

## 2 階の微分方程式 $y'' = f(t, y)$ に対する waveform relaxation の 並列計算機への実装

山田 進 小澤 一文  
東北大学大学院情報科学研究科

2 階の微分方程式  $y'' = f(t, y)$ ,  $y(t_0) = y_0$ ,  $y'(t_0) = y'_0$  に対する waveform relaxation (WR) 法について研究する。この解法は並列計算機向きの解法であり常に超 1 次収束する。しかし非線形の場合、waveform Newton 法を用いれば 2 次収束するが、並列計算をしやすくするためにヤコビ行列を対角行列や対角ブロック行列で近似した場合は超 1 次収束に退化することを示す。このことは数値実験からも確認される。また実際に並列計算機上で実行し、その精度、計算時間、並列性（高速化の割合）について考察する。

### Implementation of the waveform relaxation methods for second order equations $y'' = f(t, y)$ on parallel computers

Susumu Yamada Kazufumi Ozawa  
Graduate school of Information Science, Tohoku University

Waveform relaxation (WR) methods for second order equations  $y'' = f(t, y)$ ,  $y(t_0) = y_0$ ,  $y'(t_0) = y'_0$  are studied. For linear cases, the methods converge superlinearly for any splittings of the coefficient matrices. For nonlinear cases, the methods converge quadratically only for waveform Newton methods. It is shown, however, that the methods converge superlinearly for approximate Jacobian matrices, which is confirmed by the numerical experiments. The accuracy, execution times and speedup ratios of the WR methods on a parallel computer are discussed.

#### 1 はじめに

大規模の連立微分方程式の初期値問題を並列計算機を用いて数値的に計算するのに適している解法の 1 つに waveform relaxation (WR) 法がある。その中のよく知られている解法の 1 つに Picard 反復法がある。この解法は

$$y'(t) = f(t, y(t)), \quad y(t_0) = y_0, \quad t \in [t_0, t_1] \quad (1)$$

に対して

$$y^{(\nu+1)}(t) = y_0 + \int_{t_0}^t f(\xi, y^{(\nu)}(\xi)) d\xi \quad \nu = 0, 1, 2, \dots \quad (2)$$

という反復を行なう解法であり、有限の積分区間に対して超 1 次収束することが知られている [1]。また、式 (1) が線形微分方程式

$$y' = Qy + g$$

のとき係数行列  $Q$  を  $Q = N - M$  と分割して得られる反復式

$$y^{(\nu+1)'}(t) + My^{(\nu+1)}(t) = Ny^{(\nu)}(t) + g(t) \quad (3)$$

についても超 1 次収束することが示されている [1],[2]。さらに、非線形方程式  $y' = f(t, y(t))$  に対しては waveform Newton 反復と呼ばれる反復法を用いることにより、2 次収束することが示されている [1]。

そこで本研究では 2 階の線形微分方程式  $y'' = Qy + g$  に対する Picard 反復および  $Q = N - M$  という分割を行なった場合の収束性を調べる。2 階の非線形微分方程式  $y'' = f(t, y)$  についての収束性を議論する。また、実際に並列計算機にこれらの解法を実装し、計算効率などを調べる。

## 2 WR 法の収束性について

### 2.1 線形方程式

まず 2 階線形微分方程式の初期値問題

$$\begin{aligned} y''(t) &= Qy(t) + g(t), & y(t_0) &= y_0 \\ y'(t_0) &= y'_0, & y &\in \mathbf{R}^m \end{aligned} \quad (4)$$

について、次の WR 反復

$$\begin{aligned} y^{(\nu+1)''}(t) &= Qy^{(\nu)}(t) + g(t), \\ y^{(\nu)}(t_0) &= y_0, & y^{(\nu)'}(t_0) &= y'_0 \end{aligned} \quad (5)$$

の収束性を考える。方程式 (4) の解は

$$\begin{aligned} y(t) &= y_0 + (t - t_0)y'_0 \\ &+ \int_{t_0}^t \int_{t_0}^s \{Qy(\tau) + g(\tau)\} d\tau ds \end{aligned} \quad (6)$$

