社団法人 情報処理学会　研究報告
IPSJ SIG Technical Report

2003－HPC－96　(1)
2003／10／16

直方体状領域上での分離型線形偏微分方程式の一般化フーリエ・モード解法について

村　上　　　弘[†]

多次元直方体状領域上で，分離型の線形偏微分方程式を，テンソル積型の基底関数系を用いて離散化し生じる大規模線形方程式を，係数行列の代数的な構造を利用して，反復法ではなくて直接的に，係数行列もその LU 分解も作らず，高速に解く方法（一般化フーリエ・モード法）について説明し実験する．

計算量の主要部はテンソル添字の縮約で，密行列の積として扱えるので，特に微分方程式の直方体状領域の次元が高い場合ほど高性能が出しやすく，並列度も高く取れる，

On the Generalized Fourier-mode Solver for the Separable Linear PDE on the Rectilinear Region

Murakami Hiroshi [†]

In this paper, a fast direct solver for the separable linear PDE on the rectilinear region discretized by the tensor product type base functions is explained and experimented. The discretized large sized linear equation is solved making use of the algebraic structure of its coefficient matrix. The solver is not iterative but direct, without forming the large coefficient matrix or its LU-decomposition.

Since the most heavy part of computation in this method is contractions of tensor induces and they can be realized as the matrix multiplications of dense matrices, the high performance can be obtained and the parallity is high especially when the dimension of the rectilinear region of the PDE problem is higher.

1. 一次元の場合

区間 I 上，線形微分作用素 $P=P(x,\partial)$ に対応する微分方程式 $P(x,\partial)f(x)=g(x)$ を考える．解 $f(x)$ を区間 I 上の基底関数の組 $\{b_\mu(x)\}$ を導入し c_μ を展開係数として近似し $f(x)\approx\sum_\mu c_\mu b_\mu(x)$ とする．区間 I 上のテスト関数の組 $\{t_\nu(x)\}$ で関数内積を求めると $\langle t_\nu(x), P(x,\partial)f(x)\rangle_I = \langle t_\nu(x), g(x)\rangle_I$ だから，$\sum_\nu K_{\nu,\mu}c_\mu = d_\nu$．但し
$K_{\nu,\mu}\equiv\langle t_\nu(x), P(x,\partial)b_\mu(x)\rangle_I$，$d_\nu\equiv\langle t_\nu(x), g(x)\rangle_I$
となり，行列 K を係数とする線形方程式 $Kc=d$ に帰着する．内積計算は数値積分近似を仮定する．

2. 二次元の場合

領域が積領域 $I = I^{(1)}\times I^{(2)}$，変数を $x = (x^{(1)},x^{(2)})$，内積計算の重みは各次元の重みの積とする．線形偏微分演算子が Separable（分離型，つまり各次元の微分演算子の和）$P(x,\partial)\equiv P^{(1)}(x^{(1)},\partial_{x^{(1)}}) + P^{(2)}(x^{(2)},\partial_{x^{(2)}})$ に限定する．

I 上で微分方程式 $P(x,\partial)f(x) = g(x)$ を考える．$f(x)$ を各次元の基底関数の積で：$b_\mu(x) \equiv b^{(1)}_{\mu_1}(x^{(1)})\,b^{(2)}_{\mu_2}(x^{(2)})$, $c_\mu \equiv c_{(\mu_1,\mu_2)}$ により $f(x) \approx \sum_\mu c_\mu b_\mu(x) = \sum_{(\mu_1,\mu_2)} c_{(\mu_1,\mu_2)} b^{(1)}_{\mu_1}(x^{(1)}) b^{(2)}_{\mu_2}(x^{(2)})$ と近似展開し，テスト関数 $t_\nu(x)\equiv t^{(1)}_{\nu_1}(x^{(1)})\,t^{(2)}_{\nu_2}(x^{(2)})$ との内積をとると：$\langle t_\nu, Pf\rangle_I = \langle t_\nu, g\rangle_I$ より，$\sum_{(\mu_1,\mu_2)}\{K^{(1)}_{\nu_1,\mu_1}M^{(2)}_{\nu_2,\mu_2} + M^{(1)}_{\nu_1,\mu_1}K^{(2)}_{\nu_2,\mu_2}\}c_{(\mu_1,\mu_2)} = d_{(\nu_1,\nu_2)}$．但し：
$K^{(1)}_{\nu_1,\mu_1}\equiv\langle t^{(1)}_{\nu_1}, P^{(1)}b^{(1)}_{\mu_1}\rangle_{I^{(1)}}$, $M^{(1)}_{\nu_1,\mu_1}\equiv\langle t^{(1)}_{\nu_1}, b^{(1)}_{\mu_1}\rangle_{I^{(1)}}$,
$K^{(2)}_{\nu_2,\mu_2}\equiv\langle t^{(2)}_{\nu_2}, P^{(2)}b^{(2)}_{\mu_2}\rangle_{I^{(2)}}$, $M^{(2)}_{\nu_2,\mu_2}\equiv\langle t^{(2)}_{\nu_2}, b^{(2)}_{\mu_2}\rangle_{I^{(2)}}$,
$d_\nu\equiv\langle t_\nu(x), g(x)\rangle_I$.
すると二次元の Separable な問題は行列：$A_{\nu,\mu}\equiv K^{(1)}_{\nu_1,\mu_1}M^{(2)}_{\nu_2,\mu_2} + M^{(1)}_{\nu_1,\mu_1}K^{(2)}_{\nu_2,\mu_2}$ による線形方程式：$\sum_\mu A_{\nu,\mu}c_\mu = d_\nu$ に帰着する．いま，全体の線形方程式の係数行列 A を，見通しをよくするためテンソル積 $\otimes$ を用いて $A\equiv K^{(1)}\otimes M^{(2)} + M^{(1)}\otimes K^{(2)}$ と表す．そこで，$(K^{(1)},M^{(1)})$，$(K^{(2)},M^{(2)})$ を係数

