

解説

前処理つき共役勾配法・共役残差法†



村田 健郎††

1. はじめに

現在、産業界では移流拡散方程式と呼ばれる偏微分方程式を解くことに強い関心が向けられている。移流拡散方程式は、流体工学、半導体工学、化学工学、生理学、生態学の諸分野においてあらわれる。

要するにそれら移流拡散方程式を連立一次方程式の形に離散化して解くのであるが、古典的なガウスの消去法システムの算法によったのでは高々 $20 \times 20 \times 20$ 程度の三次元問題で行き止まるのが現状である。メモリネックとなるのである。そこで現在、

前処理つき双共役勾配法 (PBCG 法)*

前処理つき共役残差法 (PCR 法)**

あるいはそれ類似の方法が注目されている。本解説では特に前処理用の行列として、不完全 LU 分解結果を使う方法について解説する。不完全 LU 分解できるかできないかは、もとの問題の物理的状況に依存するところが大きであるから、その所の解説にも応分の紙数をさいた。

2. 問題の背景

2.1 保存則の積分形式、微分形式

移流拡散方程式は歴史的には古典物理の保存則からみちびかれた：注目する物理量 u /単位容積が、質量であれ運動量であれなんであれ、保存則は要するに次の形の積分形式で書かれる：体積要素を dx 、面積要素を ds として、

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\int_{\Omega} u dx \right] = - \int_{\Gamma} \phi \cdot n dx + \int_{\Omega} f dx \quad (1)$$

ここに ϕ は u に関する流量ベクトルで、その単位は ()/単位面積・単位時間、 n は外向き単位法線ベクトル、したがって $\phi \cdot n ds$ は、 ds を通っての単位時間

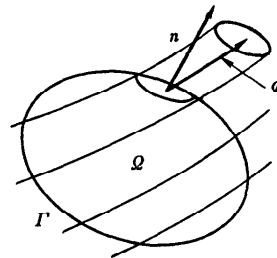


図-1

当りの流出量である (図-1)。 f はソース項と呼ばれる。

ガウスの発散公式：

$$\int_{\Gamma} \phi \cdot n ds = \int_{\Omega} \text{div } \phi dx$$

を(1)式に適用して、すべてを体積積分の形にしたのち、積分記号の中を0とおいたのが保存則の微分形式である：

$$\partial u / \partial t + \text{div } \phi = f \quad (2)$$

ところで束 ϕ は、多くの場合、拡散束 $-k \nabla u$ と、移流束 bu とから成る：

$$\phi = -k \nabla u + bu \quad (3)$$

とされ、結局(2)式が移流拡散方程式と呼ばれる、

$$\partial u / \partial t + \text{div} (-k \nabla u + bu) = f \quad (4)$$

の形となる。

ここで移流拡散方程式の例をあげておく。

流れ場 v に添加された不純物の密度を u とするときの u の質量保存則は

$$\partial u / \partial t + \text{div} (-k \nabla u + vu) = f \quad (5)$$

である。移流ベクトル b が流速ベクトル v になっている。半導体内の不純物イオン u の質量保存則は、

$$\partial u / \partial t + \text{div} (-k \nabla u \pm \mu E u) = f \quad (6)$$

である。移流ベクトルが電場 E に‘比例’する $\pm \mu E$ となっている。 E は電位 Ψ を使って $E = -\nabla \Psi$ となり、ポアソン方程式

$$\text{div} (-\nabla \Psi) = \sigma / \epsilon \quad (\sigma \text{ は電荷密度, } \epsilon \text{ は誘電率})$$

(7)

† Preconditioned Conjugate Gradient, Conjugate Residual Methods by Kenro Murata (University of Library and Information Science).

†† 図書館情報大学

* Preconditioned Biconjugate Gradient 法

** Preconditioned Conjugate Residual 法

に従うとして(6),(7)式を連立させて解くことが半導体プロセス CAD の分野で行われている。半導体の中の伝導電子や正孔の保存則も(6)式の形をしていて、半導体デバイス CAD の基礎式となっている。

ちぢまぬ流体のナビエ・ストークス方程式

$$\partial v_i / \partial t + \text{div}(\nu \nabla v_i + v_i v) = -\rho^{-1} \partial p / \partial x_i \quad (8)$$

その他実質微分 Du/Dt を使って書かれた式

$$\sigma Du/Dt = -\text{div}(-k \nabla u) + f$$

も移流拡散方程式

$$\partial(\sigma u) / \partial t + \text{div}(-k \nabla u + \sigma u v) = f \quad (9)$$

の形に書けるからわれわれの当面の対象となる。

2.2 差分法, 有限要素法による離散化

後の章で解説する不完全 LU 分解が安定に行われるかどうかの十分条件として, 離散化された連立一次方程式の係数行列が M 行列となるかどうかが一応の関心事となる。行列 A が M 行列であるとは,

$$a_{i,i} > 0, a_{i,j} \leq 0, A^{-1} \geq 0 \quad (10)$$

なることをいう。ここでは, もとの問題がどのような問題のとき M 行列になりやすいかなり難いかについて, 初歩的に調べておく。ごく粗筋を述べるに止める。

(問題) 長方形の場合 Ω における線形定常問題:

$$\text{div}(-k \nabla u + \mathbf{b}(x, y)u) = -c(x, y)u + f(x, y) \quad (11)$$

$$u|_{\Gamma_1} = 0, \nabla u \cdot \mathbf{n}|_{\Gamma_2} = 0, (-k \nabla u + \mathbf{b}u) \cdot \mathbf{n}|_{\Gamma_3} = \beta$$

を基礎式: (保存則の積分形式(1)の $\partial u / \partial t$ なしの式)

$$\int_{\Gamma} (-k \nabla u + \mathbf{b}(s)u) \cdot \mathbf{n} ds = \int_{\Omega} (-cu + f) dx dy \quad (12)$$

