

不完全AD(HV)分解

京大工 野木達夫 (Tatsuo Nogi)

序 楕円型差分 (有限要素) スキームの反復解法として、前処理 (preconditioning) を行った上、CG (共役勾配) 加速を実行する方法が広く利用されている。^[1] その骨子は、差分スキームから生じる連立方程式の問題

$$Au = f$$

に対して、反復アルゴリズムを

$$\begin{cases} C \frac{u^{n+1} - u^n}{\tau_{n+1}} + Au^n = f & (n=0, 1, 2, \dots), \\ u^0 = \text{given} \end{cases}$$

とおくものである。(なお、 n について 3 段のスキームとして表すべきものもあるが、ここでは 2 段のもので、すべてを代表させている。) C が前処理行列であって、その性質として、 $C^{-1}A$ の条件数ができるだけ小さくなることと、方程

式 $CU = g$ が簡単に解けることが要求される。加速パラメータ τ_{n+1} は CG 加速原理から決められる。

通常, C として, A の不完全 LU 分解で "fill-in" (分解過程でもとの行列 A の零要素のところが非零に変わること) の少ないものが求められる。ところが, この分解も, それに基づいた求解の手順も, 一般的には大規模なシリアル計算であり, 並列処理しにくいものである。処理の高速化を狙, た並列性を獲得するためには, 何んらかのブロック化をばからねばならない。例えば, 直接解法として用いられてきた Nested Dissection ordering あるいは Cuthill-McKee 法などの転用が考えられる。^[1] それでも多数のブロックに分けることは無理である。

そこで我々は "線ブロック化" とも呼べる分割作用素 (Splitting-up or Factorization operator) を用いるものを扱^[2]う。これは, 著者の開発している並列計算機 ADENA にあいて, とくに上首尾に並列処理される。

本小論では, 標題にいう "不完全" 性について 2 つのことを述べる。1 つは, 我々のいう不完全 AD (HV) 分解とは, 本質的には, 従来からの分割作用素法に替るものではないこと (§1), もう 1 つは, 有限要素法から生じる多点スキームに対しても '主要点' 向けのスキームに対応する不完全 AD

分解が有効であることである (§2)。さらに比較のための数値例や、計算量評価についても述べる。

§1. 不完全 AD(HV) 分解 例として、2次元問題に対する標準的5点スキームの係数行列

$$A = A_1 + A_2$$

を考える。 A_1, A_2 はそれぞれ座標軸方向の微分作用素に対応した行列であり、"三重対角ソルバー"で容易に解ける部分問題を与えるものである。このとき、同じく三重対角ソルバーで扱える2つの行列 H, V であって、それらの積

$$C = HV$$

が、 A の近似になる様なものを求めるものとする。実は、こうして作られる C は

$$(D + A_1)D^{-1}(D + A_2)$$

に同等であることが判明する。 D は対角行列である。 $D = \sigma I$ (σ : スカラー) と選べば、これは、従来の分割作用素法

$$(\sigma I + A_1)(\sigma I + A_2) \frac{u^{n+1} - u^n}{\tau_{n+1}} + A u^n = f$$

に他ならない。^[2]

上記のことを詳しく述べる。そのために、5点差分近似式
と

$$a_{jk} u_{jk} - b_{j-1,k} u_{j-1,k} - b_{jk} u_{j+1,k} - c_{j,k-1} u_{j,k-1} - c_{jk} u_{j,k+1} = f_{j,k}$$

と表す。j, k はそれぞれ x 方向, y 方向の座標番号である。

ここで、適合条件

$$a_{jk} - b_{j-1,k} - b_{jk} - c_{j,k-1} - c_{jk} = O(h)$$

が満たされているとする。h は、格子点間隔の最大値である。

この場合、未知数 $\{u_{jk}\}$ に row-wise ordering を行くと
対応した係数行列 A はブロック三重対角形となるが、それを
簡単のために

$$A = (0, -c_{j,k-1}, 0 \mid -b_{j-1,k}, a_{jk}, -b_{jk} \mid 0, -c_{jk}, 0)$$

と書き表す。両サイドブロックが対角形、対角ブロックが三
重対角形であり、表記では k 行目ブロック組の j 行目成分の
中央のものを示している。これはまた

$$A = A_1 + A_2 + O(n)$$

$$A_1 = (0, 0, 0 \mid -b_{j-1k}, b_{j-1k} + b_{jk}, -b_{jk} \mid 0, 0, 0)$$

$$A_2 = (0, -c_{jk-1}, 0 \mid 0, c_{jk-1} + c_{jk}, 0 \mid 0, -c_{jk}, 0)$$

と書き表わせる。\$A_1\$ は文字通りの三重対角行列であり、
\$A_2\$ は、未知数を column-wise ordering でみなおしたとき、
やはり三重対角になるものである。