† 東京都立短期大学 経営情報学科
Tokyo Metropolitan College, Management and Information

の組とする一般化固有値問題が non-defective(非欠損) であると仮定し，それぞれの一般化固有値分解を：$W^{(\bullet)^T}K^{(\bullet)}U^{(\bullet)}=\Lambda^{(\bullet)}$, $W^{(\bullet)^T}M^{(\bullet)}U^{(\bullet)}=E^{(\bullet)}$ とし，次に $W^T \equiv W^{(1)^T}\otimes W^{(2)^T}$,$U \equiv U^{(1)}\otimes U^{(2)}$ と置いて W^TAU を計算すると：$W^TAU = (W^{(1)^T}\otimes W^{(2)^T})(K^{(1)}\otimes M^{(2)}+M^{(1)}\otimes K^{(2)})(U^{(1)}\otimes U^{(2)}) = W^{(1)^T}K^{(1)}U^{(1)}\otimes W^{(2)^T}M^{(2)}U^{(2)} + W^{(1)^T}M^{(1)}U^{(1)}\otimes W^{(2)^T}K^{(2)}U^{(2)} = \Lambda^{(1)}\otimes E^{(2)} + E^{(1)}\otimes\Lambda^{(2)}$ と対角行列である．それを二次元問題の Λ と置く：$\Lambda_{\nu,\mu} = \Lambda_{(\nu_1,\nu_2),(\mu_1,\mu_2)} = \delta_{\nu_1,\mu_1}\delta_{\nu_2,\mu_2}\times(\lambda^{(1)}_{\nu_1}+\lambda^{(2)}_{\nu_2}) = \delta_{\nu,\mu}\times(\lambda^{(1)}_{\nu_1}+\lambda^{(2)}_{\nu_2})$.
$Ac=d$ より，$\Lambda U^{-1}c=(W^TAU)\,U^{-1}c=W^Td$ だから $c=U\Lambda^{-1}W^Td$.
つまり $c=(U^{(1)}\otimes U^{(2)})\,\Lambda^{-1}\,(W^{(1)T}\otimes W^{(2)T})\,d$.

添字の縮約順序の選び方に対応して d から c を計算する方法は一通りではないが，それを例えば：

$$\begin{aligned} d''_\eta &= (W^T\ d\,)_\eta = \sum_\nu W_{\nu,\eta}d_\nu \\ &= \sum_{(\nu_1,\nu_2)} W^{(1)}_{\nu_1,\eta_1}W^{(2)}_{\nu_2,\eta_2}\,d_{(\nu_1,\nu_2)} \\ &= \sum_{\nu_2} W^{(2)}_{\nu_2,\eta_2}\,(\sum_{\nu_1} W^{(1)}_{\nu_1,\eta_1}\,d_{(\nu_1,\nu_2)}\,); \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} c''_\eta &= (\Lambda^{-1}\,d''\,)_\eta = \Lambda^{-1}_{\eta,\eta}\,d''_\eta \\ &= (\lambda^{(1)}_{\eta_1}+\lambda^{(2)}_{\eta_2})^{-1}\,d''_{(\eta_1,\eta_2)}; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} c_\mu &= (Uc''\,)_\mu = \sum_\eta U_{\mu,\eta}\,c''_\eta \\ &= \sum_{(\eta_1,\eta_2)} U^{(1)}_{\mu_1,\eta_1}U^{(2)}_{\mu_2,\eta_2}\ c''_{(\eta_1,\eta_2)} \\ &= \sum_{\eta_2} U^{(2)}_{\mu_2,\eta_2}\,(\sum_{\eta_1} U^{(1)}_{\mu_1,\eta_1}\ c''_{(\eta_1,\eta_2)}\,); \end{aligned}$$

とする．まとめると：

STEP-1:

$$\begin{aligned} d'_{(\nu_2,\eta_1)} &\Leftarrow \sum_{\nu_1} d_{(\nu_1,\nu_2)}\,W^{(1)}_{\nu_1,\eta_1}\,, \\ d''_{(\eta_1,\eta_2)} &\Leftarrow \sum_{\nu_2} d'_{(\nu_2,\eta_1)}\ W^{(2)}_{\nu_2,\eta_2}\,; \end{aligned}$$

STEP-2:

$$c''_{(\eta_1,\eta_2)} \Leftarrow (\lambda^{(1)}_{\eta_1}+\lambda^{(2)}_{\eta_2})^{-1}\,d''_{(\eta_1,\eta_1)}\,;$$

STEP-3:

$$\begin{aligned} c'_{(\eta_2,\mu_1)} &\Leftarrow \sum_{\eta_1} c''_{(\eta_1,\eta_2)}(U^{(1)T})_{\eta_1,\mu_1}\,, \\ c_{(\mu_1,\mu_2)} &\Leftarrow \sum_{\eta_2} c'_{(\eta_2,\mu_1)}(U^{(2)T})_{\eta_2,\mu_2}\,; \end{aligned}$$

により，$d_\nu=d_{(\nu_1,\nu_2)}$ から $c_\mu=c_{(\mu_1,\mu_2)}$ を計算.