による差分法によって離散化せよ (図-2)。

(解) いわゆる中心差分による場合, 内点 i に関しては, i 点を囲む領域 PQRS に対して(11)式の近似式を作る。ここでは簡単のため $\mathbf{b}(x, y) = (b(x, y), 0)^T$ とし, あみ目の寸法は縦, 横ともに h としよう。また, $buh/2k, bwh/2k$ をそれぞれ ru, rw と略記する。

$$(-1-rw)u_{i-m} - u_{i-1} + (4+ru-rw+ch^2/k)u_i$$

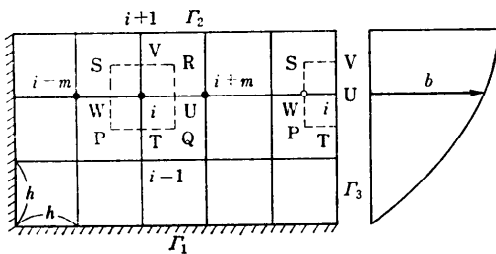


図-2

$$-u_{i+1} + (-1+ru)u_{i+m} = f_i h^2/k \quad (13)$$

境界 Γ_2 上の i 点の方程式は,

$$(-1-rw/2)u_{i-m} - u_{i-1} + (2+(ru-rw)/2 + ch^2/2k)u_i + (-1/2+ru/2)u_{i+m} = f_i h^2/2k \quad (14)$$

境界 Γ_3 上の i 点の方程式がいちばん問題である:

$$(-1-rw)u_{i-m} - (1/2)u_{i-1} + (2-rw+ch^2/2k)u_i - (1/2)u_{i+1} = (f_i h^2 - 2\beta_i h)/2k \quad (15)$$

係数行列 $A = (a_{ij})$ が M 行列であるための十分条件の検定に関し, 次の定理 1, 2 が役に立つ¹⁾

定理 1 $a_{ii} > 0, a_{ij} \leq 0$ とする。 $B = I - D^{-1}A$ (D は A の対角部をとった対角行列) とするとき

$$A^{-1} \geq 0 \Leftrightarrow \rho(B) < 1^* \quad (16)$$

定理 2: B が既約, $B \geq 0$,

$$\min_i \sum_j b_{ij} < \max_j \sum_i b_{ij} \text{ のとき,}$$

$$\min_i \sum_j b_{ij} < \rho(B) < \max_j \sum_i b_{ij}^* \quad (17)$$

さて A が M 行列であるためには $ru \leq 1, rw \leq 1$ が必要である。定理 2 により $\beta = \max_j \sum_i b_{ij} \leq 1$ なら M 行列になるが, いま $b_{ii} = 0, b_{ij} = -a_{ij}/a_{ii}$ に留意して, 内点の方程式(13)の場合の

$$-\sum_{j \neq i} a_{ij} = 4 - (ru - rw), \quad a_{ii} = 4 + (ru - rw) + ch^2/k \quad (18)$$

からは, $\beta \leq 1$ の条件として,

$$0 \leq 2(ru - rw) + ch^2/k \quad (19)$$

を得る。 Γ_2 境界上の点 i についても同じである。

Γ_3 境界上の点 i に対する(15)式については,

$$0 \leq -2rw + ch^2/2k \quad (20)$$

が条件となる。

さて(19)式において, $b_u = b_w$ のときは話が簡単である。一般に移流ベクトル \mathbf{b} が $\text{div} \mathbf{b} = 0$ を満たすとき然りである。

有限要素法による場合, $b_u = b_w = b$ のとき,

$$\begin{aligned} & (-bh/6k)u_{i-m-1} + (-1-bh/3k)u_{i-m} \\ & + (-1+bh/6k)u_{i-1} + 4u_i \\ & + (-1-bh/6k)u_{i+1} + (bh/6k)u_{i+m+1} \\ & + (-1+bh/3k)u_{i+m} = f_i h^2/k \end{aligned} \quad (21)$$

となる。~~~~の項があらわれるため M 行列にならないが, M 行列でないからといって不完全 LU 分解できない, というわけではない。

非定常問題 $\partial u / \partial t + \text{div}(-k \nabla u + \mathbf{b}u) = f$ ならば, 先程 u_i とおいたものを $u_i(t)$ と書いて, 基礎式(1)を

* $\rho(B)$ は B のスペクトル半径, 証明は Varga¹⁾ にある。

そのまま使う差分法によって離散化できる。結果を、 $bu = bw(\text{div } v = 0)$ のときの内点の方程式だけ示す：

$$\begin{aligned} \gamma &= bh/2k \text{ (セルペクレ数の } 1/2 \text{) とおいて,} \\ (h^2/k)u'_i(t) &+ (-1-\gamma)u_{i-m}(t) - u_{i-1}(t) \\ &+ 4u_i(t) - u_{i-1}(t) + (-1+\gamma)u_{i+m}(t) \\ &= f_i h^2/k \end{aligned} \quad (22)$$

この(連立の)常微分方程式をベクトル形式で

$$C\dot{\mathbf{u}}(t) + A\mathbf{u}(t) = \mathbf{f} \quad (22')$$

と書く。先程の定常問題に対するものは、

$$A\mathbf{u} = \mathbf{f} \quad (23)$$

となる。さて常微分方程式(22')を t についての差分によって時刻 $\tau\nu$ における $\mathbf{u}(t)$ の近似値 $\mathbf{u}^{(\nu)}$ についての方程式に直す。もっとも普通に使われる台形法の場合

$$C(\mathbf{u}^{(\nu)} - \mathbf{u}^{(\nu-1)})/\tau + (A\mathbf{u}^{(\nu)} + A\mathbf{u}^{(\nu-1)})/2 = \mathbf{f}^{(\nu-1/2)},$$

これは $\mathbf{u}^{(\nu)}$ についての次の一次方程式である：

$$\left(C + \frac{\tau}{2}A\right)\mathbf{u}^{(\nu)} = \left(C - \frac{\tau}{2}A\right)\mathbf{u}^{(\nu-1)} + \tau\mathbf{f}^{(\nu-1/2)} \quad (24)$$

係数行列 A を M 行列とするためには、やはり

$$|bh/2k| \leq 1 \quad (25)$$

は必要である。 C が対角行列だから $\tilde{A} = C^{-1}A/2$ とし、

$$(I + \tau\tilde{A})\mathbf{u}^{(\nu)} = (I - \tau\tilde{A})\mathbf{u}^{(\nu-1)} + \tau\mathbf{f}^{(\nu-1/2)} \quad (26)$$

の形の方程式を解くことになる。 τ を小さくとれば、 $I + \tau\tilde{A}$ の固有値は右複素半平面上の点 $(1, 0)$ の近傍に密集してくる。このことは双共役勾配法や共役残差法にとって好都合のことであって、(26)式の1ステップを解くことは、定常問題に対する(23)式を解くことよりもはるかに容易である。