次に、\$A\$ の近似的な Factorization を考える。その因子を
\$H, V\$ とし、それぞれが \$A_1, A_2\$ と同じ様な構造をもつもの
とし、

$$H = (0, 0, 0 \mid -\frac{\beta_{j-1k}}{\alpha_{jk}}, \alpha_{jk}, -\frac{\beta_{jk}}{\alpha_{j+1k}} \mid 0, 0, 0)$$

$$V = (0, -\frac{\gamma_{jk-1}}{\alpha_{jk}}, 0 \mid 0, \alpha_{jk}, 0 \mid 0, -\frac{\gamma_{jk}}{\alpha_{j+1k}}, 0)$$

とおく。ここで未知要素を分数形にしてあるのは、それらの
決定が容易にするためのである。\$HV\$ を計算すると近似的に

$$HV \sim \left(\frac{\beta_{j-1k} \gamma_{j-1k}}{\alpha_{j-1k}^2}, -\gamma_{jk}, \frac{\beta_{jk} \gamma_{j+1k}}{\alpha_{j+1k}^2} \mid -\beta_{j-1k}, \alpha_{jk}^2, -\beta_{jk} \mid \right. \\ \left. \frac{\beta_{j-1k} \gamma_{j-1k}}{\alpha_{j-1k}^2}, -\gamma_{jk}, \frac{\beta_{jk} \gamma_{j+1k}}{\alpha_{j+1k}^2} \right)$$

となる。これは、近似しようとしている元の行列 \$A\$ に対して

$\left\{\frac{\beta\gamma}{\alpha^2}\right\}$ の項で fill-in をあてている。積 HV を未知ベクトル u に作用させると

$$\begin{aligned}(HVu)_{j,k} &= \alpha_{jk}^2 u_{jk} - \beta_{j-1,k} u_{j-1,k} - \beta_{jk} u_{j+1,k} - \gamma_{jk} u_{j,k-1} - \gamma_{jk} u_{j,k+1} \\ &+ \frac{\beta_{j-1,k} \gamma_{j-1,k}}{\alpha_{j-1,k}^2} (u_{j-1,k-1} + u_{j-1,k+1}) + \frac{\beta_{jk} \gamma_{j+1,k}}{\alpha_{j+1,k}^2} (u_{j+1,k-1} + u_{j+1,k+1}).\end{aligned}$$

もし、上の HVu と Au を等置したとすれば、fill-in に対応した部分がそのまゝ誤差となる近似でしかない。そこで fill-in をあてずべきところを予め微小量をもち、 $(A+\Delta A)u$ を HV に近似すると考える。 $(A+\Delta A)u$ を次のようにおく：

$$\begin{aligned}&((A+\Delta A)u)_{j,k} \\ &= a_{jk} u_{jk} - b_{j-1,k} u_{j-1,k} - b_{jk} u_{j+1,k} - c_{j,k-1} u_{j,k-1} - c_{jk} u_{j,k+1} \\ &+ \frac{\beta_{j-1,k} \gamma_{j-1,k}}{\alpha_{j-1,k}^2} \left[u_{j-1,k-1} - \delta_{jk} (-u_{jk} + u_{j-1,k} + u_{j,k-1}) \right. \\ &\quad \left. + u_{j-1,k+1} - \delta_{jk} (-u_{jk} + u_{j-1,k} + u_{j,k+1}) \right] \\ &+ \frac{\beta_{jk} \gamma_{j+1,k}}{\alpha_{j+1,k}^2} \left[u_{j+1,k-1} - \delta_{jk} (-u_{jk} + u_{j+1,k} + u_{j,k-1}) \right. \\ &\quad \left. + u_{j+1,k+1} - \delta_{jk} (-u_{jk} + u_{j+1,k} + u_{j,k+1}) \right].\end{aligned}$$