3. 三次元の場合

領域：$I=I^{(1)}\times I^{(2)}\times I^{(3)}$,
変数：$x=(x^{(1)},x^{(2)},x^{(3)})$，内積の重み関数は各次元の重み関数の積とする．線形微分演算子が Separable：$P(x,\partial)\equiv P^{(1)}+P^{(2)}+P^{(3)}$ であると限定する．I 上で微分方程式：$P(x,\partial)f(x)=g(x)$ を考え，積型基底関数：$b_\mu(x) = b^{(1)}_{\mu_1}b^{(2)}_{\mu_2}b^{(3)}_{\mu_3}$ を採用すると，解の展開は：$f(x) \approx \sum_\mu c_\mu b_\mu = \sum_{(\mu_1,\mu_2,\mu_3)} c_{(\mu_1,\mu_2,\mu_3)}b^{(1)}_{\mu_1}b^{(2)}_{\mu_2}b^{(3)}_{\mu_3}$ となる．テスト関数 $t_\nu = t^{(1)}_{\nu_1}t^{(2)}_{\nu_2}t^{(3)}_{\nu_3}$ との内積をとれば $\langle t_\nu,Pf\rangle_I = \langle t_\nu,g\rangle_I$ より，$\sum_{(\mu_1,\mu_2,\mu_3)}\{K^{(1)}_{\nu_1,\mu_1}M^{(2)}_{\nu_2,\mu_2}M^{(3)}_{\nu_3,\mu_3} + M^{(1)}_{\nu_1,\mu_1}K^{(2)}_{\nu_2,\mu_2}M^{(3)}_{\nu_3,\mu_3} + M^{(1)}_{\nu_1,\mu_1}M^{(2)}_{\nu_2,\mu_2}K^{(3)}_{\nu_3,\mu_3}\}\times c_{(\mu_1,\mu_2,\mu_3)} = d_{(\nu_1,\nu_2,\nu_3)}$.
但し：
$K^{(1)}_{\nu_1,\mu_1}\equiv\langle t^{(1)}_{\nu_1},P^{(1)}b^{(1)}_{\mu_1}\rangle_{I^{(1)}}$, $M^{(1)}_{\nu_1,\mu_1}\equiv\langle t^{(1)}_{\nu_1},b^{(1)}_{\mu_1}\rangle_{I^{(1)}}$,
$K^{(2)}_{\nu_2,\mu_2}\equiv\langle t^{(2)}_{\nu_2},P^{(2)}b^{(2)}_{\mu_2}\rangle_{I^{(2)}}$, $M^{(2)}_{\nu_2,\mu_2}\equiv\langle t^{(2)}_{\nu_2},b^{(2)}_{\mu_2}\rangle_{I^{(2)}}$,
$K^{(3)}_{\nu_3,\mu_3}\equiv\langle t^{(3)}_{\nu_3},P^{(3)}b^{(3)}_{\mu_3}\rangle_{I^{(3)}}$, $M^{(3)}_{\nu_3,\mu_3}\equiv\langle t^{(3)}_{\nu_3},b^{(3)}_{\mu_3}\rangle_{I^{(3)}}$,
$d_\nu\equiv\langle t_\nu(x),g(x)\rangle_I$.

三次元の Separable な問題は，
$A_{\nu,\mu}\equiv K^{(1)}_{\nu_1,\mu_1}M^{(2)}_{\nu_2,\mu_2}M^{(3)}_{\nu_3,\mu_3}+K^{(1)}_{\nu_1,\mu_1}K^{(2)}_{\nu_2,\mu_2}M^{(3)}_{\nu_3,\mu_3}+M^{(1)}_{\nu_1,\mu_1}M^{(2)}_{\nu_2,\mu_2}K^{(3)}_{\nu_3,\mu_3}$ を係数行列とする線形方程式 $\sum_\mu A_{\nu,\mu}c_\mu = d_\nu$ に帰着する．三次元問題のこの行列 A を $A\equiv K^{(1)}\otimes M^{(2)}\otimes M^{(3)}+M^{(1)}\otimes K^{(2)}\otimes M^{(3)}+M^{(1)}\otimes M^{(2)}\otimes K^{(3)}$ と書く．各次元の係数行列の組：$(K^{(1)},M^{(1)})$,$(K^{(2)},M^{(2)})$,$(K^{(3)},M^{(3)})$ のそれぞれに対応する一般化固有値問題が non-defective（非欠損）と仮定し，一般固有値分解を：

$$\begin{aligned} &W^{(\bullet)^T}K^{(\bullet)}U^{(\bullet)} = \Lambda^{(\bullet)}, \\ &W^{(\bullet)^T}M^{(\bullet)}U^{(\bullet)} = E^{(\bullet)}, \\ &\quad (K^{(\bullet)},M^{(\bullet)}) \Rightarrow (U^{(\bullet)},W^{(\bullet)},\Lambda^{(\bullet)}) \end{aligned}$$

とする．そこでいま $W^T\equiv W^{(1)^T}\otimes W^{(2)^T}\otimes W^{(3)^T}$, $U\equiv U^{(1)}\otimes U^{(2)}\otimes U^{(3)}$ と置いて，左と右から W, U で A を変換すると $W^TAU=\Lambda^{(1)}\otimes E^{(2)}\otimes E^{(3)}+E^{(1)}\otimes\Lambda^{(2)}\otimes E^{(3)}+E^{(1)}\otimes E^{(2)}\otimes\Lambda^{(3)}$ であり，上式右辺の対角行列を Λ と置くと，$\Lambda_{\nu,\mu}=\Lambda_{(\nu_1,\nu_2,\nu_3),(\mu_1,\mu_2,\mu_3)} =\delta_{\nu,\mu}\times(\lambda^{(1)}_{\nu_1}+\lambda^{(2)}_{\nu_2}+\lambda^{(3)}_{\nu_3})$ である.
$Ac=d$ だから $\Lambda U^{-1}c=(W^TAU)U^{-1}c=W^Td$ により，解の表式は $c=U\Lambda^{-1}W^Td$ となる.

$c = (U^{(1)} \otimes U^{(2)} \otimes U^{(3)})\,\Lambda^{-1}\,(W^{(1)T} \otimes W^{(2)T} \otimes W^{(3)T})\,d$.