非線形の非定常問題：

$$\partial u/\partial t + \text{div}(-k(u)\nabla u + \mathbf{b}(u)) = f(u) \quad (27)$$

に対して台形法タイプの計算を行うときは、 $\mathbf{u}^{(\nu-1)}$ から $\mathbf{u}^{(\nu)}$ に進むのに次の二段階をふむ：

$$\begin{aligned} (I + \tau\tilde{A}^{(\nu-1)})\mathbf{u}^* &= (I - \tau\tilde{A}\mathbf{u}^{(\nu-1)})\mathbf{u}^{(\nu-1)} \\ &+ (3\mathbf{f}^{(\nu-1)} - \mathbf{f}^{(\nu-2)})/2 \end{aligned} \quad (28)$$

$$\begin{aligned} (I + \tau\tilde{A}^{(*)})\mathbf{u}^{(\nu)} &= (I - \tau\tilde{A}^{(\nu-1)})\mathbf{u}^{(\nu-1)} \\ &+ \mathbf{f}^{(*)} + \mathbf{f}^{(\nu-1)}/2 \end{aligned} \quad (29)$$

非線形の定常問題に対しては反復式

$$A^{(\nu-1)}\mathbf{u}^{(\nu)} = \mathbf{f}^{(\nu-1)} \quad (30)$$

が使われる。

2.3 (双)共役勾配法/共役残差法の必要性

実用上の問題はほとんどいつも非線形、そして三次元(さらには未知関数 u, v, w, \dots についての連立の)

問題である。したがって方程式(28), (29), (30)の形のもを多数の ν について解かねばならない。ここで各 ν ひとつについてみれば、帯行列を係数とする連立一次方程式である。これを解くのに、周知のガウス消去法系統の方法によったのでは、 $20 \times 20 \times 20$ 程度あるいは帯に近い疎行列の粗いあみ目においてすでに51.2メガバイトの記憶容量を要する。ここに、帯半幅 $m=400$, 元数 $n=8000$, 所要メモリ容量 $2mn$ 語、部分軸選択なしとした。

メモリさえ十分にあれば、正味の計算時間はたとえば HITAC-M280H で帯ガウス1回当たり2分程度、スーパーコンピュータ S810 では20秒前後のことゆえ、かなりの反復はやれるはずである。ところが問題はメモリの方である。主メモリとディスクの転送をやりながらの計算では、転送による待ち時間が帯ガウス1回当たり約15分、実際の待ち時間はその2~10倍は覚悟せねばならない。これでは、 $20 \times 20 \times 20$ の場で非線形定常問題(反復10回程度)あたりがその日のうちに答の得られる限度となり、時間依存(非定常)の問題となると線形問題でも不可能である。

このようなわけで、正統的なガウス消去法ではなく、所要メモリ容量の少ない反復法系統の計算法がぜひとも必要となるのである。反復法の中ではSOR, SLOR, ADIなどがポピュラーである。またStone法といわれる方法もある。しかしこれらの諸方法は、いづれも汎用性の点で問題がある。問題によってうまく速く収束したりしなかったりするるのである。そこで、

前処理つき共役勾配法 (PCG 法)

前処理つき双共役勾配法 (PBCG 法)

前処理つき共役残差法 (PCR 法)

などの登場ということになるわけである。

SOR, SLOR, ADI は周知として、Stone法(別名 Strongly Implicit 法、略して SIM)についてはひとことふれておかねばならない。この方法は後述のICCG法、ILUBCG法にとってCG法(共役勾配法)を父とするならば母に相当すると見なされる：

方程式 $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ を解くために、 A を不完全LU分解(後述)して、それを L, U とし、

$$A = LU - R. \quad (31)$$

とおき、反復式

$$(LU)\mathbf{x}^{(\nu)} = R\mathbf{x}^{(\nu-1)} + \mathbf{b} \quad (31')$$

を解く。これがStone法の原点である。Stone法は発表の1968年以来、従来のSOR, SLOR, ADI法よりも強力な方法として一部で愛用されていた。後述の

ICCG 法や ILUBCG 法は、この反復式(31')を CG 法によって加速したものと見なすことができる。また見方を変えて CG 法あるいは BCG 法を基本に据えて、それらを適用する前に、方程式に前処理をほどこしたものの:

$$(LU)^{-1}Ax = (LU)^{-1}b \quad (32)$$

に CG 法あるいは BCG 法を適用したものと見なすこともできる。ILUCR 法についても同様に二様の見方ができる。以下、後者の見方による解説を行う。

3. 共役勾配法, 前処理つき共役勾配法

初めに共役勾配法 (Conjugate Gradient 法, 略して CG 法) の算法を示す。

CG 法: $Ax = b$, A は対称正定値, を解くのに初期 x_0 を用意; $r_0 = b - Ax_0$; $p_0 = r_0$; $\nu = 0$

While $\|r_\nu\| > \text{eps} * \|b\| do$

$$\begin{aligned} \alpha &= (p_\nu, r_\nu) / (p_\nu, Ap_\nu) \\ x_{\nu+1} &= x_\nu + \alpha p_\nu; r_{\nu+1} = r_\nu - \alpha Ap_\nu \\ \beta &= -(r_{\nu+1}, Ap_\nu) / (p_\nu, Ap_\nu) \\ p_{\nu+1} &= r_{\nu+1} + \beta p_\nu \end{aligned}$$

CG 法については周知としたいが念のため上記算法の気持ち分かる程度の解説をしておこう。

CG 法の原理: $Ax = b$ の解 x は次の式:

$$f(x) = (x, Ax) - 2(b, x) \quad (33)$$

を最小にする。

$$(\because f(x+h) = f(x) - 2(h, b - Ax) + (h, Ah))$$

そこで $x_{\nu+1} = x_\nu + \alpha p_\nu$ とおいて

$$f(x_\nu + \alpha p_\nu) = f(x_\nu) - 2\alpha(p_\nu, r_\nu) + \alpha^2(p_\nu, Ap_\nu)$$

が最小になるよう α を決める: $\alpha = (p_\nu, r_\nu) / (p_\nu, Ap_\nu)$

次に進むべき方向ベクトル $p_{\nu+1} = r_{\nu+1} + \beta p_\nu$ は, Ap_ν と直交: $(r_{\nu+1} + \beta p_\nu, Ap_\nu) = 0$ となるよう β をえらんで作る: $\beta = -(r_{\nu+1}, Ap_\nu) / (p_\nu, Ap_\nu)$.