ここで δ_{jk} ($0 < \delta_{jk} < 1$) は 1 に近いパラメータである。 ΔAu 部分が小さいというのは、滑らかな解の場合に

$$u_{j\pm 1, k\pm 1} = -u_{jk} + u_{j\pm 1, k} + u_{j, k\pm 1} + O(h)$$

となることに基いている。このアイデアは、不完全LU分解法の端緒となした Stone に依っている。^[3]

等置条件 $(A + \Delta A)u \sim HVu$ から以下の式が導かれる：

$$a_{jk} + 2\delta_{jk} \left[\frac{\beta_{j-1k} \gamma_{j-1k}}{\alpha_{j-1k}^2} + \frac{\beta_{jk} \gamma_{j+1k}}{\alpha_{j+1k}^2} \right] = \alpha_{jk}^2 + \varepsilon_{jk},$$

$$b_{j-1k} + 2\delta_{jk} \left[\frac{\beta_{j-1k} \gamma_{j-1k}}{\alpha_{j-1k}^2} \right] = \beta_{j-1k},$$

$$b_{jk} + 2\delta_{jk} \left[\frac{\beta_{jk} \gamma_{j+1k}}{\alpha_{j+1k}^2} \right] = \beta_{jk},$$

$$c_{jk-1} + \delta_{jk} \left[\frac{\beta_{j-1k} \gamma_{j-1k}}{\alpha_{j-1k}^2} + \frac{\beta_{jk} \gamma_{j+1k}}{\alpha_{j+1k}^2} \right] = \gamma_{jk},$$

$$c_{jk} + \delta_{jk} \left[\frac{\beta_{j-1k} \gamma_{j-1k}}{\alpha_{j-1k}^2} + \frac{\beta_{jk} \gamma_{j+1k}}{\alpha_{j+1k}^2} \right] = \gamma_{jk} + \varepsilon_{jk}$$

$$(\varepsilon_{jk} = c_{jk} - c_{jk-1}).$$

ε_{jk} は、上の系が自明な inconsistency に落ち入らない様に導入したものである。

いま、

$$\frac{b_{j-1k} + b_{jk}}{c_{j-1k} + c_{jk}} = d_k + O(h)$$

とみなせる場合には, 前頁の系の近似解を求める。 $\delta_{jk} = \delta_k$ としたとき, それは

$$\alpha_{jk}^2 = \frac{a_{jk} - (c_{j-1k} + c_{jk})}{1 - p_k}, \quad \beta_{jk} = \frac{b_{jk}}{1 - \delta_k p_k}, \quad \gamma_{jk} = \frac{p_k \alpha_{jk}^2}{2}$$

で与えられる。ただし, p_k は 2 次方程式

$$\delta_k p_k^2 - [1 + \delta_k + (1 - \delta_k) d_k] p_k + 1 = 0$$

の解 (< 1) である。 p_k を代入すれば, さらに近似的な表式
という (添数 j, k を省いた簡略形で表わす):

$$\alpha^2 \sim 2b \frac{1 + \sqrt{(1-\delta)d}}{\sqrt{(1-\delta)d}},$$

$$\beta \sim \frac{b(1 + \sqrt{(1-\delta)d})}{\sqrt{1-\delta}(\sqrt{1-\delta} + \sqrt{d})}, \quad \gamma \sim \frac{b}{\sqrt{(1-\delta)d}}$$

これらを用いて, 積 HV を書き表し, あらためて, 3 つの積の
形に書き直せば:

$$\begin{aligned} HV \sim & (0, 0, 0 \mid -b, 2(b + \sqrt{(1-\delta)bc}), -b \mid 0, 0, 0) \\ & \cdot (0, 0, 0 \mid 0, \frac{1}{2\sqrt{(1-\delta)bc}}, 0 \mid 0, 0, 0) \\ & \cdot (0, -c, 0 \mid 0, 2(c + \sqrt{(1-\delta)bc}), 0 \mid 0, -c, 0) \end{aligned}$$

$$= (D + A_1) D^{-1} (D + A_2)$$

となつてゐることを判明する。Dは対角行列である。

従来の分割作用素法では $D = \sigma I$ (σ : スカラー) とおいたものの五点処理行列 C として用いてきた。このことは、いまの場合 $2\sqrt{(1-\delta_k)b_{jk}c_{jk}} = -\text{定}$ ととることにあたり、さらに $\Delta A u$ の部分

$$\begin{aligned} & \frac{\beta\gamma}{\alpha^2} [u_{j\pm 1, k\pm 1} - \delta(-u_{jk} + u_{j\pm 1, k} + u_{j, k\pm 1})] \\ & \sim \frac{\beta\gamma}{\alpha^2} (1-\delta) u_{j\pm 1, k\pm 1} \sim \frac{1}{2} \sqrt{(1-\delta_k)b_{jk}c_{jk}} u_{j\pm 1, k\pm 1} \end{aligned}$$