いま，d から c を計算する一つの方法を：

$$
\begin{aligned}
d_\eta''' &= (\,W^T\ d\,)_\eta \\
&= \sum_\nu W^T{}_{\eta,\nu}\, d_\nu = \sum_\nu W_{\nu,\eta}\, d_\nu \\
&= \sum_{(\nu_1,\nu_2,\nu_3)} W^{(1)}_{\nu_1,\eta_1} W^{(2)}_{\nu_2,\eta_2} W^{(3)}_{\nu_3,\eta_3}\, d_{(\nu_1,\nu_2,\nu_3)} \\
&= \sum_{\nu_3} W^{(3)}_{\nu_3,\eta_3}\,(\sum_{\nu_2} W^{(2)}_{\nu_2,\eta_2}\ \times \\
&\qquad (\sum_{\nu_1} W^{(1)}_{\nu_1,\eta_1}\, d_{(\nu_1,\nu_2,\nu_3)}\,)\,);
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
c_\eta''' &= (\Lambda^{-1}\, d'''\,)_\eta = \Lambda^{-1}_{\eta,\eta}\, d_\eta''' \\
&= (\lambda^{(1)}_{\eta_1} + \lambda^{(2)}_{\eta_2} + \lambda^{(3)}_{\eta_3})^{-1}\, d'''_{(\eta_1,\eta_2,\eta_3)}\,;
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
c_\mu &= (Uc''')_\mu = \sum_\eta U_{\mu,\eta}\, c_\eta''' \\
&= \sum_{(\eta_1,\eta_2\,\eta_3)} U^{(1)}_{\mu_1,\eta_1} U^{(2)}_{\mu_2,\eta_2} U^{(3)}_{\mu_3,\eta_3}\, c'''_{(\eta_1,\eta_2,\eta_3)} \\
&= \sum_{\eta_3} U^{(3)}_{\mu_3,\eta_3}\,(\sum_{\eta_2} U^{(2)}_{\mu_2,\eta_2}\ \times \\
&\qquad (\sum_{\eta_1} U^{(1)}_{\mu_1,\eta_1}\, c''_{(\eta_1,\eta_2)}\,)\,);
\end{aligned}
$$

とすれば，まとめると $d_\nu = d_{(\nu_1,\nu_2,\nu_3)}$ から：

STEP-1（正変換）：

$$
\begin{aligned}
d'_{(\nu_2,\nu_3,\eta_1)} &\Leftarrow \sum_{\nu_1} d_{(\nu_1,\nu_2,\nu_3)} W^{(1)}_{\nu_1,\eta_1}\,, \\
d''_{(\nu_3,\eta_1,\eta_2)} &\Leftarrow \sum_{\nu_2} d'_{(\nu_2,\nu_3,\eta_1)} W^{(2)}_{\nu_2,\eta_2}\,, \\
d'''_{(\eta_1,\eta_2,\eta_3)} &\Leftarrow \sum_{\nu_3} d''_{(\nu_3,\eta_1,\eta_2)} W^{(3)}_{\nu_3,\eta_3}\,;
\end{aligned}
$$

STEP-2：

$$
c'''_{(\eta_1,\eta_2,\eta_3)} \Leftarrow (\lambda^{(1)}_{\eta_1} + \lambda^{(2)}_{\eta_2} + \lambda^{(3)}_{\eta_3})^{-1} d'''_{(\eta_1,\eta_2,\eta_3)}\,;
$$

STEP-3（逆変換）：

$$
\begin{aligned}
c''_{(\eta_2,\eta_3,\mu_1)} &\Leftarrow \sum_{\eta_1} c'''_{(\eta_1,\eta_2,\eta_3)} (U^{(1)T})_{\eta_1,\mu_1}\,, \\
c'_{(\eta_3,\mu_1,\mu_2)} &\Leftarrow \sum_{\eta_2} c''_{(\eta_2,\eta_3,\mu_1)} (U^{(2)T})_{\eta_2,\mu_2}\,, \\
c_{(\mu_1,\mu_2,\mu_3)} &\Leftarrow \sum_{\eta_3} c'_{(\eta_3,\mu_1,\mu_2)} (U^{(3)T})_{\eta_3,\mu_3}\,;
\end{aligned}
$$

により，係数 $c_\mu = c_{(\mu_1,\mu_2,\mu_3)}$ を計算できる．

STEP-1（正変換）に現れる添字をセミコロンで区切って二組に分け，縮約を：

$$
\begin{aligned}
d'_{(\nu_2,\nu_3);\eta_1} &\Leftarrow \sum_{\nu_1} d_{\nu_1;(\nu_2,\nu_3)} W^{(1)}_{\nu_1,\eta_1}\,, \\
d''_{(\nu_3,\eta_1);\eta_2} &\Leftarrow \sum_{\nu_2} d'_{\nu_2;(\nu_3,\eta_1)} W^{(2)}_{\nu_2,\eta_2}\,, \\
d'''_{(\eta_1,\eta_2);\eta_3} &\Leftarrow \sum_{\nu_3} d''_{\nu_3;(\eta_1,\eta_2)} W^{(3)}_{\nu_3,\eta_3}\,;
\end{aligned}
$$

と見なせば，それぞれは行列転置積 $D' = D^T W^{(1)}$，$D'' = D'^T W^{(2)}$，$D''' = D''^T W^{(3)}$ である．

STEP-2 で d''' から c''' を求める計算は，各要素にその添字から決まる因子を乗じるだけである．逆数が無限大になる場合は一般逆の意味と解釈する．

STEP-3（逆変換）に現れる添字の縮約を：

$$
\begin{aligned}
c''_{(\eta_2,\eta_3);\mu_1} &\Leftarrow \sum_{\eta_1} c'''_{\eta_1;(\eta_2,\eta_3)} (U^{(1)T})_{\eta_1,\mu_1}\,; \\
c'_{(\eta_3,\mu_1);\mu_2} &\Leftarrow \sum_{\eta_2} c''_{\eta_2;(\eta_3,\mu_1)} (U^{(2)T})_{\eta_2,\mu_2}\,; \\
c_{(\mu_1,\mu_2);\mu_3} &\Leftarrow \sum_{\eta_3} c'_{\eta_3;(\mu_1,\mu_2)} (U^{(3)T})_{\eta_3,\mu_3}\,;
\end{aligned}
$$