理由は, $x_{\nu+1}$ から答 $A^{-1}b$ を望むベクトル $A^{-1}b - x_{\nu+1}$ が Ap_ν と直交という性質:

$$\begin{aligned} (Ap_\nu, A^{-1}b - x_{\nu+1}) &= (p_\nu, r_{\nu+1}) \\ &= (p_\nu, r_\nu - \alpha Ap_\nu) = 0 \end{aligned}$$

にあやからうという気持ちからのことである。

以上の算法から r_0, r_1, \dots は互いに直交, p_0, p_1, \dots は互いに A 直交: $(p_i, Ap_j) = 0 (i \neq j)$ となることが導かれる。また、前処理つき CG 法の基になる次の性質が導かれる:

A に重複または密集固有値があると収束が速い。

説明: A の固有値, 固有ベクトルを λ_i, v_i とし

$$r_0 = \sum_{i=1}^n c_i v_i$$

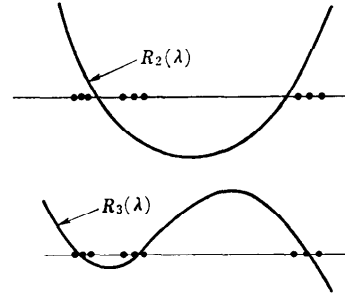


図-3

と書く. $r_\nu = b - Ax_\nu = r_{\nu-1} - \alpha_{\nu-1} Ap_{\nu-1}$ は, r_0 に A についての ν 次の多項式 $R_\nu(A)$ を掛けた形をしていることが、上記算法をたどって見るとわかる。この多項式は残差 r に関する二次式

$$\begin{aligned} (r, A^{-1}r) &= (b - Ax, A^{-1}b - x) \\ &= (x, Ax) - 2(b, x) + (b, A^{-1}b) \end{aligned}$$

を最小にすべく毎回次数を上げていくわけである。実際 $f(x) = (x, Ax) - 2(b, x)$ と上の式は常数項の差があるだけだから、それは当然である。ところで、

$$r_\nu = \sum_{i=1}^n C_i R_\nu(\lambda_i) v_i$$

ゆえ、たとえば図-3 のように A の固有値が三群の密集固有値から成る場合を考えると、 $\nu=3$ で $R_3(\lambda)$ はよい線に収まるであろう。

前処理つき共役勾配法 (Preconditioned CG 法, 略して PCG 法) はこの性質を利用したものである。いま A に近い行列 M をコレスキ分解: $M = U^T U$ して、方程式 $Ax = b$ を, $\tilde{x} = Ux$ に関する方程式:

$$U^{-T} A U^{-1} \tilde{x} = U^{-T} b \quad (34)$$

に変換して考えると、行列 $\tilde{A} = U^{-T} A U^{-1}$ の固有値は 1 の近くに密集してくるであろう。したがって方程式 (34) に CG 法を適用すれば収束は速いであろう。

こう考えて算法を書き上げたのち実質的に同じことを ~ のつかない世界の算法にもどすと次の PCG 法の算法になる: $K = (U^T U)^{-1}$ と書いて、

初期 x_0 を用意; $r_0 = b - Ax_0$; $p_0 = Kr_0$; $\nu = 0$

While $\|r_\nu\| > \text{eps} * \|b\| do$

$$\begin{aligned} \alpha &= (p_\nu, r_\nu) / (p_\nu, Ap_\nu) \\ x_{\nu+1} &= x_\nu + \alpha p_\nu; r_{\nu+1} = r_\nu - \alpha Ap_\nu \\ \beta &= -(Kr_{\nu+1}, Ap_\nu) / (p_\nu, Ap_\nu) \\ p_{\nu+1} &= Kr_{\nu+1} + \beta p_\nu \end{aligned}$$

ところで、現在普通に使われている CG 法の算法は、計算量を節約した次のものである:

$$r = b - Ax_0; p = r; \sigma = (r, r); \nu = 0$$

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

$\alpha = \sigma / (p, Ap)$
 $x_{r+1} = x_r + \alpha p; r = r - \alpha Ap$
 $\sigma_1 = (r, r); \beta = \sigma_1 / \sigma; \sigma = \sigma_1$
 $p = r + \beta p; \nu = \nu + 1$

これに伴ない、PCG法の算法は次のようになる：

$r = b - Ax_0; p = Kr; \sigma = (r, p)$

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

$\alpha = \sigma / (p, Ap)$
 $x_{r+1} = x_r + \alpha p; r = r - \alpha Ap$
 $\beta = \sigma_1 / \sigma; \sigma = \sigma_1$
 $p = Kr + \beta p; \nu = \nu + 1$

さて、 $M = U^T U$ 、 $K = M^{-1}$ のMとしてなにをえらぶかであるが、Meijerinkら²⁾のICCG法(Incomplete Cholesky CG法)が有名である。また、それを改良したGustafsson³⁾のMICCG法(Modified ICCG)が非常に強力である。次章でそれらについて述べる。

4. ICCG法とMICCG法

コレスキー $U^T D U$ 分解の算法の基は、行列積の公式による次式である：

$$a_{ij} = u_{ij} d_{ij} u_{ij} + \sum_{k=1}^{i-1} u_{ik} d_{kk} u_{kj} \quad (35)$$

通常は $u_{ii} = 1$ としたものが使われるが、Meijerinkは $d_{ii} = u_{ii}^{-1}$ 、すなわち $u_{ii}^2 d_{ii} = u_{ii}$ となるように決めた。そして

$$G \supseteq \{(i, j); a_{ij} \neq 0\}$$

なるごとき格子集合 G を指定して $(i, j) \in G$ のときだけ u_{ij} を作る次の算法を採用した。それをICCG法という。

do $i = 1, n$

$$u = a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} u_{ki}^2 d_{kk}; d_{ii} = u^{-1}$$

do $j = i+1, n$

if $(i, j) \in G$ then

$$u_{ij} = \sum_{k=1}^{i-1} u_{ki} d_{kk} u_{kj}$$

行列 A が対称正定値 M 行列のとき $u > 0$ が保証され不完全コレスキ分解ができることが知られている²⁾。

以下、 $G = \{(i, j); a_{ij} \neq 0\}$ にとったときの、三次元7点差分用の不完全 $U^T D U$ 分解を示そう。 A の右上半部の第 i 行を対角項から順に a_i, b_i, c_i, e_i と書いて、

$$d_i^{-1} = a_i - b_{i-1}^2 d_{i-1} - c_{i-1}^2 d_{i-1} - e_{i-1}^2 d_{i-1}$$

でよい。これがICCG(0)である(図-4参照)。

Gustafssonの改良：上記 U^T, D, U を使って、 $U^T D U$ を計算し直してみると、もとの A にはならないで、図-4○印の位置に非ゼロがわき出す。すなわち、

$$\begin{aligned} &x_{i-nm+1}, x_{i-nm+n}, x_{i-n+1}, x_{i+n-1}, \\ &x_{i+nm-n}, x_{i+nm-1} \end{aligned} \quad (36)$$

