

周期境界要素を持つブロック 5 重対角行列群への Rotated Alternative LU 分解法の適用について

伊藤 祥司[†] 張 紹良^{††} 名取 亮^{††}

本論文では、周期境界要素（偏微分方程式の離散化で周期境界条件から生ずる行列の要素）を持つブロック 5 重対角行列群を係数行列とする連立一次方程式に対し、ベクトル計算機を用いて解くために、Rotated Alternative LU (Rotated ALU) 分解法を適用するための方法を提案する。Rotated ALU 分解法は、周期境界要素のないブロック 5 重対角行列群の問題には有効であるが、本問題への直接適用は困難である。そこで、ブロック 5 重対角行列群と周期境界要素とを分離し、前処理として Sherman-Morrison-Woodbury 公式を施してから Rotated ALU 分解を適用する方法を考える。数値実験を通して、本研究で提案した解法と従来の LU 分解法との比較により、計算時間は 35~40% 程度短縮でき、計算精度は同程度であることが確認された。

Rotated Alternative LU Decomposition Method for Periodic Block Pentadiagonal Linear Systems

SHOJI ITOH,[†] SHAO-LIANG ZHANG^{††} and MAKOTO NATORI^{††}

In this paper, we propose a new way to apply Rotated Alternative LU (Rotated ALU) decomposition to periodic block pentadiagonal linear systems. Rotated ALU decomposition is confirmed more effective to non-periodic block pentadiagonal linear systems. However, it is difficult to apply this method directly to periodic systems. Therefore, we propose a new way that reduces periodic systems to non-periodic block pentadiagonal matrices plus outer product of two block vectors and uses Sherman-Morrison-Woodbury formula as a preconditioner. Then we can apply Rotated ALU decomposition. A few numerical experiment shows that this method is more efficient, 35-40% shorter on the calculating time and same order on the accuracy, than the original LU decomposition.

1. はじめに

三次元圧縮性流体を記述する周期境界条件付きナビエ・ストークス方程式を解く際、四次精度 AF 法 (Approximate Factorization method) を用いると、空間 3 方向 (i, j, k) の差分情報を表すブロック 5 重対角行列群 $\hat{G}_{j,k}$ が現れる。

ここで、係数行列 $\hat{G}_{j,k}$ は式 (1) のとおりである。ただし、 $A_{j,k}^i, B_{j,k}^i, C_{j,k}^i, D_{j,k}^i, E_{j,k}^i$ ($i=1\sim l; j=1\sim m; k=1\sim n$) は、 5×5 小行列である。また、式 (1) において周期境界要素は、 $A_{j,k}^1, B_{j,k}^1, A_{j,k}^2,$

$E_{j,k}^{l-1}, D_{j,k}^l, E_{j,k}^l$ である。

$$\hat{G}_{j,k} = \begin{bmatrix} C_{j,k}^1 & D_{j,k}^1 & E_{j,k}^1 & & & & & & & & & & & 0 & A_{j,k}^1 & B_{j,k}^1 \\ B_{j,k}^2 & C_{j,k}^2 & D_{j,k}^2 & E_{j,k}^2 & & & & & & & & & & & & & A_{j,k}^2 \\ A_{j,k}^3 & B_{j,k}^3 & C_{j,k}^3 & D_{j,k}^3 & E_{j,k}^3 & & & & & & & & & & & & & \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \\ E_{j,k}^{l-1} & & & & & & & & & A_{j,k}^{l-2} & B_{j,k}^{l-2} & C_{j,k}^{l-2} & D_{j,k}^{l-2} & E_{j,k}^{l-2} & & & & \\ D_{j,k}^l & E_{j,k}^l & 0 & & & & & & & A_{j,k}^{l-1} & B_{j,k}^{l-1} & C_{j,k}^{l-1} & D_{j,k}^{l-1} & E_{j,k}^{l-1} & & & & \\ & & & & & & & & & A_{j,k}^l & B_{j,k}^l & C_{j,k}^l & & & & & & & \end{bmatrix} \quad (1)$$