と見なせば，それらは行列転置積 $C'' = C'''^T U^{(1)^T}$，$C' = C''^T U^{(2)^T}$，$C = C'^T U^{(3)^T}$ となる．

変換の式の主要計算部分は $Y = \mathrm{TMUL}(X, S) \equiv X^T S$ の形式の行列転置積であり，三次元問題では 6 回，二次元問題では 4 回使われる．係数 d から c を求めるには，次元と同じ個数の添字を持つ量を記憶できる場所を二個用意し，計算途中の右辺と左辺に割り当てて交互に使えばよい．

4. 基底関数について

紙数の関係で，採用する基底関数の例の詳細な記述は省略する．基底関数には各次元で区分的な多項式基底を用いるのが計算上もっとも便利である．ニ階楕円型偏微分方程式の場合，FEM の変分定式化（部分積分を一回行った形式）を採用するなら，基底関数は区分的に連続であればよい．各区分区間内で高次多項式を割り当てることができる．（例：積分 Legendre 多項式，Lagrange 内挿多項式等）基底関数の台が区間内あるいは隣接区間までに納まる性質は適切に有効利用する．

自己随伴な偏微分方程式の場合は，解の展開に用いる基底関数系と試行関数に用いる基底関数系を等しくとると，行列 K, M は対称となり，一般化固有値問題が実数のみの固有値，固有ベクトルを持ち，左右の固有ベクトルも一致するから計算が著しく容易となる．

5. Separable から少し一般化

二次元の例を採る．領域を区間の積領域とし，内

積の重み関数を各次元の重み関数の積とする．二次元線形偏微分演算子 P として次の形のものに一般化する．$P^{(\bullet)}, Q^{(\bullet)}$ を一変数 $x^{(\bullet)}$ のみの線形微分演算子とする．$\alpha^{(\bullet,\bullet)}$ を定数として，二次元線形偏微分作用素を：$P \equiv \alpha^{(1,1)}P^{(1)}P^{(2)} + \alpha^{(1,0)}P^{(1)}Q^{(2)} + \alpha^{(0,1)}Q^{(1)}P^{(2)} + \alpha^{(0,0)}Q^{(1)}Q^{(2)}$ とする．（注意：k-次元の場合は，上記の式の項数が 2^k となる．）一次元演算子の行列要素を：$K^{(\bullet)} \equiv \langle t^{(\bullet)}, P^{(\bullet)}b^{(\bullet)}\rangle_{I^{(\bullet)}}$，$M^{(\bullet)} \equiv \langle t^{(\bullet)}, Q^{(\bullet)}b^{(\bullet)}\rangle_{I^{(\bullet)}}$ とする．解の展開：$f(x) \approx \sum_\mu c_\mu b_\mu(x)$ とすると，内積の左辺は $\langle t, Pf\rangle_I = \sum_\mu A_{\nu,\mu}\, c_\mu$．$A \equiv \alpha^{(1,1)}K^{(1)} \otimes K^{(2)} + \alpha^{(1,0)}K^{(1)} \otimes M^{(2)} + \alpha^{(0,1)}M^{(1)} \otimes K^{(2)} + \alpha^{(0,0)}M^{(1)} \otimes M^{(2)}$．各次元の行列 $(K^{(\bullet)}, M^{(\bullet)})$ の一般固有値分解を $(U^{(\bullet)}, W^{(\bullet)}, \Lambda^{(\bullet)})$ とする．そこで，$U \equiv U^{(1)} \otimes U^{(2)}$, $W \equiv W^{(1)} \otimes W^{(2)}$ と置くと，$W^T AU = \alpha^{(1,1)}\Lambda^{(1)} \otimes \Lambda^{(2)} + \alpha^{(1,0)}\Lambda^{(1)} \otimes E^{(2)} + \alpha^{(0,1)}E^{(1)} \otimes \Lambda^{(2)} + \alpha^{(0,0)}E^{(1)} \otimes E^{(2)}$ は対角行列になるから，それを Λ と置くと $\Lambda_{\nu,\mu} = \delta_{\nu,\mu} \times (\alpha^{(1,1)}\lambda^{(1)}_{\nu_1}\lambda^{(2)}_{\nu_2} + \alpha^{(1,0)}\lambda^{(1)}_{\nu_1} + \alpha^{(0,1)}\lambda^{(2)}_{\nu_2} + \alpha^{(0,0)})$ となる．線形方程式 $Ac = d$ の解法は $c = U\Lambda^\dagger W^T d$ で，Separable の場合と Λ の要素の表式が異なる以外は同様で三次元以上の場合も同様．

6. 計算量について

直方体状領域の次元数を $D\geq 2$ とする．各次元方向に割り当てる基底の個数を $N_1, N_2, \ldots, N_D$ を $\approx O(n)$ とするとき，直方体状領域内の全自由度は $O(n^D)$ で，行列乗算を古典的方法で行えば，右辺の計算も含めた計算量は n に関して $O(n^{D+1})$．Strassen 型の高速行列乗算法を用いれば，計算量の指数を多少下げられる．

n が数百程度以上と非常に大きくなってくると，（近似度などを無視した計算量のみの比較は空虚であるが，）$O(n^D \log n)$ 的な計算量を持つ方法に比べ $O(n^{D+1})$ は遅いので，領域分割法を用いて本方法を自由度の小さな部分領域内で pre-conditioner として小領域内の方程式を高速に解くのに利用し，全体方程式は反復法により解くのが良いと思われる．