と表せる。また、方程式 (5) の解は

$$\begin{aligned} y^{(\nu+1)}(t) &= y_0 + (t - t_0)y'_0 \\ &+ \int_{t_0}^t \int_{t_0}^s \{Qy^{(\nu)}(\tau) + g(\tau)\} d\tau ds \end{aligned} \quad (7)$$

となるので、 $\varepsilon^\nu(t) = y^{(\nu)}(t) - y(t)$  とし、(7)-(6) を計算すると

$$\varepsilon^{(\nu+1)}(t) = \int_{t_0}^t \int_{t_0}^s Q\varepsilon^{(\nu)}(\tau) d\tau ds \quad (8)$$

を得る。ここで  $c_1 = \|Q\|$  とおき、 $\|\varepsilon^{(0)}(t)\| \leq K(t - t_0)$  を仮定すると、

$$\|\varepsilon^{(\nu)}(t)\| \leq K \frac{c_1^\nu (t - t_0)^{2\nu+1}}{(2\nu + 1)!} \quad (9)$$

を満たす。ここでのノルム  $\|\cdot\|$  はユークリッドノルムとする。このことから  $y^{(\nu)}(t)$  が  $y(t)$  に超 1 次収束することがわかる。

次の議論に移る前に、行列の平方根および三角関数について説明する。行列  $M$  が正定値対称行列であるとする、適当な正則行列  $P$  により

$$M = P \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n) P^{-1} \quad (10)$$

と対角化できる。このとき、 $\sqrt{M}$  を

$$\sqrt{M} = P \text{diag}(\sqrt{\lambda_1}, \sqrt{\lambda_2}, \dots, \sqrt{\lambda_n}) P^{-1} \quad (11)$$

とする。また行列  $A$  に対し行列三角関数  $\cos At$  は行列指数関数と同様に

$$\cos At = \sum_{i=0}^{\infty} (-1)^i \frac{(At)^{2i}}{(2i)!} \quad (12)$$

と定義する。ここで  $A^0 = I$  (単位行列) である。

次に係数行列  $Q$  を  $Q = N - M$  と分割して得られる次の反復

$$\frac{d^2}{dt^2} y^{(\nu+1)}(t) + My^{(\nu+1)}(t) = Ny^{(\nu)}(t) + g(t) \quad (13)$$

の収束性について考える。ここでは行列  $M$  を正定値対称行列とする。ところで微分方程式 (4) は  $Q$  の分割を用いると

$$\frac{d^2}{dt^2} y(t) + My(t) = Ny(t) + g(t) \quad (14)$$

と変形でき、(13) - (14) を計算すると

$$\frac{d^2}{dt^2}\varepsilon^{(\nu+1)}(t) + M\varepsilon^{(\nu+1)}(t) = N\varepsilon^{(\nu)}(t) \quad (15)$$

を得る。ここで、 $y_1(t) = \cos\sqrt{M}t$  とおき、初期条件 $\varepsilon^{(\nu+1)}(t_0) = 0$ ,  $\frac{d}{dt}\varepsilon^{(\nu+1)}(t_0) = 0$  から、この微分方程式を解析的に計算すると

$$\varepsilon^{(\nu+1)}(t) = \int_{t_0}^t \int_{t_0}^{\tau} y_1(t-\tau) N\varepsilon^{(\nu)}(s) ds d\tau \quad (16)$$

となる (詳しい計算過程は [6] 参照)。ところで、

$$\begin{aligned} y_1(t) &= \cos\sqrt{M}t \\ &= P \text{diag}(\cos\sqrt{\lambda_1 t}, \dots, \cos\sqrt{\lambda_n t}) P^{-1} \end{aligned}$$

であり、行列  $M$  は対称行列なので  $\|P\| = \|P^{-1}\| = 1$ 、また  $|\cos\sqrt{\lambda_i t}| \leq 1$  ( $i = 1, 2, \dots, n$ ) なので、 $\|y_1(t)\| \leq 1$  となることがわかる。ここで線形の場合と同様に  $c_2 = \|Q\|$ ,  $\|\varepsilon^{(0)}(t)\| \leq K(t-t_0)$  とおくと

$$\|\varepsilon^{(\nu)}(t)\| \leq K \frac{c_2^{\nu}(t-t_0)^{2\nu+1}}{(2\nu+1)!} \quad (17)$$