の係数が j, k について一様になるように δ_k を決めることに相当してゐる。これは極めて自然な選択法であり、Dの任意性を生かした他の選択法を考えるまでもない。

計算例をみてみよう。正方形領域における定係数ポアソン方程式のディリクレ境界値問題

$$-\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + KY \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right) = f \quad (0 < x, y < 1), \quad u|_{\text{境界}} = 0$$

の5点差分近似式問題 (特殊に、 $f = \frac{1}{h^2}$ ととる)

$$2(1+KY)u_{jk} - u_{j-1, k} - u_{j+1, k} - KY(u_{j, k-1} + u_{j, k+1}) = 1.0$$

$$u_{0,k} = u_{N+1,k} = u_{j,0} = u_{j,N+1} = 0 \quad ((N+1)k = 1)$$

に対する各種解法の収束性能を比較してみる。

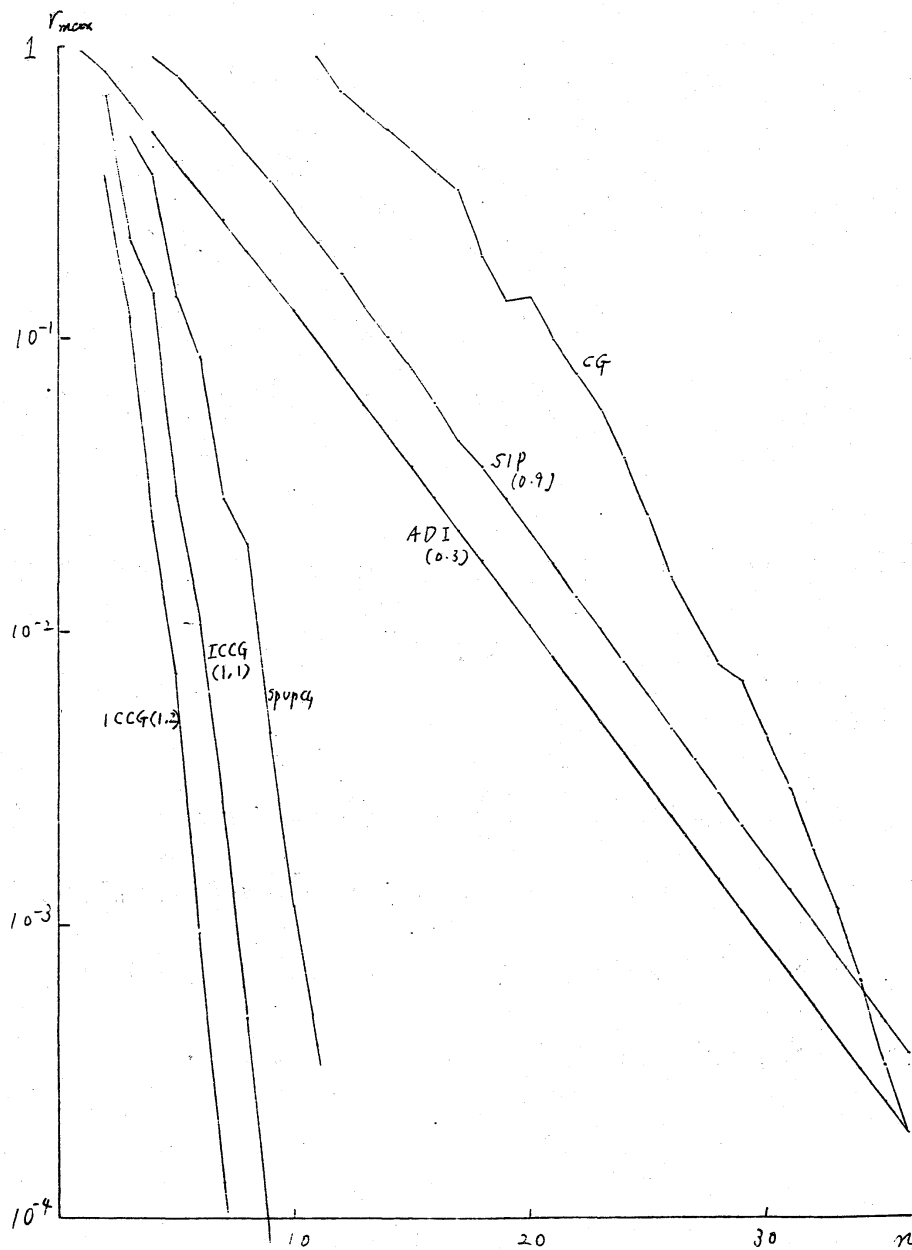


図1. 5点差分スキームに対する収束性の比較
($KY=0.1$, $N=16$)