7. 右辺の計算について

ガレルキン型離散化近似の右辺 $d_\nu \equiv \langle t_\nu(x), g(x)\rangle_I = \int_I w(x)t_\nu(x)g(x)dx$ の計算について記述する．

一次元の場合：

$d_\nu \approx \sum_q w_q t_\nu(x_q)g(x_q) = \sum_q T_{\nu,q}\, g_q$，ここで $\{x_q\}$,$\{w_q\}$ は I 上の重み関数 w に基づく数値積分の分点と重み係数で，$w_q \equiv w(x_q)$，$g_q \equiv g(x_q)$，$T_{\nu,q} \equiv w_q\, t_\nu(x_q)$ と置いた．

二次元の場合：

$t_\nu(x) = w^{(1)}(x^{(1)})w^{(2)}(x^{(2)})$,
$w(x)dx = w^{(1)}(x^{(1)})w^{(2)}(x^{(2)})dx^{(1)}dx^{(2)}$
であるから
$d_\nu = \int_{I^{(2)}} dx^{(2)}w^{(2)}(x^{(2)})t^{(2)}_{\nu_2}(x^{(2)}) \times \int_{I^{(1)}} dx^{(1)}w^{(1)}(x^{(1)})t^{(1)}_{\nu_1}(x^{(1)})g(x^{(1)}, x^{(2)})$
これより
$d_{(\nu_1,\nu_2)} \approx \sum_{q_2} T^{(2)}_{\nu_2,q_2}(\sum_{q_1} T^{(1)}_{\nu_1,q_1} g_{(q_1,q_2)})$
$= \sum_{q_2} T^{(2)}_{\nu_2,q_2} g'_{q_2,\nu_1}$．
つまり

$$g'_{q_2,\nu_1} \Leftarrow \sum_{q_1} T^{(1)}_{\nu_1,q_1} g_{(q_1,q_2)}\ ,$$
$$d_{\nu_1,\nu_2} \Leftarrow \sum_{q_2} T^{(2)}_{\nu_2,q_2} g'_{(q_2,\nu_1)}$$

と添字の縮約計算をする．

三次元の場合：

$d_{(\nu_1,\nu_2,\nu_3)}$
$\approx \sum_{q_3} T^{(3)}_{\nu_3,q_3} \sum_{q_2} T^{(2)}_{\nu_2,q_2} \sum_{q_1} T^{(1)}_{\nu_1,q_1} g_{(q_1,q_2,q_3)}$
$= \sum_{q_3} T^{(3)}_{\nu_3,q_3} \sum_{q_2} T^{(2)}_{\nu_2,q_2} g'_{(q_2,q_3,\nu_1)}$
$= \sum_{q_3} T^{(3)}_{\nu_3,q_3} g''_{q_3,\nu_1,\nu_2}$ ．
つまり，

$$g'_{q_2,q_3,\nu_1} \Leftarrow \sum_{q_1} T^{(1)}_{\nu_1,q_1} g_{(q_1,q_2,q_3)},$$
$$g''_{q_3,\nu_1,\nu_2} \Leftarrow \sum_{q_2} T^{(2)}_{\nu_2,q_2} g_{(q_2,q_3,\nu_1)},$$
$$d_{\nu_1,\nu_2,\nu_3} \Leftarrow \sum_{q_3} T^{(3)}_{\nu_3,q_3} g''_{(q_3,\nu_1,\nu_2)}$$

と添字の縮約計算をする．

微分方程式の右辺の関数 $g(x)$ から，離散化方程式の右辺のベクトル d を計算する際の計算量に関しては，添字の縮約を行列の古典的乗算法により行えば一次元の場合 N_1Q_1，二次元の場合 $N_1Q_1Q_2 + N_1N_2Q_2$，三次元の場合 $N_1Q_1Q_2Q_3 + N_1N_2Q_2Q_3 + N_1N_2N_3Q_3$ である．N_1, N_2, N_3 は各次元方向の基底関数の個数，Q_1, Q_2, Q_3 は各次元方向のテスト関数との数値積分の分点の個数で N_1, N_2, N_3 の数倍程度である．テスト関数として，区間を分割して区分的多項式を張る基底多項式を採り，基底関数の台が区分区間内または隣接する区分区間までに制限されるならば，変換行列 $T^{(1)}$, $T^{(2)}$, $T^{(3)}$ は，列の中に非零要素がほぼ，基底多項式の次数の数倍以下程度になる．その非零の数を L_1, L_2, L_3 程度とすれば上記は一次元の場合 N_1L_1，二次元の場合 $N_1Q_2L_1 + N_1N_2L_2$，三次元の場合 $N_1Q_2Q_3L_1 + N_1N_2Q_3L_2 + N_1N_2N_3L_3$ となるので区分多項式の次数の数倍程度に該当する L_1, L_2, L_3 が n について $O(1)$ とすれば，右辺を作る計算量は D

