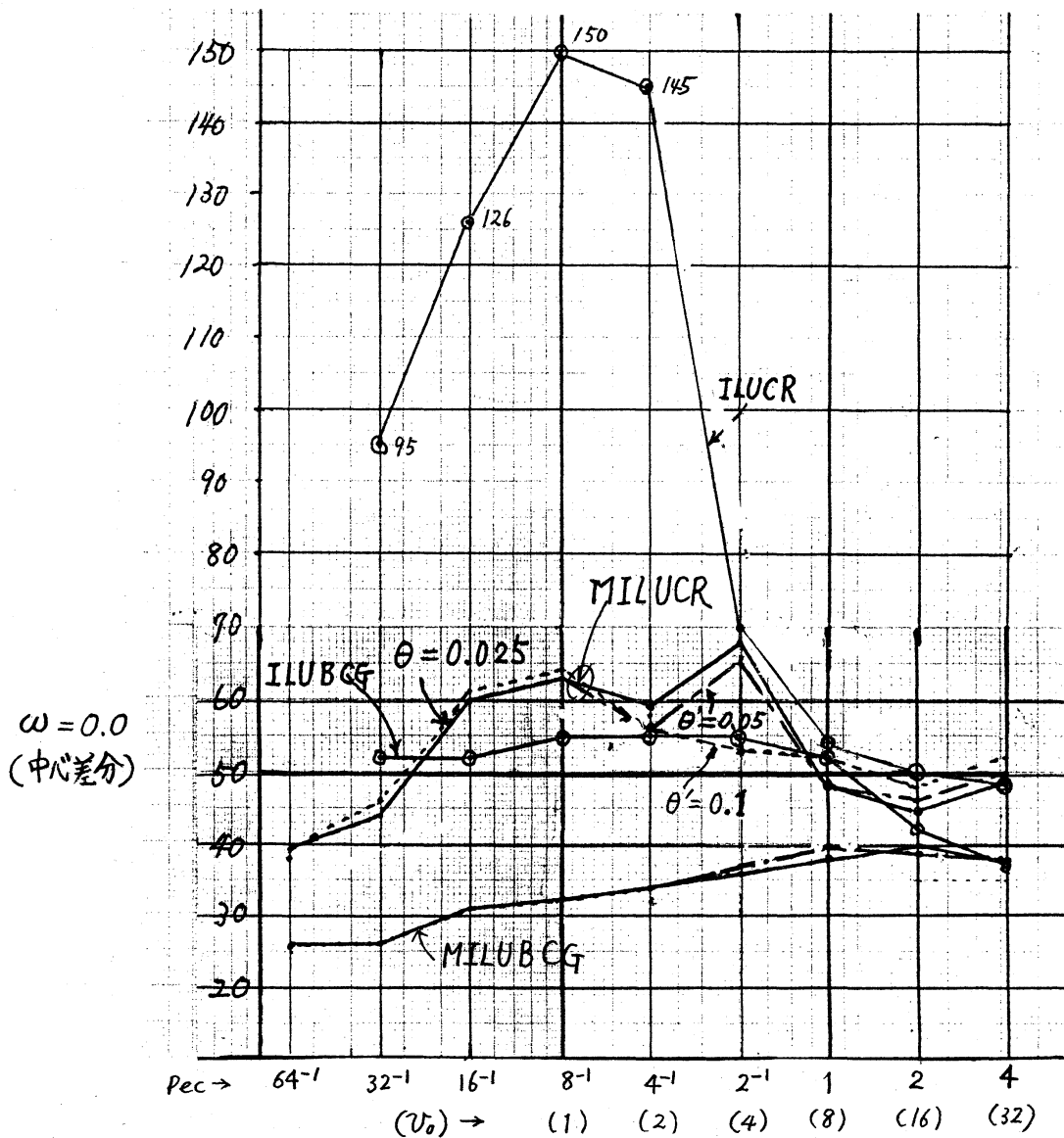
(4) 後保範「ベクトル計算機向きICCG法」数理解析研講究録514
p. 110-134 1984/3

$SUPRESS = \text{Max}(0, 1 - Pec / (3 + 5\omega))$ の場合の取得データ。
 (たて軸は相対残差が 10^{-8} にいたる反復回数, よこ軸はセルペル数 Pec, 最上段が $\omega = 0$ (中心差分), 中段が $\omega = 0.2$, 下段が $\omega = 0.4$.)