図1は $KY=0.1$, $N=16$ の場合の結果である。横軸に反復回数(n), 縦軸(対数目盛)に残差の最大値(r_{max})をとる。

CG は単純な共役勾配法, SIP は Stone による Strongly implicit 法 (不完全性パラメータ $\delta=0.9$ の場合), ADI は加速パラメータ σ が一定 (0.3) の場合の ADI 法, ICCG (1,1), ICCG (1,2) は Meijerink^[4] の分類に基づいた ICCG 法である。SPUPCG が本節で述べてきた不完全 AD(HV) 分解法, 実のところ作用素分割法と CG 加速法を組み合わせたものである。

この結果をみれば, SPUPCG 法が ICCG 系の収束傾向によく追随していることがわかる。

図2は同じ問題を細かな網目 ($N=49$) で扱ったもので, ICCG (1,2) と SPUPCG ($\sigma=0.3 \sqrt{A \text{ の最大固有値} \times \text{最小固有値}}$) とを比較している。網目が細かくなると SPUPCG 法の方が ICCG 法より優れた収束性能をもつことがわかる。

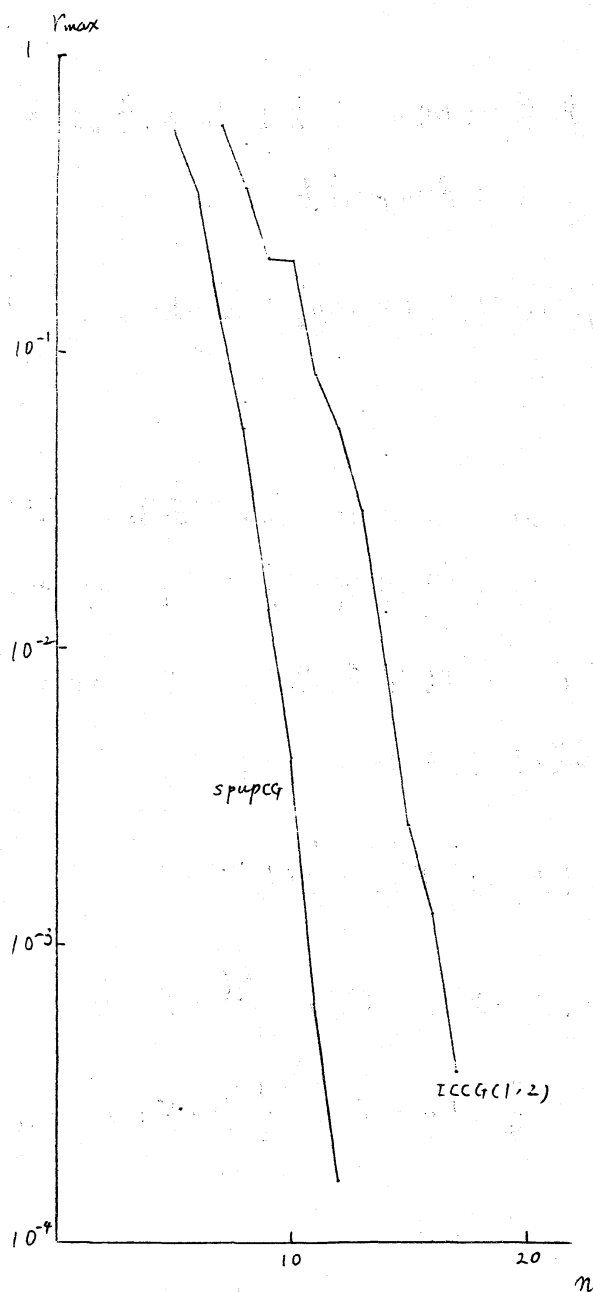


図2 5点差分スキームに対する4又束性の比較
($KY=0.1$, $N=49$)