本研究では、 $\hat{G}_{j,k}$ を係数行列とする連立一次方程式

$$\hat{G}_{j,k} \mathbf{x}_{j,k} = \mathbf{b}_{j,k} \quad (2)$$

の解を、ベクトル計算機で高速に求める方法を提案する。

[†] 筑波大学大学院修士課程理工学研究科
Master's Program in Science and Engineering, University of Tsukuba
^{††} 筑波大学電子・情報工学系
Institute of Information Sciences and Electronics, University of Tsukuba

$$\begin{bmatrix} C_{j,k}^1 & D_{j,k}^1 & E_{j,k}^1 & & & 0 & A_{j,k}^1 & B_{j,k}^1 \\ B_{j,k}^2 & C_{j,k}^2 & D_{j,k}^2 & E_{j,k}^2 & & & \downarrow & A_{j,k}^2 \\ A_{j,k}^3 & B_{j,k}^3 & C_{j,k}^3 & D_{j,k}^3 & E_{j,k}^3 & & \downarrow & \downarrow \\ & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \vdots & \vdots \\ 0 & & & & & & \downarrow & \downarrow \\ & & & & & & A_{j,k}^{l-2} & B_{j,k}^{l-2} & C_{j,k}^{l-2} & D_{j,k}^{l-2} & E_{j,k}^{l-2} \\ E_{j,k}^{l-1} \rightarrow & \rightarrow & \dots & A_{j,k}^{l-1} & B_{j,k}^{l-1} & C_{j,k}^{l-1} & D_{j,k}^{l-1} \\ D_{j,k}^l & E_{j,k}^l \rightarrow & \dots & \rightarrow & A_{j,k}^l & B_{j,k}^l & C_{j,k}^l \end{bmatrix}$$

図1 従来のLU分解法
Fig. 1 Original LU decomposition.

$$\begin{bmatrix} C_{j,k}^1 & D_{j,k}^1 & E_{j,k}^1 & & & 0 & A_{j,k}^1 & B_{j,k}^1 \\ B_{j,k}^2 & C_{j,k}^2 & D_{j,k}^2 & E_{j,k}^2 & & & \downarrow & A_{j,k}^2 \\ A_{j,k}^3 & B_{j,k}^3 & C_{j,k}^3 & D_{j,k}^3 & E_{j,k}^3 & & \downarrow & \downarrow \\ & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \downarrow & \downarrow \\ \uparrow & \uparrow & \dots & \dots & \dots & \dots & & & & & \\ \uparrow & \uparrow & & & & & A_{j,k}^{l-2} & B_{j,k}^{l-2} & C_{j,k}^{l-2} & D_{j,k}^{l-2} & E_{j,k}^{l-2} \\ E_{j,k}^{l-1} \uparrow & & & & & & A_{j,k}^{l-1} & B_{j,k}^{l-1} & C_{j,k}^{l-1} & D_{j,k}^{l-1} \\ D_{j,k}^l & E_{j,k}^l & 0 & & & & A_{j,k}^l & B_{j,k}^l & C_{j,k}^l \end{bmatrix}$$

図2 ツイスト分解法
Fig. 2 Twisted factorization method.

2. 従来の解法

式(2)のような複数の方程式をベクトル計算機で解く場合、直接法であるLU分解法が用いられることが多い¹⁾。このとき、行列群 $\hat{G}_{j,k}$ の周期境界要素は、図1中の矢印が表すような経路で fill-in を生じる²⁾。

一方、ベクトル計算機の性能をさらに発揮させる観点からは、従来のLU分解法の代わりに Rotated ALU 分解法を適用すると求解時間を短縮することが可能である³⁾。Rotated ALU 分解法は、H.A. Van der Volst が提案した Twisted factorization (ツイスト分解)⁴⁾ を基に、ベクトル計算機の性能を引き出すように改良を加えた解法である。ツイスト分解が不可能な問題に対しては、Rotated ALU 分解法の適用も不可能である。

ところが、 $\hat{G}_{j,k}$ を係数行列とする周期境界要素を持つ問題に対してツイスト分解法を適用するとき、前進消去において周期境界要素は図2中の矢印が表すような経路で fill-in を生じる。前進消去が対角方向の両端から始まり中央で完了したとき、fill-in による要素のために、解くべき方程式の未知数の数が方程式数を上回り、中央において方程式は解けない。すなわち、図2の方法では Rotated ALU 分解法を用いた求解は不可能である。