の係数に非ゼロがわき出す。そこでそれらの係数の符号を変えたものを x_i の係数に附加させるよう、上記 d_i^{-1} の右辺に加えれば、(36)の値は実は x_i に近い値のはずだから)不完全性がいくらか改善されるであろう。ところがただ附加しただけでは $d_i^{-1} \leq 0$ となって不完全コレスキ分解できなくなる恐れがあるから a_i の係数に小さい正数 ϵ を附加して、

$$d_i^{-1} = (1 + \epsilon)a_i - b_{i-1}^2 d_{i-1} - c_{i-1}^2 d_{i-1}$$

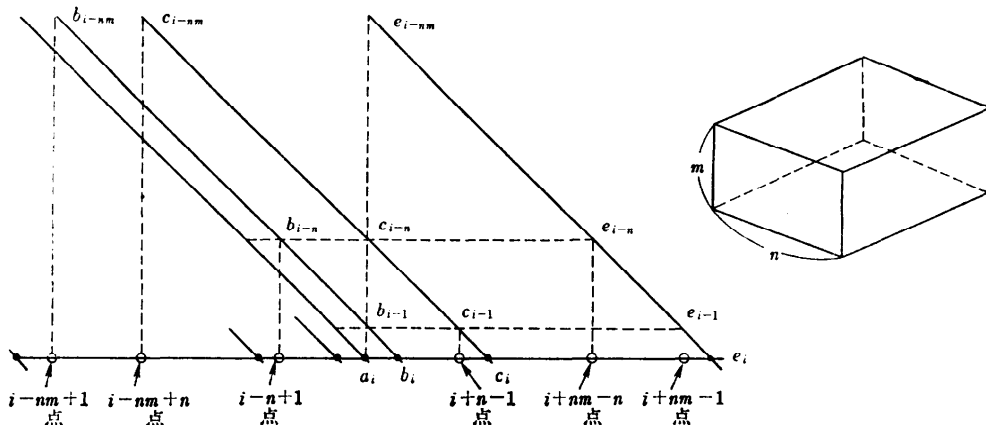


図-4

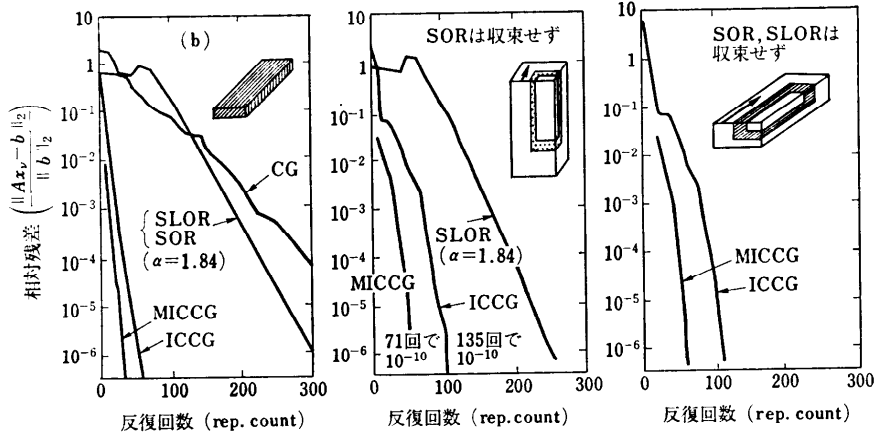


図-5

$$\begin{aligned}
 & -e_{i-nm}^2 d_{i-nm} - b_{i-nm} e_{i-nm} d_{i-nm} \\
 & -c_{i-nm} e_{i-nm} d_{i-nm} - c_{i-n} b_{i-n} d_{i-n} \\
 & -c_{i-1} b_{i-1} d_{i-1} - c_{i-n} e_{i-n} d_{i-n} \\
 & -b_{i-1} e_{i-1} d_{i-1}
 \end{aligned}$$

とする。これが MICCG(0) である。

ICCG(0)/MICCG(0) の試行例：ただし従来の SOR, SLOR による結果も併記しておく。問題は

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

$$u|_{\text{背面}} = 0, \nabla u \cdot n|_{\text{前面}} = 0$$

あみ目は $40 \times 40 \times 40$, HITAC-M280H (15 Mips 機)にて ICCG, MICCG とともに反復 100 回当たり約 110 秒, HITAC-S810/20 にて約 1.5 秒である (図-5)。

MICCG 法の $\epsilon = \theta h^2$, $0.1 \leq \theta \leq 1.0$ の範囲での θ 依存性は鈍い。 $\theta = 0.2$ に固定でよいと考えている。

移流項の無い, 純拡散の問題に対しては, 他の方法は考えないで専ら MICCG(0) でよいと考えている。

もっといい不完全 $U^T D U$ が提案されているが, 二次元問題についてはともかくとして, 三次元問題においてはメモリネックのため当面使う気になれない。

5. 双共役勾配法と共役残差法

純拡散の問題と比べて本命の移流拡散問題の困難はケタ違いである。理由は場の物理的状況を写すためにも, 数値計算の安定性の要請からも, あみ目の精しさが強く要求されるところにある。物理的に自然な中心差分によるとき, M 行列を得るためには少なくとも hb/k (セルペクレ数) を 2 以下にせねばならない。

さて非対称行列 A に対する方程式 $Ax = b$ に対して CG 法とよく似た方法がいくつか知られているな

かで有望と思われるものに

BCG 法 (Biconjugate Gradient 法)⁴⁾

CR 法 (Conjugate Residual 法)⁵⁾

がある。ただしやはり不完全 LU 分解使用の前処理を施して使う。それらを次のように略記する：

ILUBCG/MILUBCG, ILUCR/MILUCR.