§2 修正不完全HV分解 有限要素法から生じるスキームでは、7点や9点以上のものも登場してくる。このとき主要5点の内4点の非対角部分をそのままにして、残りの非

対角部分は対角要素に吸収してできる修正作用素 $\tilde{A}_1 + \tilde{A}_2$ を作り, これに対して分割作用素

$$C = (\sigma I + \tilde{A}_1)(\sigma^{-1}I)(\sigma I + \tilde{A}_2) = (\sqrt{\sigma}I + \frac{1}{\sqrt{\sigma}}\tilde{A}_1)(\sqrt{\sigma}I + \frac{1}{\sqrt{\sigma}}\tilde{A}_2)$$

を利用する。

この修正効果をみるために, 解析可能な簡単な例 E とりあげる。前節のホアソン方程式に対して, 正方形網目上で二次元基底関数を用いた有限要素近似スキームを考える。このとき, 得られる係数行列 A は

$$A = \begin{pmatrix} -\frac{1}{4}(1+KY), & \frac{1}{2}-KY, & -\frac{1}{4}(1+KY) \\ \frac{KY}{2}-1, & 2(1+KY), & \frac{KY}{2}-1 \\ -\frac{1}{4}(1+KY), & \frac{1}{2}(1-KY), & -\frac{1}{4}(1+KY) \end{pmatrix}$$

あるいは

$$\begin{aligned} (Au)_{jk} &= 2(1+KY)u_{jk} - (1-\frac{KY}{2})(u_{j-1k} + u_{j+1k}) \\ &\quad - (KY-\frac{1}{2})(u_{jk-1} + u_{jk+1}) - \frac{1}{4}(1+KY)(u_{j-1k-1} + u_{j-1k+1} + u_{j+1k-1} + u_{j+1k+1}) \end{aligned}$$

と表せる。

A の固有値, 固有関数系は

$$\lambda_{pq} = 6(X_p + KYX_q) - 4(1 + KY)X_pX_q$$

$$(X_p = \sin^2 \frac{p\pi h}{2})$$

$$u_{jk}^{pq} = \sin p_j \pi h \cdot \sin q_k \pi h$$

$$(p, q = 1, 2, \dots, N)$$

である。

A に対して修正を施したものは

$$\tilde{A} = \tilde{A}_1 + \tilde{A}_2,$$

$$\tilde{A}_1 = (0, 0, 0 \mid -1, 2, -1 \mid 0 \ 0 \ 0),$$

$$\tilde{A}_2 = (0, -KY, 0 \mid 0, 2KY, 0 \mid 0, -KY, 0)$$

となる。 $\tilde{A}$ に対する分割作用素

$$C = (\sqrt{\sigma} + \frac{1}{\sqrt{\sigma}} \tilde{A}_1)(\sqrt{\sigma} + \frac{1}{\sqrt{\sigma}} \tilde{A}_2)$$

は A と同じ固有関数系をもち、その固有値は

$$\lambda(C)_{pq} = \sigma + 4X_p + 4KYX_q + \frac{1}{\sigma} \cdot 16KYX_pX_q$$

である。これより、4要素性を律する行列 $C^{-1}A$ の固有値は

$$\lambda(C^{-1}A)_{pq} = \frac{6X_p + 6KYX_q - 4(1 + KY)X_pX_q}{\sigma + 4X_p + 4KYX_q + \frac{16}{\sigma}KYX_pX_q}$$

となる。

$C^{-1}A$ の条件数ができるだけ小さくなる様に σ を選択することと考える。最後の式の右辺の関数を調べれば、小さな σ に対して、最大固有値は $\{p=1, q=N\}$ か $\{p=N, q=1\}$ で達せられ、最小固有値は $\{p=1, q=1\}$ か $\{p=N, q=N\}$ で達せられる。根拠のある選択法

$$\sigma = \text{const.} \cdot \sqrt{A \text{ の最大固有値} \times \text{最小固有値}}$$

$$\sim \sigma_f \sqrt{X_1}$$

を採用して σ_f を決定しよう。このとき、 $C^{-1}A$ の最大固有値は上記両点で達せられ $\lambda_{\max}(C^{-1}A) \sim \frac{3}{2}$ となる。最小値の方も偏りなく上の両点で達せられるという条件を荷せけ。

$$\sigma_f = \sqrt{48 KY}$$

となることがわかる。これを用いると、

$$C^{-1}A \text{ の条件数} \sim \frac{1}{\sqrt{KY} + \frac{1}{\sqrt{KY}}} \sqrt{\frac{3}{X_1}}$$