3. Sherman-Morrison-Woodbury 公式の適用について

本研究では、Rotated ALU 分解を用いるうえでのこの問題点を解決するために、係数行列 $\hat{G}_{j,k}$ をブロック5重対角行列群と周期境界要素とに分離して後者を2つのブロックベクトルの積として表し、求解においては前処理として Sherman-Morrison-Woodbury (SMW) 公式⁵⁾

$$(P + UV^t)^{-1} = P^{-1} - P^{-1}U(I + V^tP^{-1}U)^{-1}V^tP^{-1} \tag{3}$$

を利用する方法 (Split/SMW)⁶⁾ を考える。

以下にその方法を示す。ここで、

$$\begin{aligned} \tilde{C}_{j,k}^1 &= C_{j,k}^1 - A_{j,k}^1, \\ \tilde{D}_{j,k}^1 &= D_{j,k}^1 - B_{j,k}^1, \\ \tilde{C}_{j,k}^2 &= C_{j,k}^2 - A_{j,k}^2, \\ \tilde{C}_{j,k}^{l-1} &= C_{j,k}^{l-1} - E_{j,k}^{l-1}, \\ \tilde{B}_{j,k}^l &= B_{j,k}^l - D_{j,k}^l, \\ \tilde{C}_{j,k}^l &= C_{j,k}^l - E_{j,k}^l \end{aligned}$$

と置くと、係数行列 $\hat{G}_{j,k}$ は次のように変形される。

$$\hat{G}_{j,k} = \begin{bmatrix} \tilde{C}_{j,k}^1 & \tilde{D}_{j,k}^1 & E_{j,k}^1 & & & 0 & & & & & \\ B_{j,k}^2 & \tilde{C}_{j,k}^2 & D_{j,k}^2 & E_{j,k}^2 & & & & & & & \\ A_{j,k}^3 & B_{j,k}^3 & C_{j,k}^3 & D_{j,k}^3 & E_{j,k}^3 & & & & & & \\ & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & & & & & \\ & & & & & & A_{j,k}^{l-2} & B_{j,k}^{l-2} & C_{j,k}^{l-2} & D_{j,k}^{l-2} & E_{j,k}^{l-2} \\ & & & & & & A_{j,k}^{l-1} & B_{j,k}^{l-1} & \tilde{C}_{j,k}^{l-1} & D_{j,k}^{l-1} \\ 0 & & & & & & A_{j,k}^l & \tilde{B}_{j,k}^l & \tilde{C}_{j,k}^l \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} A_{j,k}^1 & B_{j,k}^1 & 0 & \dots & 0 & A_{j,k}^1 & B_{j,k}^1 \\ 0 & A_{j,k}^2 & 0 & \dots & 0 & 0 & A_{j,k}^2 \\ 0 & 0 & \dots & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & & & & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & & & & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \dots & 0 & 0 & 0 \\ E_{j,k}^{l-1} & 0 & 0 & \dots & 0 & E_{j,k}^{l-1} & 0 \\ D_{j,k}^l & E_{j,k}^l & 0 & \dots & 0 & D_{j,k}^l & E_{j,k}^l \end{bmatrix}$$

$$\begin{aligned}
 &= P + \begin{bmatrix} A_{j,k}^1 & B_{j,k}^1 \\ 0 & A_{j,k}^2 \\ 0 & 0 \\ \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots \\ 0 & 0 \\ E_{j,k}^{l-1} & 0 \\ D_{j,k}^l & E_{j,k}^l \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I & 0 & 0 & \cdots & 0 & I & 0 \\ 0 & I & 0 & \cdots & 0 & 0 & I \end{bmatrix} \\
 &= P + [U_1 \ U_2] \begin{bmatrix} V_1^t \\ V_2^t \end{bmatrix} = P + UV^t.
 \end{aligned}$$

以上から、式(2)は、

$$\hat{G}_{j,k} x_{j,k} = (P + UV^t) x_{j,k} = b_{j,k}, \quad (4)$$

$$x_{j,k} = (P + UV^t)^{-1} b_{j,k} \quad (5)$$

と表される。

式(5)にSMW公式を適用すると、式(2)の解は、

$$\begin{aligned}
 x_{j,k} &= \{P^{-1} - P^{-1}U(I + V^tP^{-1}U)^{-1}V^tP^{-1}\}b_{j,k} \\
 &= \left\{ I - [Z_1 \ Z_2] \left(I + \begin{bmatrix} V_1^t \\ V_2^t \end{bmatrix} [Z_1 \ Z_2] \right)^{-1} \begin{bmatrix} V_1^t \\ V_2^t \end{bmatrix} \right\} P^{-1}b_{j,k} \\
 &= \left\{ I - [Z_1 \ Z_2] \begin{bmatrix} W_1^t \\ W_2^t \end{bmatrix} \right\} y_{j,k} \quad (6)
 \end{aligned}$$