M は Gustafsson 流の Modification を行う意である。BCG系のものの方が汎用性が高いが, ときに CR 系のものの方がスピードが速いので両者とも棄て難い。

$$\text{BCG: } r_0 = r_0^* = b - Ax_0; p_0 = p_0^* = r_0; i = 0$$

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

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

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

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

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

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

$$i = i + 1$$

$$\text{CR: } r_0 = b - Ax_0; p_0 = r_0; i = 0$$

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

$$\alpha = (r_i, A p_i) / (A p_i, A p_i)$$

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

$$\beta = -(A r_{i+1}, A p_i) / (A p_i, A p_i)$$

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

CR 法を上記算法の通りに行うと, ループの中で $A p_i$ の計算と $A r_{i+1}$ の計算の二か所で A を掛ける計算を行うことになって, これではループ内の計算量が BCG とほとんど同じになって反復回数が CR の方が多く必要なだけ文句なく CR の方が劣る。そこで

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

という関係を使い、ベクトル $q_i = AP_i$ を起用して次のように書き直す：

CR(1) : $r = b - Ax_0; p = r; q = Ar; i = 0$

while $\|r\| > \epsilon * \|b\| do$

$$\begin{aligned} \mu &= (q, q); \alpha = (r, q) / \mu \\ x_{i+1} &= x_i + \alpha p; r = r - \alpha q \\ a &= Ar; \beta = -(a, q) / \mu \\ p &= r + \beta p; q = a + \beta q; i = i + 1 \end{aligned}$$

この CR(1) と BCG に基づいて A として $(LU)^{-1}A$ を使用のときの 1 ループ当りの計算時間比は、M280H において約 1 : 1.7 (0.35 秒対 0.6 秒) である。

BCG 法は、非対称ランチョス法を CG-like に書き直したものである。BCG 法についての解説はここでは割愛して CR 法についてその算法の由来を気持が分かる程度に解説しておこう。

α の決め方：残差 $r_{i+1} = r_i - \alpha AP_i$ に関し、

$$\begin{aligned} (r_{i+1}, r_{i+1}) \\ = (r_i, r_i) - 2\alpha(r_i, AP_i) + \alpha^2(AP_i, AP_i) \end{aligned}$$

が最小になるよう、 $\alpha = (r_i, AP_i) / (AP_i, AP_i)$ 。

β の決め方： r_{i+1} と AP_i との直交性：

$$(r_{i+1}, AP_i) = (r_i - \alpha AP_i, AP_i) = 0$$

に注目して、これは $A^{-1}b - x_{i+1} = A^{-1}r_{i+1}$ と p_i との、 $A^T A$ 直交性だから、 p_{i+1} が p_i と $A^T A$ 直交するよう β を決める：すなわち $(AP_{i+1}, AP_i) = 0$ 、すなわち

$$(Ar_{i+1} + \beta AP_i, AP_i) = 0$$

となるよう、 $\beta = -(Ar_{i+1}, AP_i) / (AP_i, AP_i)$ 。

以上解説の途中で CR 法の性質：

$$(AP_{i+1}, AP_i) = 0, (r_{i+1}, AP_i) = 0$$

が示された。また上式から次の式も導かれる：

$$(r_i, AP_i) = (r_{i-1}, AP_i), (r_i, AP_i) = (r_i, Ar_i)$$

また次の事実がある：

「CR 法は、A の対称部 $M = (A + A^T) / 2$ が正定値ならば収束する。」

∵ $A = M + R$ とおくと、 $(r, Rr) = 0$ は周知。したがって $(r_i, AP_i) = (r_i, Ar_i) = (r_i, Mr_i)$ を得、 $r_i \neq 0$ なら $p_i \neq 0$ を得、 $r_i \neq 0$ のとき、

$$\begin{aligned} (r_{i+1}, r_{i+1}) &= (r_i - \alpha AP_i, r_i - \alpha AP_i) \\ &= (r_i, r_i) - 2\alpha(r_i, AP_i) + \alpha^2(AP_i, AP_i) \\ &= (r_i, r_i) - (r_i, AP_i)^2 / (AP_i, AP_i) \\ &< (r_i, r_i) (1 - \delta), \quad (\delta \text{ はある正数}) \quad \text{(終)} \end{aligned}$$

A を前処理によって単位行列に近くし向ければ収束が速いことが上式からうかがわれる。したがって CG 法と同様、不完全 LU 分解を使って $(LU)^{-1}Ax = (LU)^{-1}b$ に CR 法を適用するのである。

Meijerink 流の不完全ガウス： $A = LDU - R$

最も簡単なのは A の第 i 行を左から順に a_i, b_i, c_i, d_i (対角), e_i, f_i, g_i として

$$\begin{aligned} \tilde{d}_i^{-1} &= d_i - a_i g_{i-m} \tilde{d}_{i-m} - b_i f_{i-m} \tilde{d}_{i-m} \\ &\quad - c_i e_{i-1} \tilde{d}_{i-1} \end{aligned}$$

これに Gustafsson 流の変更をほどこすと、

$$\begin{aligned} \tilde{d}_i^{-1} &= (1 + \epsilon) d_i - a_i g_{i-m} \tilde{d}_{i-m} - b_i f_{i-m} \tilde{d}_{i-m} \\ &\quad - c_i e_{i-1} \tilde{d}_{i-1} - a_i \tilde{d}_{i-m} (e_{i-m} + f_{i-m}) \\ &\quad - b_i \tilde{d}_{i-m} (e_{i-m} + g_{i-m}) - c_i \tilde{d}_{i-1} (f_{i-1} + g_{i-1}) \end{aligned}$$