次元の場合 $O(n^D)$ になる．

8. 差分近似の場合

格子点上での微分方程式の解の離散近似を構成する場合に，領域が二次元の積領域で，演算子 P が線形で Separable な偏微分方程式 $P(x,\partial)f(x)=g(x)$ とする：$P(x,\partial)\equiv P^{(1)}(x^{(1)},\partial_{x^{(1)}})+P^{(2)}(x^{(2)},\partial_{x^{(2)}})$．各次元方向の線形演算子の各次元格子点上での差分離散化を $P^{(1)}\Rightarrow K^{(1)}$, $P^{(2)}\Rightarrow K^{(2)}$ とし，$E^{(1)},E^{(2)}$ を単位行列とし，全体の微分演算子 P の二次元格子点上での差分離散化を $P\Rightarrow A\equiv K^{(1)}\otimes E^{(2)}+E^{(1)}\otimes K^{(2)}$ とする．$K^{(1)}$ と $K^{(2)}$ に対する（一般的には非対称な）標準固有値問題 ${W^{(\bullet)}}^TK^{(\bullet)}U^{(\bullet)}=\Lambda^{(\bullet)}$, ${W^{(\bullet)}}^TU^{(\bullet)}=E^{(\bullet)}$ をそれぞれ考え，さらに $U\equiv U^{(1)}\otimes U^{(2)}$, $W\equiv W^{(1)}\otimes W^{(2)}$ とおくと，U と W による A の変換 $W^TAU=\Lambda^{(1)}\otimes E^{(2)}+E^{(1)}\otimes\Lambda^{(2)}=\Lambda$ により生じる行列 Λ は対角行列だから，全体の線形方程式が $Ac=d$ なら，解 c は $c=(U\Lambda^\dagger W^T)d=(U^{(1)}\otimes U^{(2)})\Lambda^\dagger({W^{(1)}}^T\otimes{W^{(2)}}^T)$ と，一般化フーリエ・モード法で求められる．三次元以上も同様である．

9. 計 測 例

実験ハードウエアとして最初に安価で普及型の PC を用いてみた例：CPU に Intel Celeron 1.7GHz（P4 Willamette Core, 2nd Cache 128KB）で，チップセットが i845G，主記憶メモリを PC2100 DDR-SDRAM 1GBytes（512MBx2），OS は RedHat7.2(IA32)，コンパイラを Intel Fortran Compiler 7.0 とし，行列積の計算用に Intel 社製品の Math Kernel Library 5.2 の中の Level 3 BLAS のルーチン「DGEMM」を適切に用いて倍精度 64-bit IEEE 浮動小数演算を用いた実験では，三次元問題の場合の計算主要部である添字の縮約 $Y_{i,j,k}\leftarrow\sum_k X_{k,i,j}S_{k,l}$ の計算で，必要な行列の全体が主記憶に収まる場合，テンソル積型基底のサイズが 30×30×30〜390×390×390 の範囲では約 0.9〜1.7GFlops の演算性能が実測された．

次に，64bit アドレスのワークステーションを用いた例：CPU に Intel Itanium 800MHz DUAL（3rd cache 2MB）で主記憶メモリは PC100 SDRAM 4way 4GBytes (512MBx8)，OS は RedHat7.2(IA64)，コンパイラは Intel Fortran Compiler 7.0 で，SMP 並列化には OpenMP を利用した．行列積の計算用に Intel 社製品の Math Kernel Library 5.2 の中の Level 3 BLAS のルーチン「DGEMM」を適切に用いて倍精度 64-bit IEEE 浮動小数演算を用いて，やはり三次元の場合の計算主要部である添字の縮約を扱った．主記憶に必要な行列の全体が収まる場合に，テンソル積型基底のサイズが 50×50×50〜600×600×600 の範囲では single CPU では約 1.2〜2.5GFlops, dual CPU では約 2.1〜4.8GFlops の演算性能が実測された．

注意：問題が大規模で極めて大次元の問題では行列積の計算時に混入する丸め誤差を無視できなくなるが，方程式の残差を求めて改良を行う連立一次方程式の解法で良く知られている反復改良法を用いればその影響を低減することができる．

10. 雑　　多

分離型の線形偏微分方程式の例には，Poisson 方程式，Helmholtz 方程式などのように応用上重要なものがある．係数行列の導出法が本文章中の説明とは異なる場合（例えば変分法）であっても，要するに多次元問題の離散化された線形方程式の係数行列 A が領域が三次元のとき $A\equiv K^{(1)}\otimes M^{(2)}\otimes M^{(3)}+M^{(1)}\otimes K^{(2)}\otimes M^{(3)}+M^{(1)}\otimes M^{(2)}\otimes K^{(3)}$ と書かれる，あるいはより一般的に $\alpha^{(\bullet,\bullet,\bullet)}$ を定数として：$A\equiv\alpha^{(1,1,1)}K^{(1)}\otimes K^{(2)}\otimes K^{(3)}+\alpha^{(1,1,0)}K^{(1)}\otimes K^{(2)}\otimes M^{(3)}+\alpha^{(1,0,1)}K^{(1)}\otimes M^{(2)}\otimes K^{(3)}+\alpha^{(1,0,0)}K^{(1)}\otimes M^{(2)}\otimes M^{(3)}+\alpha^{(0,1,1)}M^{(1)}\otimes K^{(2)}\otimes K^{(3)}+\alpha^{(0,1,0)}M^{(1)}\otimes K^{(2)}\otimes M^{(3)}+\alpha^{(0,0,1)}M^{(1)}\otimes M^{(2)}\otimes K^{(3)}+\alpha^{(0,0,0)}M^{(1)}\otimes M^{(2)}\otimes M^{(3)}$ なら適用可能．

多次元直方体状の領域内を各次元の区間の積で分割し，有限要素法あるいは差分法で離散化したと考えるときに，その各次元方向の要素分割は任意あるいは格子は不等間隔でも構わない．PDE の近似解は境界付近では密になる不等間隔な格子を採れば，精度的に有利とできることが考えられる．

本来は偏微分方程式の解法には，境界条件の与え方やその適切性を考察すべきだが本論では省略する．例えば，二階の楕円型線形偏微分方程式であれば，領域の周上で第一種，第二種，第三種などの境界条件を与えることができる．本方法では，直方体状の領域に限定されており，境界条件の与え方も各次元での境界条件の直積から導かれる型のものに限定される．境界条件に相当する制約条件が基底関数の与え方で処理され除かれる場合，例えば Dirichlet 境界条件（第 1 種境界条件）ならば，あらかじめ境界上で値が 0 を指定した零 Dirichlet 問題に還元して解くことができる．