である。これは、もとの A の条件数 $O(\frac{1}{X_1})$ に比べてオーダー的に減少していることを示している。

因に、前節の標準的5点差分近似の場合における $C^{-1}A$ の条件数を求めると

$$\frac{1}{\sqrt{KY} + \frac{1}{\sqrt{KY}}} \sqrt{\frac{1}{X_1}}$$

となり，修正効果が $\sqrt{3}$ 倍に出ているに過ぎないことがわかる。

計算例として，同じポアソン方程式ではあるが，正方形領域ではなく，図3のような領域における境界値問題を考える。図にある三角形細目上で線形となる基底関数を用いた有限要素近似を考えると7点スキームを得る。

前記理行列 C の決め方の色々に対して4変束性能を比較したものが図4である。ILUCG は， A の不完全LU分解を用いたもので，LU分解過程で本来 fill-in するべきものをすべて対角要素に吸収させたものである。MSPUPCG が，本節で述べたように不完全分割したものである。

この結果では，ICCG(1,3) が最も優れているが，

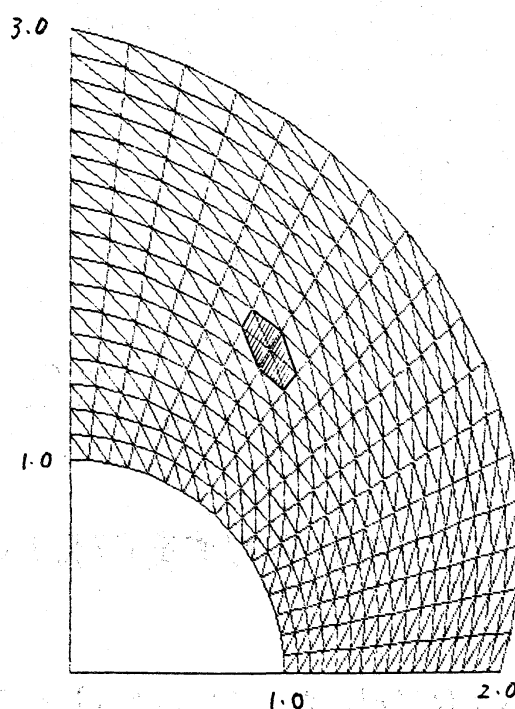


図3 有限要素細目

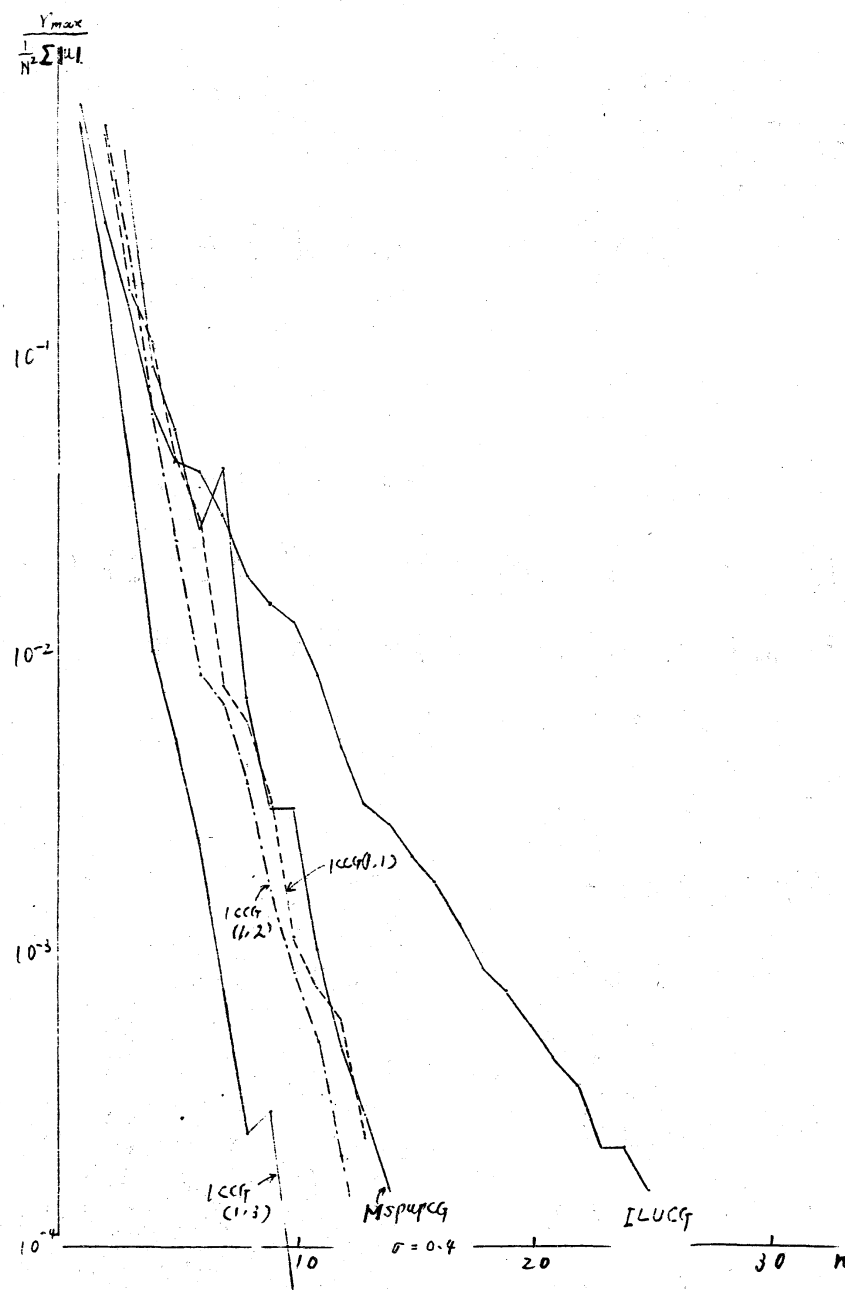


図4 有限要素(7点)スキームに対する収束性

ICCG(1,1)やICCG(1,2)とMSPUPCGは同等であるといえる。網目が細くなれば、MSPUPCGが相対的に良くなる可能性もある。

最後に、直ぐ上で扱った計算例における各種方法の計算量を比較しておく。内部格子点を N^2 とすると、行列 A の決定には約 $350 N^2$ の浮動小数点演算(加算や乗算)が必要である。前処理行列 C を決める分割計算と反復計算部分に分けて比較すると次の表のようになる。必要な反復回数 P が入る

	MSPUPCG	ILUCG	ICCG(1,1)	ICCG(1,2)	ICCG(1,3)
分割	$6 N^2$	$17 N^2$	$6 N^2$	$19 N^2$	$30 N^2$