と評価ができ、行列  $Q$  を分割した場合でも超 1 次収束することがわかる。また、 $\|N\|$  の値が小さくなるように分割すれば、収束が早くなることが予想される。

## 2.2 非線形方程式

次に waveform Newton 法の収束性について考える。1 階の非線形方程式  $y' = f(t, y)$  の waveform Newton 反復

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}y^{(\nu+1)}(t) - J_{\nu}y^{(\nu+1)}(t) \\ = f(y^{(\nu)}(t)) - J_{\nu}y^{(\nu)}(t) \end{aligned} \quad (18)$$

は 2 次収束することが知られている [1]。ここで、 $J_{\nu}$  は  $f(y^{(\nu)})$  の  $y^{(\nu)}$  に関するヤコビ行列つまり、 $J_{\nu} = \frac{\partial f(y^{(\nu)})}{\partial y}$  である。

ここではヤコビ行列  $J_{\nu} = \frac{\partial f(y^{(\nu)})}{\partial y}$  を並列処理を容易にするため、行列  $\tilde{J}_{\nu}$  で近似した

反復

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}y^{(\nu+1)}(t) - \tilde{J}_{\nu}y^{(\nu+1)}(t) \\ = f(y^{(\nu)}(t)) - \tilde{J}_{\nu}y^{(\nu)}(t) \end{aligned} \quad (19)$$

の収束性を調べる。前節同様に  $\varepsilon^{(\nu)} = y^{(\nu)} - y$  とおくと  $f(y^{(\nu)})$  は

$$\begin{aligned} f(y^{(\nu)}) &= f(y + \varepsilon^{(\nu)}) \\ &= f(y) + \frac{\partial f}{\partial y}\varepsilon^{(\nu)} + O(\varepsilon^{(\nu)})^2 \end{aligned} \quad (20)$$

と展開でき、 $O(\varepsilon^{(\nu)})^2$  の項を無視し (19) に代入すると

$$\frac{d}{dt}\varepsilon^{(\nu+1)} = \tilde{J}_{\nu}\varepsilon^{(\nu+1)} + (J_{\nu} - \tilde{J}_{\nu})\varepsilon^{(\nu)} \quad (21)$$

を得る。この式とベクトル  $\varepsilon^{(\nu+1)}$  の内積を取り、左辺を

$$\begin{aligned} \langle \varepsilon^{(\nu+1)'}, \varepsilon^{(\nu+1)} \rangle &= \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|\varepsilon^{(\nu+1)}\|^2 \\ &= \|\varepsilon^{(\nu+1)}\| \frac{d}{dt} \|\varepsilon^{(\nu+1)}\| \end{aligned}$$

の関係を使いまとめると、

$$\frac{d}{dt} \|\varepsilon^{(\nu+1)}\| \leq \mu_1 \|\varepsilon^{(\nu+1)}\| + \mu_2 \|\varepsilon^{(\nu)}\| \quad (22)$$

となる。ただし  $\mu_1$  は  $\tilde{J}_{\nu}$  の logarithmic ノルムとし、 $\mu_2$  は  $J_{\nu} - \tilde{J}_{\nu}$  のノルムとする。このとき、 $\|\varepsilon^{(\nu)}(t)\| \geq 0$  および  $\|\varepsilon^{(\nu+1)}(t_0)\| = 0$  なので

$$\begin{aligned} \|\varepsilon^{(\nu+1)}(t)\| \\ \leq \mu_2 e^{\mu_1(t-t_0)} \int_{t_0}^t e^{-\mu_1(s-t_0)} \|\varepsilon^{(\nu)}(s)\| ds \\ \leq \mu_2 e^{|\mu_1|(t-t_0)} \int_{t_0}^t \|\varepsilon^{(\nu)}(s)\| ds \end{aligned} \quad (23)$$

を得る。ここで、 $\|\varepsilon^{(0)}(t)\| \leq K(t-t_0)$  を仮定し、帰納法を用いれば

$$\|\varepsilon^{(\nu)}(t)\| \leq K \frac{(\mu_2 e^{|\mu_1|(t-t_0)})^{\nu}(t-t_0)^{\nu+1}}{(\nu+1)!} \quad (24)$$