のように表される。ここで、

$$y_{j,k} = P^{-1}b_{j,k}, \quad (7)$$

$$Z = P^{-1}U, \quad (8)$$

$$Z = [Z_1 \ Z_2], \quad \begin{bmatrix} W_1^t \\ W_2^t \end{bmatrix} = \left(I + \begin{bmatrix} V_1^t \\ V_2^t \end{bmatrix} [Z_1 \ Z_2] \right)^{-1} \begin{bmatrix} V_1^t \\ V_2^t \end{bmatrix} \quad (9)$$

である。

式(6)により式(2)は、 P を係数行列とする連立一次方程式(7)、(8)を解くことに帰着されることが分かる。また、 P は周期境界要素を持たないブロック5重対角行列群であるため、これらの式に対してRotated ALU分解法を適用すればよい。本研究では、この解法をSplit/SMW+Rotated ALU分解法と呼ぶ。

4. 数値実験

ここでは、式(1)を係数行列に持つ連立一次方程式に対して、従来のLU分解法とSplit/SMW+Rotated ALU分解法とを適用した結果を示す。実験では、流体問題で扱うサイズに基づいた、様々なベクトル長に対する計算時間を測定した。

4.1 実験内容

係数行列 $\hat{G}_{j,k}$ を構成する小行列は、Frank 行列を基にしてLU分解できるよう、かつ、式(3)の P と $(I + V^tP^{-1}U)$ が正則となるよう作成した。真の解 $x_{j,k}$ は、乱数を用いて作成した。右辺項 $b_{j,k}$ は、 $\hat{G}_{j,k}$ 、 $x_{j,k}$ と式(2)を用いて作成した。また、様々なベクトル長に対しても全要素数 $(l \times m \times n)$ が一定となるように、LU分解する i 方向の要素数は固定し $(l = 63)$ 、それ以外の方向は $m \times n = 2400$ (一定)となるよう m, n を変化させた(表1)。本実験では、 j 方向をベクトル化した。

時間計測は、図1に示した従来のLU分解法と、Split/SMW+Rotated ALU分解を用いた解法による計算部分に対して実施した。計算機は、富士通VPP500の1PEを用いた。

4.2 実験結果

計算時間を、図3に示す。横軸は、 j 方向の要素数を表し、縦軸は、計算時間[sec]を表しており、表1のサイズにおける計算時間をプロットした。この時間を基に計算時間比をグラフにしたのが、図4である(図中では、Split/SMW+Rotated ALU分解をSplit+RALUと略記している)。

以上から、従来のLU分解法に比べてRotated ALU分解法では、35~40%程度まで計算時間が短縮したことが分かる。

表1 実験モデル
Table 1 Examination models.

m	40	60	80	120	160	240	300	480
n	60	40	30	20	15	10	8	5

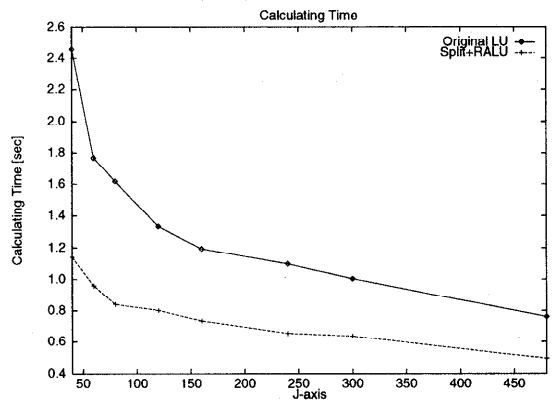


図3 従来のLU分解法とSplit/SMW+Rotated ALU分解法との計算時間の比較

Fig.3 Comparison of calculating time between Original LU decomposition and Split/SMW+Rotated ALU decomposition.