反復	$24 N^2 P$	$37 N^2 P$	$33 N^2 P$	$37 N^2 P$	$41 N^2 P$

表1 計算量の比較

くなると、反復部分が計算量の主要部分になるが、明らかに MSPUPCG 法が最も計算量の少ない方法だと言える(他の $2/3$ 程度)。非線形問題などでは分割部分にも P 因子が登場することになる。その場合、MSPUPCG が ICCG(1,2) 以上のものに比して $1/3$ 以下であることは非常に大きな意味をもてくる。

その上、MSPUPCG が他のものに優れる点は、反復計算、分割計算ともに殆んど並列処理が可能で、 N のオーダーを落とすことができるということである。

上記計算の一部を大学院生若谷彰良氏に手伝って戴いた。ここに感謝します。

参考文献

- [1] Axelsson, O. and Barker, V. A., Finite Element Solution of Boundary Value Problems, Academic Press, Inc. 1984
- [2] Marchuk, G. I., Methods of Numerical Mathematics, Springer
- [3] Stone, H. L., Iterative Solution of Implicit Approximations of Multidimensional Partial Differential Equations, SIAM J. Numer. Anal. Vol. 5, No. 3, 1968 pp. 530-558.
- [4] Meijerink, J. A. and Van der Vorst, H. A., Guidelines for the Usage of Incomplete Decompositions in Solving Sets of Linear Equations as They Occur in Practical Problems, J. Comp. Phys. 44, 1981, pp. 134-155.