と評価でき、この場合は 2 次収束ではなく超 1 次収束になる。

ところで、2階の非線形微分方程式

$$\begin{aligned} y''(t) &= f(t, y), & y(t_0) &= y_0 \\ y'(t_0) &= y'_0, & y &\in \mathbf{R}^m \end{aligned} \quad (25)$$

は  $z(t) = (y(t), y'(t))^T$  とおくことにより 1 階の方程式系

$$\frac{d}{dt} z(t) = (y'(t), f(t, y))^T \equiv F(z(t)) \quad (26)$$

に変換でき、この方程式に waveform Newton 法を適用すれば

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} z^{(\nu+1)}(t) - J_\nu z^{(\nu+1)}(t) \\ = F(z^{(\nu)}(t)) - J_\nu z^{(\nu)}(t) \end{aligned} \quad (27)$$

となる。このときヤコビ行列  $J_\nu$  は

$$J_\nu = \frac{\partial F}{\partial z} = \begin{pmatrix} \frac{\partial y'}{\partial y} & \frac{\partial y'}{\partial y'} \\ \frac{\partial f}{\partial y} & \frac{\partial f}{\partial y'} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & I \\ \frac{\partial f}{\partial y} & 0 \end{pmatrix} \quad (28)$$

である。ただし  $I$  は単位行列である。このことから、2階の方程式 (25) に対して直接 waveform Newton 法を適用した

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dt^2} y^{(\nu+1)}(t) - \frac{\partial f}{\partial y} y^{(\nu+1)}(t) \\ = f(y^{(\nu)}(t)) - \frac{\partial f}{\partial y} y^{(\nu)}(t) \end{aligned} \quad (29)$$

は 1 階の方程式と同様に 2 次収束することがわかる。また、ヤコビ行列  $\frac{\partial f}{\partial y}$  を並列計算しやすい行列で近似すれば、同様の議論から (29) は超 1 次収束に退化することが予想される。

### 3 数値実験

#### 3.1 線形方程式

ここでは、実際に数値実験を行ない収束性を調べる。ここで扱う微分方程式は双曲型方程式

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} &= \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (0 \leq x \leq 1) \quad (30) \\ u(x, 0) &= \sin \pi x, \quad u(0, t) = u(1, t) = 0 \end{aligned}$$

を空間方向に 3 点差分で 60 分割した

$$y''(t) = Qy(t), \quad y(t) = (u_1, \dots, u_{60})^T \quad (31)$$

とし、反復回数と収束の関係を見る。ここで  $x_i = i/61$ ,  $u_i = u(x_i, t)$  であり、行列  $M_k$  を

$$M_k = \frac{1}{(\Delta x)^2} \begin{pmatrix} -2 & 1 & & & \\ 1 & -2 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & 1 & -2 & 1 \\ & & & & 1 & -2 \end{pmatrix} \in \mathbf{R}^{k \times k}$$

とすると、行列  $Q$  は  $Q = M_{60}$  である。ただし、 $\Delta x = 1/61$  である。

次に行列  $Q (= N - M)$  の分割について考える。ここでは  $M$  が  $k \times k$  行列である  $-M_k$  を  $60/k$  個対角に並べたブロック対角行列  $M = \text{diag}(-M_k, \dots, -M_k)$  の形になる場合について考える。ここで特に  $k = 1$  のときは  $M = \text{diag}(2, 2, \dots, 2)$  とする。このときの反復回数と  $\log_{10} \|y^{(\nu)} - y^{(\nu-1)}\|$  を比較する。ここでは Numerov 法

$$y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1} = \frac{h^2}{12} (f_{n+1} + 10f_n + f_{n-1}) \quad (32)$$

に基づいた次の反復解法 (waveform relaxation)

$$\begin{aligned} \left( I + \frac{h^2}{12} M \right) y_{n+1}^{(\nu+1)} &= 2y_n^{(\nu+1)} - y_{n-1}^{(\nu+1)} \\ &+ \frac{h^2}{12} \left\{ N \left( y_{n+1}^{(\nu)} + 10y_n^{(\nu)} + y_{n-1}^{(\nu)} \right) \right. \\ &\left. - M \left( 10y_n^{(\nu+1)} + y_{n-1}^{(\nu+1)} \right) \right\} \end{aligned} \quad (33)$$