* 式(9)は2ブロック×2ブロックの連立一次方程式であり、ブロックLU分解を用いて計算した。

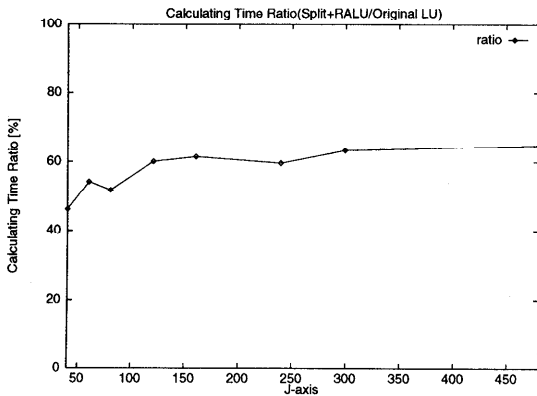


図4 従来のLU分解法とSplit/SMW+Rotated ALU分解法との計算時間比

Fig. 4 Ratio of calculating time between Original LU decomposition and Split/SMW+Rotated ALU decomposition.

解の精度に関して、単精度で計算を行ったところ、表1のすべてのモデルに対して、両アルゴリズムの誤差のオーダーは式(10)に示すとおりであり、このテスト問題において同等の精度であることが分かった。

$$\frac{\sum |x_{j,k} - \bar{x}_{j,k}|^2}{\sum |x_{j,k}|^2} \sim O(10^{-6}). \quad (10)$$

$x_{j,k}$: 真の解
 $\bar{x}_{j,k}$: 数値解

5. まとめ

係数行列が周期境界要素を持つブロック5重対角行列群である大規模な複数の連立一次方程式を解く場合、そのブロック5重対角行列群と周期境界要素とを分離し、前処理としてSMWを用いることで、Rotated ALU分解法を適用できるような方法を提案した。また、従来のLU分解法に比べると、Split/SMW+Rotated ALU分解法は計算時間を短縮することができ、計算精度も保持していることが数値例で分かった。

参考文献

- 1) Pulliam, T.H.: Euler and Thin Layer Navier-Stokes Codes: ARC2D, ARC3D, *Notes for Computational Fluid Dynamics User's Workshop*, pp.15.1-15.84 (1984).
- 2) Anderson, D.A., Tannehill, J.C. and Pletcher, R.H.: *Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer*, Hemisphere Publishing Corporation (1984).
- 3) 伊藤祥司, 張 紹良, 名取 亮: ブロック5重対角行列群に対するRotated Alternative LU分解

法について, 情報処理学会論文誌, Vol.38, No.11, pp.2402-2405 (1997).

- 4) Van der Vorst, H.A.: Large Tridiagonal and Block Tridiagonal Linear Systems on Vector and Parallel Computers, *Parallel Computing*, Vol.5, pp.45-54 (1987).
- 5) Golub, G.H. and Van Loan, C.F.: *Matrix Computations*, Johns Hopkins University Press (1996).
- 6) Yarrow, M.: Solving Periodic Block Tridiagonal Systems Using the Sherman-Morrison-Woodbury Formula, *AIAA 9th Computational Fluid Dynamics Conf., Jun. 13-15*, pp.188-196 (1989).

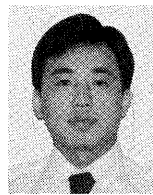
(平成9年9月30日受付)

(平成9年11月5日採録)



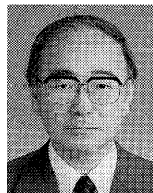
伊藤 祥司 (学生会員)

1966年生。1990年3月筑波大学第1学群自然科学類卒業。同年4月富士通(株)入社。HPC分野の業務に従事。1996年4月筑波大学大学院理工学研究科入学。現在に至る。大規模行列計算に対するハイパフォーマンスコンピューティングに興味を持つ。日本応用数理学会会員。



張 紹良

1962年生。1983年7月中国吉林大学数学系卒業。1990年3月筑波大学大学院工学研究科博士課程修了, 工学博士。(株)計算流体研究所研究員, 名古屋大学工学部助手を経て, 1995年11月筑波大学電子・情報工学系講師。現在に至る。大規模行列計算における反復解法の開発および並列計算のアルゴリズムの研究に従事。日本応用数理学会会員。



名取 亮 (正会員)

1941年生。1969年東京大学大学院工学系研究科博士課程修了, 工学博士。同年東京大学大型計算機センター助手。1974年電気通信大学電気通信学部助教授。1980年筑波大学電子・情報工学系助教授。1987年同教授。現在に至る。専攻分野, 数値解析, 応用数学。日本応用数理学会, 日本数学会, 日本物理学会各会員。