$\theta' = 0.025$: 実線, $\theta' = 0.05$: 一点鎖線, $\theta' = 0.1$: 点線

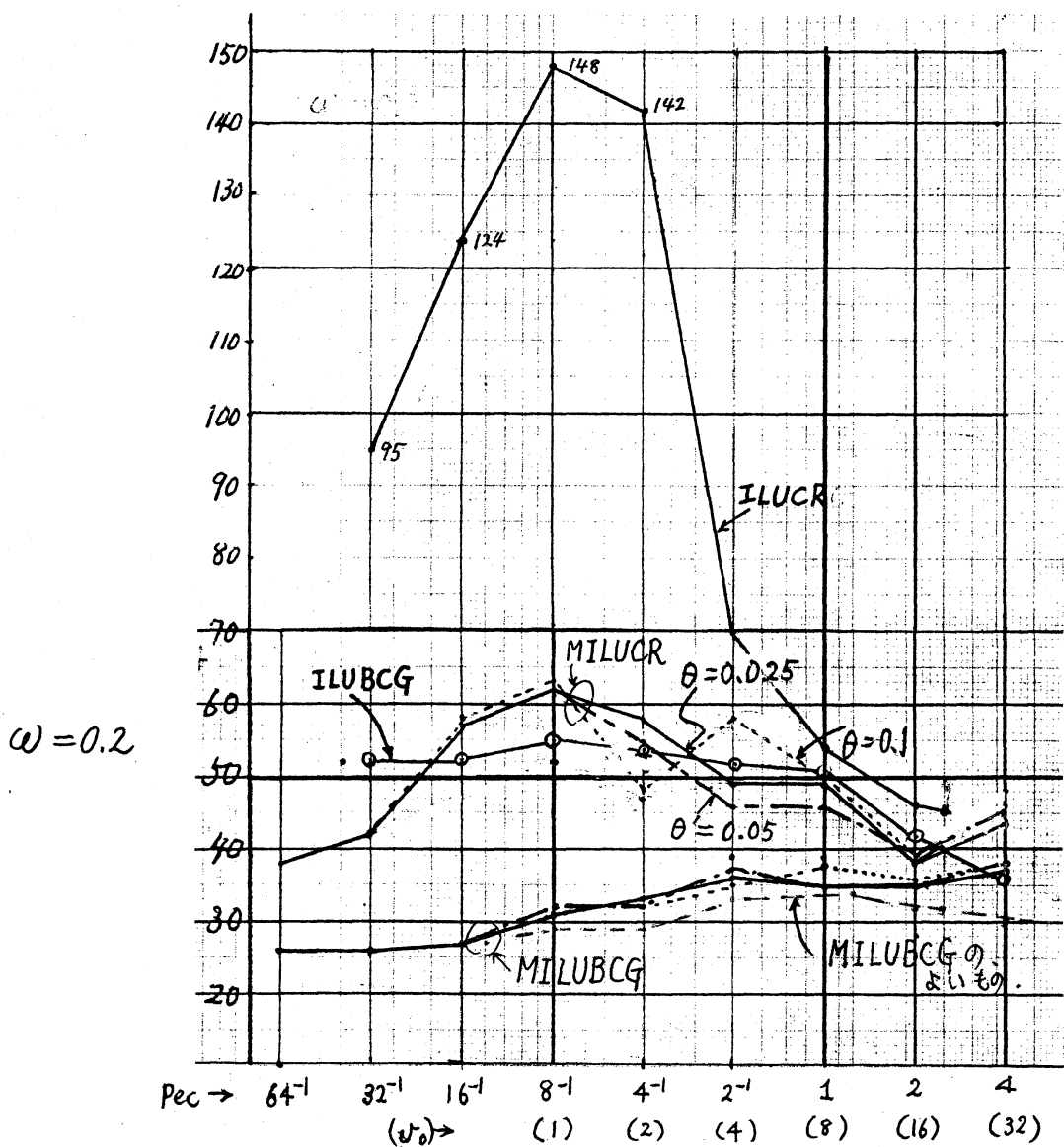


前頁のデータは、MILUCRに注目したものである。MILBCGに注目したデータをえらべば、もっとMILBCGに有利な印象を与える。以下、前頁のデータに、MILUBCGに有利なデータ例と、ILUCR, ILUBCGのデータ例を重ねたもの示そう。MILUBCGに有利と言っても、特にそのためにパラメ
(次頁へ)



ータをえらんだわけではなく、MILUCRの方が収束に甚だしく手間どったものの中で、MILUBCGがよい成績を示したものをえらんだにすぎない。

MILUBCGの方はこのデータ取得中、いつでも安定な動作を示したことを附言しておきたい。



なお、MILUCR(2) (文献1,2 参照)についても若干調べたが全体的な印象はMILUCR(1)とくらべて大差なく、 P_{ec} が十分に ($P_{ec} < 0.1$ ぐらいに) 小さいとき、MILUCR(1)とくらべてわずかに (10%~5%) 速く、逆に P_{ec} が1に近くなるとかえって遅いという期待外れの結果であった。即ち、安定性が増すことを期待したのであるが、そうも行かぬようである。