を用い、積分区間は  $[0, 0.1]$  とし、時間きざみ  $h$  は 0.01 として計算した。この時の、反復回数と収束の関係を  $M$  の形 ( $k$  の値) ごとに示したものが Fig. 1 である。

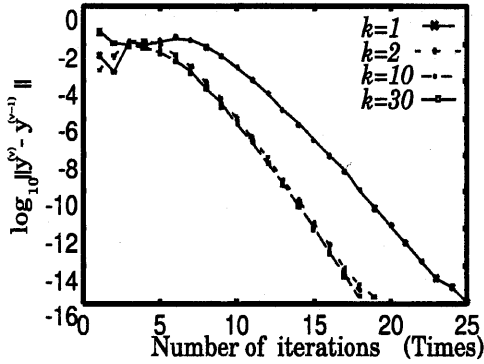


Figure 1. 反復回数と収束の関係 (線形)

次に実際に並列計算機を用い数値計算を行なう。ここでは上の双曲型方程式 (30) を空間方向に 256 分割した方程式を考える。このとき、行列  $Q$  を上での実験と同様に  $Q = N - M$  ( $M$ は対角ブロック行列) と分割し、それぞれのブロック行列に対応する成分を 1 つのプロセッサに割り当てて並列計算を行なう。ここで用いるメモリ分散型並列計算機 KSR1[3] は、1 ユーザが占有できるプロセッサ数は最大 28 個であるため、それ以上のブロックが存在する場合は各プロセッサの計算量が同じになるようにブロックを均等に振り分ける。数値解法は次の Runge-Kutta-Nyström 法

$$y_{n+1} = y_n + hy'_n + h^2 b^T \bar{f}(et_n + ch, Y)$$

$$y'_{n+1} = y'_n + hd^T \bar{f}(et_n + ch, Y)$$

$$Y = ey_n + chy'_n + h^2 A \bar{f}(et_n + ch, Y)$$

$$A = \begin{pmatrix} \frac{1}{24} & \frac{3-2\sqrt{3}}{24} \\ \frac{3+2\sqrt{3}}{24} & \frac{1}{24} \end{pmatrix},$$

$$b = \left( \frac{3+\sqrt{3}}{12}, \frac{3-\sqrt{3}}{12} \right),$$

$$c = \left( \frac{3-\sqrt{3}}{6}, \frac{3+\sqrt{3}}{6} \right)^T = (c_1, c_2)^T,$$

$$d = \left( \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right), \quad e = (1, 1)^T$$

$$\bar{f}(t_n et_n + ch, Y) = \begin{pmatrix} f(t_n + c_1 h, Y) \\ f(t_n + c_2 h, Y) \end{pmatrix}$$

である。この解法は 2 段 Gauss 型 Runge-Kutta 法に基づく indirect collocation 法 [4] と呼ばれるものであり、元になる Runge-Kutta 法の性質を持っているので、この解法について全体の次数は 4 次、各ステージの次数は 2 次であり、安定性に関しては A-安定および P-安定である。ここで積分区間は  $[0, 1]$ 、きざみ幅  $h = 0.1$ 、反復停止条件  $\|y^{(v)} - y^{(v-1)}\| \leq 10^{-7}$  で計算した結果が Table 1 である。この結果から waveform relaxation 法では並列計算の効率がかなり優れていることがわかる。

Table 1. 並列計算機による数値実験の結果

$k$	反復回数	計算時間 (sec)		$Sp$	$P$	$E$
		逐次	並列			
1	11579	566.02	61.92	9.14	16	0.57
2	6012	586.73	53.79	10.91	16	0.68
4	3052	362.94	31.44	11.54	16	0.72
8	1462	240.81	19.56	12.31	16	0.76
16	688	181.74	13.94	13.04	16	0.81
32	427	201.56	27.11	7.43	8	0.93
64	403	369.86	97.27	3.80	4	0.95
128	403	791.10	407.41	1.94	2	0.97
256	1	159.76	-	-	-	-

$$Sp = \frac{\text{計算時間 (逐次)}}{\text{計算時間 (並列)}}$$

$P$ ... 並列計算時に使用するプロセッサ数

$$E = Sp/P$$

### 3.2 非線形方程式

次に非線形方程式に対する waveform Newton 法およびそのヤコビ行列を並列計算しやすいように近似した場合の収束性を調べる。ここでは戸田格子の振舞いを表す方程式

$$v_i'' = \exp(v_{i-1}(x)) - 2 \exp(v_i(x)) + \exp(v_{i+1}(x)) \quad i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots (34)$$