解析対象の領域が区間の直積である本論文の内容よりもさらに一般化して，領域が低次元の多様体の直積集合であっても，領域全体での基底をそれぞれの多様体上の基底の積の形にとり，重み関数がそれぞれの重みの積で書かれることと，全体の微分作用素がそれぞ

れの多様体上での線形微分作用素の和でかかれている場合（Separable な場合）あるいは二種類の線形微分作用素の上記のような組合せで書かれているのであれば，全体の偏微分方程式の離散化により生じる線形方程式は，直方体状領域同様にモード分解で解くことが原理的に可能である．簡単な例は，三次元問題なら直方体領域上で偏微分演算子が $P = P^{(1)} + P^{(2,3)}$ のように部分的に分離される場合である．

本法は変数分離形の線形偏微分方程式の解析学的解法の類似物で，解法アルゴリズムの主要部分は，全体方程式の係数行列の代数的な構造だけに依存していて，離散化近似法による行列の導出の近似法には依らない．大次元行列の LU 分解によらず，全体の方程式を反復法に依らずに解ける．計算量の主要部はテンソル添字の縮約で，密行列の積として扱えるので，高い性能が出せて並列度も高く出来る．特に問題の直方体状領域の次元が高い場合ほど有利となる．

参 考 文 献

1) Anderson,E., Bai,Z., Bischof,C., Demmel,J., Dongarra,J., Croz,J.D., Greenbaum,A., Hammarling,S., McKenney,A., Ostrouchov,S. and Sorensen,D.: *LAPACK Users‘ Guide*, SIAM, Philadelphia, (1992).
2) Aho,A.V., Hopcroft,J.E. and Ullman,J.D.: *The Design and Analysis of Computer Algorithms*, Addison-Wesley, (1974).
3) Babuska,I., Szabo,B.A. and Katz,I.N.: *SIAM J. Num. Anal.*, Vol. 18, p512(1981).
4) Barret,R., Berry,M., Chan,T., Demmel,J., Donato,J., Dongarra,J., Eijkhout,V., Pozo,R., Romine,C. and Vorst,H.: *Templates for the Solution of Linear Systems*, SIAM, Philadelphia, (1993).
5) Briggs,W.L. and Turnbull,T.: Fast Poisson solvers for MIMD computers, *Parallel Comput.* (Netherlands), Vol. 6, No. 3, pp.265-274(1988).
6) Buzbee,B.L., Dorr,F.W., George,J.A. and Golub,G.H.: The Direct Solution of the Discrete Poisson Equation on Irregular Regions, *SIAM J. Numer. Anal.*, Vol. 8, No. 4, pp.722-736, (Dec,1971).
7) Buzbee,B.L., Golub,G.H. and Nielson,C.W.: On Direct Methods for Solving Poisson’s Equations, *SIAM J. Numer. Anal.*, Vol. 7, No.4, pp.627-656, (Dec,1970).
8) Chan,T.F., Glowinski,R., Periaux,J. and Widlund,O.B. Eds., *Domain Decomposition Methods*, SIAM, Philadelphia, (1989).
9) Chih,Y.J.K. and Auer,L.H.: An iterative solver with a convergence acceleration technique for the pressure field in an uneven spacing grid system, *Mon. Weather Rev.* (USA), Vol. 118, No. 7, pp.1551-1556(1990).
10) Crawford,C.R.: Reduction of a Band Symmetric Generalized Eigenvalue Problem, *Comm. ACM* Vol. 16, pp.41-44(1973).
11) Decker,N. and Vanrosendale,J.: N89-24113/7/XAB Operator Induced Multigrid Algorithms Using Semirefinement, Final Report, *Institute for Computer Applications in Science and Engineering*, Hampton, VA. *NASA, Washington, DC., (April,1989).
12) Golub,G.H. and Van Loan,C.F., *Matrix Computations*, 2nd Ed., Johns Hopkins Univ. Press, Baltimore and London, (1989).
13) Gupta,M.M.: A Fourth-Order Poisson Solver, *J. Comput. Phys.*, Vol. 55, pp.166-172(1984).
14) Murakami,H.: A Fast Direct Solver for Separable Linear PDEs on a Rectilinear Region Discretized by p-version FEM, *IBM Kingston SEC Department Research Report*, (1991).
15) Murakami,H.: A Fast Direct Solver for Separable Linear PDEs on a Rectilinear Region Discretized by p-version FEM, 東京都立短期大学 経営情報学科 研究論叢 (ISSN 1343-3202), No. 3, pp.37-62(1999 年 3 月).
16) Murakami,H., Sonnad,V. and Clementi,E.: A Three-dimensional Finite Element Approach Towards Molecular SCF Computations, *Int. J. Quantum. Chem.*, Vol. 42, pp.785-817(1992).
17) Schumann,U.: Comments on A Fast Computer Method for Matrix Transposing and Application to the Solution of Poisson’s Equation, *IEEE Trans. Computers*, Vol. 3, pp.542-543(1973).
18) Swarztrauber,P.N. and Sweet,R.A.: Vector and parallel methods for the direct solution of Poisson’s equation, *J. Comput. Appl. Math.* (Netherlands), Vol. 27, No. 1-2, pp.241-263(1989).
19) Sköllermo,G.: A Fourier Method for the Numerical Solution of Poisson’s Equation, *Math. Comp.*, Vol. 29, pp.697-711(1975).
20) Szabo,B.A. and Babuska,I.: *Finite Element Analysis*, Wiley, New York, (1991).
21) Vajteršic,M.: *ALGORITHMS FOR ELLIPTIC PROBLEMS*, Kluwer Academic Publishers, London, (1992).
22) Weiwei,S. and Zamani,N.G.: A fast algorithm for solving the tensor product collocation equations, *J. Franklin Inst.* (UK), Vol. 326, pp.295-307(1989).
23) Wilkinson,J.H.: *The Algebraic Eigenvalue Problem*, Oxford University Press, (1965).