(図-6)。

以上、二種の不完全 LDU による ILUBCG と ILUCR を試みた。x 方向にだけ流れがあり速度分布

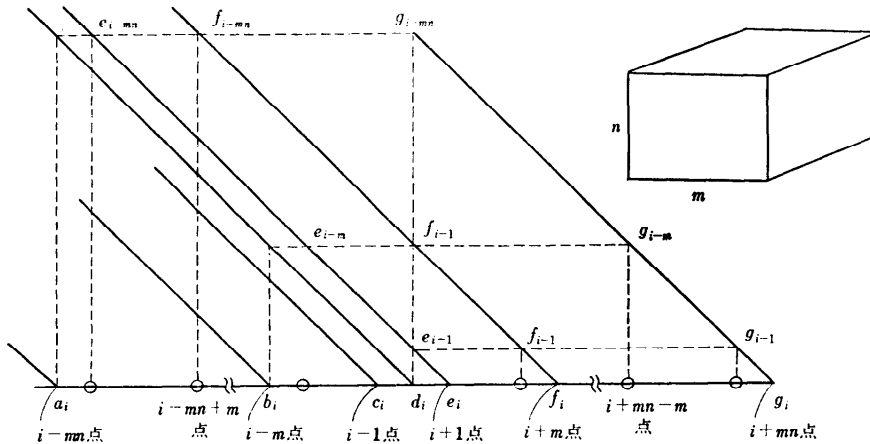


図-6

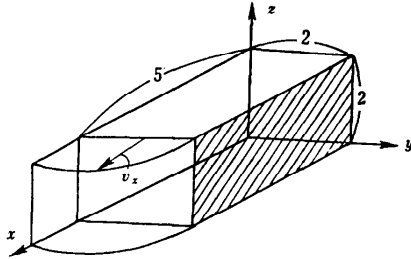


図-7

が y に依存して $v_x = v_0(1-y^5)$ という流れ場における三次元の熱拡散問題である：

$$-\Delta u + v_x \frac{\partial u}{\partial x} = f$$

$$u|_{x=0}, u|_{y=1}, u|_{z=0} = 0,$$

$$\text{他の三面では } \nabla u \cdot \mathbf{n} = 0$$

$bv = bw, \Gamma_3$ 境界なしの素直な問題である。あみ目は $40 \times 20 \times 20$, したがって $h=1/8$ である。不完全 LU 分解の安定化のためのパラメータ $\epsilon = \theta(v_0 h/k)h$ とした。実用上 θ 依存性が純いことが強く要請されるが、その意味で ILUBCG, ILUCR は $0.01 < \theta < 1.0$ の広い範囲で性能に大差なく $\theta=0.1$ に固定でよい。一方, MILUCR は, 中心差分で実用的なのは $v_0 < 2.0$ の範囲であった。 $v_0 \geq 4.0$ となると, ILUCR と比べて効果の認められる θ の範囲がせまくて実用的でない。

中心差分でなく, (純) 風上差分にすると, $0 \leq v_0 \leq 40$ の全域にわたって Gustafsson の変更の効果が著しい

表-1 部分的風上差分における, ILUCR と MILUCR の収束

$\omega=0.8, \theta=0.2, \epsilon=10^{-6}$

v_0	0.1	1.0	2.0	4.0	10	20	40
ILUCR	75	148	143	70	50	44	42
MILUCR	50	52	50	48	50	53	46

$\omega=0.6, \theta=0.1, \epsilon=10^{-6}$

v_0	0.1	1.0	2.0	4.0	10	20	40
ILUCR	75	145	140	79	50	44	40
MILUCR	35	45	40	40	44	38	35

(図-8)。しかし (純) 風上差分は精度的に劣るから, 部分的風上差分をまず試みた。パラメータ ω を導入して, $\omega=0$ のとき純風上差分, $\omega=1$ のとき中心差分になるよう, たとえば内点における方程式が,

$$(-1-\gamma)u_{i-m} - u_{i-1} + (4)u_i$$

$$-u_{i+1} + (-1+\gamma)u_{i+m} = f_i h^2/k$$

のとき, $\gamma > 0$ なら u_{i+m} の係数を $-1+\omega\gamma$ に変え, u_i の係数を $(4+(1-\omega)\gamma)$ に変える。

この方法による ILUCR と MILUCR の収束状況を表-1 に示す。

この表に見られるように, $\omega=0.6$ にしてようやく $v_0 \leq 40$ の全域で ILUCR に勝るようになった。中心差分に近い ω では, $v_0 \geq 10$ (セルペクレ数 ≥ 1.25) の領域では Gustafsson 項を制限すべきであることが感じられた。そこで, γ と ω に依存させて, Gustafsson の項の頭に, セルペクレ数 $Pe_c = 2\gamma = v_0 h/k$ を使って

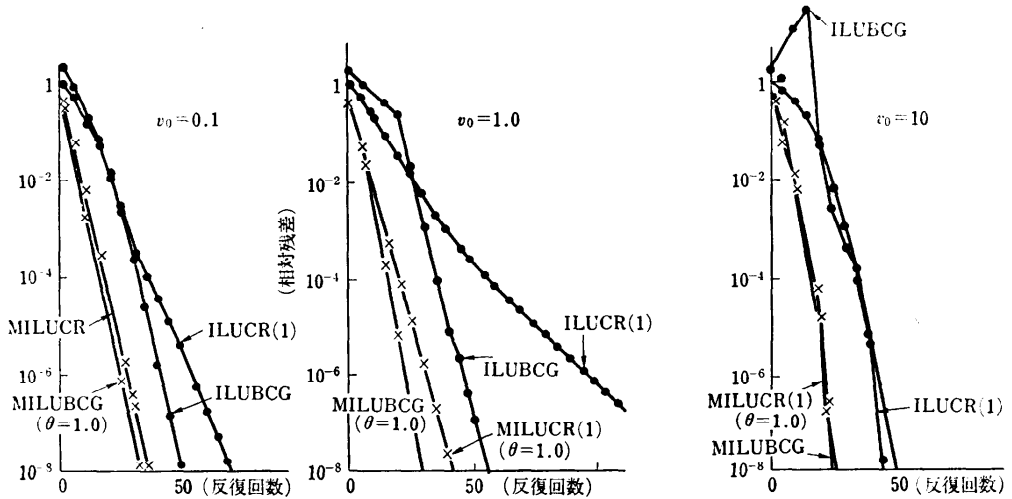
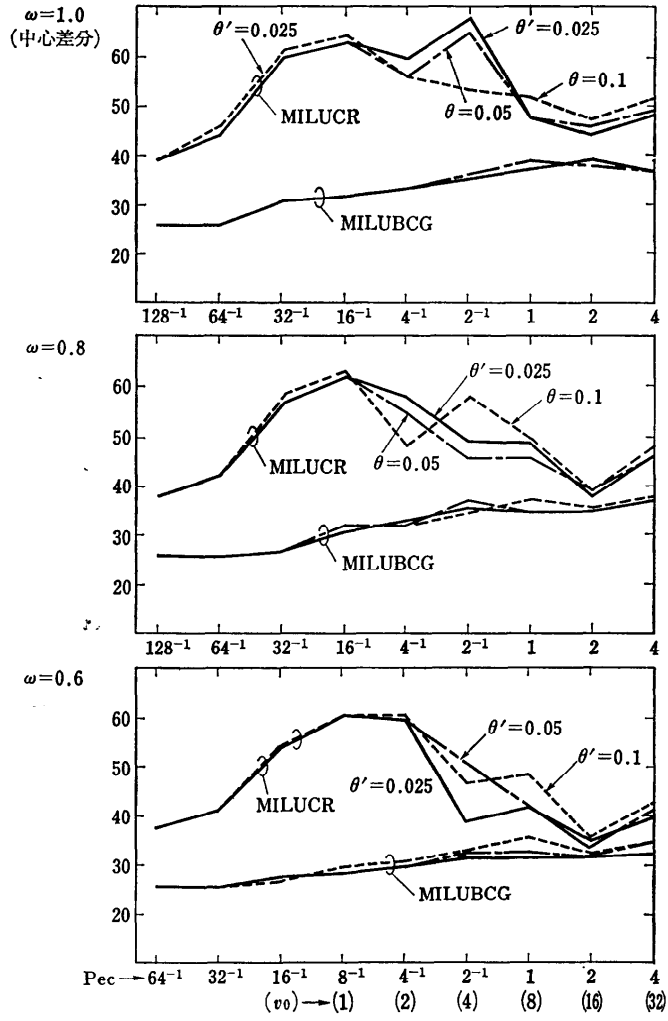