を考える。この方程式系は

$$v_i(x) = \log(1 + \sinh^2 \tau \operatorname{sech}^2(i\tau - w(x+q))),$$

$$w = \sinh \tau$$

というソリトン解を持つ [5]。ここで、 $q$  は解の初期位相を表す任意定数である。この方程式に対し  $v_i(x) = y_i(x)$ ,  $v'_i(x) = y'_i(x)$  とおき、有限次元で近似した 100 元連立微分方程式

$$\begin{cases} y''_i = \exp(y_{i-1}) - 2 \exp(y_i) + \exp(y_{i+1}) \\ \quad \quad \quad i = 2, \dots, 99 \\ y''_1 = 1 - 2 \exp(y_1) + \exp(y_2), \\ y''_{100} = \exp(y_{99}) - 2 \exp(y_{100}) + 1 \end{cases}$$

初期条件  $y'_i(0) = v'_i(0)$ ,  $y_i(0) = v_i(0)$

を  $q = 40, \tau = 0.5, w = \sinh 0.5$  の条件のもとで、Numerov 法 (32) を用い計算する。また積分区間は  $[0, 5]$  とし、きざみ幅  $h$  は 0.05 とし、ヤコビ行列  $J_\nu = (J_\nu(i, j))$  の近似行列  $\tilde{J}_\nu$  を次のような対角ブロック行列

$$\tilde{J}_\nu(i, j) = \begin{cases} J_\nu(i, j), & k(l-1) + 1 \leq i, j \leq kl \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases} \\ l = 1, \dots, 100/k$$

とする。このとき、あるブロック行列に対応する成分は他のブロック行列に対応する成分と独立であるため並列計算ができる。以上の条件下で計算した際の反復回数と  $\log(\max |y^{[l]} - y^{[l-1]}|)$  の関係を Fig. 2 に示す。

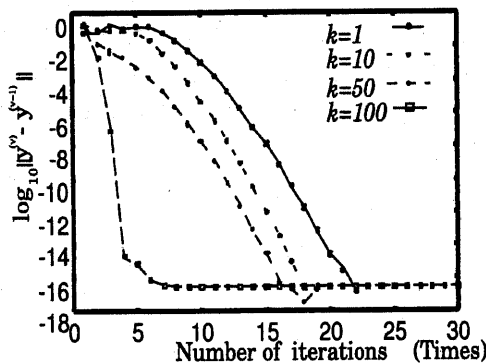


Figure 2. 反復回数と収束の関係 (非線形)

この結果から、ヤコビ行列を用いた時は 2 次収束するが、他の (並列計算しやすい) 行

列で近似した場合は超 1 次収束に退化することがわかる。

## 参考文献

- [1] K. Burrage, Parallel and Sequential Methods for Ordinary Differential Equations, Oxford University Press, New York, 1995.
- [2] K. Burrage, Z. Jackiewicz, S.P. Nørsett and A. Renaut, Preconditioning Waveform Relaxation Iterations for Differential Systems, BIT 36:1(1996), 54-76.
- [3] Kendall Square Research Corporation, Technical Summary, Waltham, MA, 1992.
- [4] P. J. van der Houwen, B. P. Sommeijer and Nguyen Huu Cong, Stability of collocation-based Runge-Kutta-Nyström methods, BIT 31(1991), 469-481.
- [5] 渡辺慎介, ソリトン物理入門, 培風館, 1985.
- [6] 山田進, 小澤一文, 2 階線形微分方程式  $y'' = Qy + g$  に対する Waveform Relaxation の収束性, 第 26 回数値解析シンポジウム講演予稿集, 1997, 19-22.
- [7] S. Yamada and K. Ozawa, Convergence of splitting waveform relaxation (WR) iteration for  $y'' = Qy + g$ , Sci-CADE97, at Grado Italy, 1997, 99-100.