図-8 純風上差分の場合



注) たて軸は相対残差が 10^{-4} にいたる反復回数, よこ軸はセルバケレ数,
 $\theta'=0.025$: 実線, $\theta'=0.05$: 一点鎖線, $\theta'=0.1$: 点線
 図-9 ω, θ' を変えたときの MILUCR, MILUBCG の性能比較

$$0.98 \cdot \max(1 - P_{ec}/(8 - 5\omega), 0)$$

を掛ける方式を試みた。図-9 にその方式によるデータを示す。同一の θ 値によって、全域で MILUCR が使用可能であることがよみとれる。 θ 値としては 0.025 から 0.1 までの範囲ならば性能に大差はない。

図-10 に、ILUCR, MILUCR, ILUBCG, MILUBCG のすべてを比較した一例を示す。CR 系と比べ BCG の方が安定した性能を示すことがよく分かる。

ICCG, ILUBCG/CR 系のプログラミング技法:

普通のプログラムでは、SLOR などと同じように、スーパー・コンピュータにとって不都合である。ところ

がスーパー・コンピュータ (たとえば HITAC-S810) にうまくするような算法と FORTRAN プログラム技法が後によって発見されている⁶⁾。それを使えばよい。Van Der Vorst の方法⁷⁾ は汎用性の点で、後の方法と比べて劣る⁶⁾。

6. おわりに

移流項のない、すなわち純拡散型の問題に対しては、Gustafsson の MICCG(0) 法が大変強力で、しばらく他の方法 (たとえば Multigrid 法) に目移りする必要がない、という印象である。

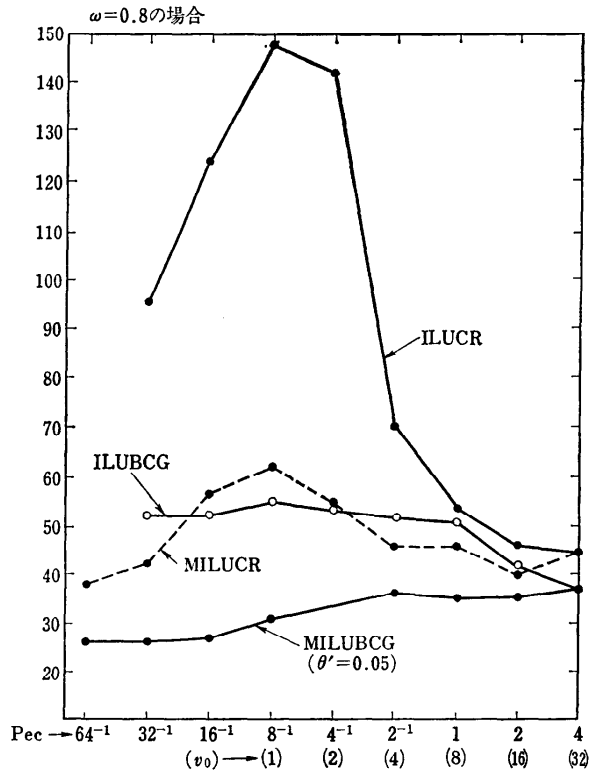


図-10 ILUCR/MILUCR, ILUBCG/MILUBCG の比較例

移流拡散問題に対しては検討不足の点が多いが、BCG系のILUBCGにGustafsson流の変更を制御つきでかけたMILUBCGが安定性に勝れ、有望である。CR系の同じ方式によるMILUCRは、ときに素晴らしい性能を示すが、安定性の点で不安が残る。部分的な風上差分を適用すると安定性を増すが、なに分にもテスト例が少ない。じつはこの分野は、研究者レベルで活発な研究がなされていて、まさに戦国時代の様相を呈している。この解説においては、専らわれわれの経験にそくしたことに限ってとり上げた。プログラミングと、データ取得に際しては日立製作所ソフトウェア工場、後保範氏をわずらわした。深謝したい。

参考文献

- 1) Varga, R.S.: Matrix Iterative Analysis (1962).
- 2) Meijerink, J. A. and Van Der Vorst, H. A.: Math. Comp. Vol. 31, pp. 148-162 (1977).
- 3) Gustafsson, I.: BIT 18, pp. 142-156 (1978).
- 4) Fletcher, R.: In Lecture Note Math. Vol. 506, Springer, pp. 73-89 (1975).
- 5) たとえば, Eisenstat, S.C., Elman, H.C. and Schultz, M.H.: SIAM J. Numer. Anal. pp. 345-357 (1983).
- 6) 後保範: 'ベクトル計算機向きICCG法' 数理解析研究所講究録514号, pp. 110-134 (1984).
- 7) Van Der Vorst, H. A.: 'A vectorizable Variant of Some ICCG Meth.' SIAMJ. Sci. Stat. Comp. Vol. 3, pp. 350-356 (1982).

(昭和59年10月12日受付)