Vol. 40 No. 12 情報処理学会論文誌 Dec. 1999

テクニカルノート

シュール補元による反復法のチューニング

寒 川 光†

2次元問題では5点，3次元問題では7点の有限差分法を用いるプログラムで，元の行列にそのまま反復法を適用するよりも，レッドブラック順序に行列を並べ換え，縮小系（シュール補元）に消去してから反復法を適用するほうが計算時間が短縮できることがある．この方法は2次元問題で対称行列を扱う場合は有効とする報告があるが，3次元問題に不用意に用いると，計算量が増大することもあり，実用には難点もあった．本論文では計算量増大の問題を“奇数調整”によって回避する実装方式を提案する．いくつかの数値実験により，3次元問題での有効性を確かめた．

Tuning of Iterative Solvers by Using Schur Complement

Hikaru Samukawa†

In iterative solvers applied for five/seven-points finite difference discretization in two/three-dimensional problems, it is sometimes faster to solve a set of equations of the reduced-system obtained through reordering to red-black sequence and reducing red-set than of the full-system with natural ordering. This method was reported to be effective for symmetric coefficient matrices in two-dimensional problems, however an unpremeditated application of the method often results in large operation-increase in three-dimensional problems. This paper proposes an implementation of “odd number adjustment” to guard this operation-increase. Several numerical experiments show that the method is also effective in three-dimensional problems.

1. はじめに

直交格子による差分法によって生成された行列 A を係数行列とする連立1次方程式 $Ax=b$ に対し，レッドブラック（RB）順序による行と列の交換を行う．

$$\begin{pmatrix} A_{rr} & A_{rb} \\ A_{br} & A_{bb} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_r \\ x_b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_r \\ b_b \end{pmatrix} \qquad (1)$$

R に対応する未知数 x_r を消去すると縮小された系 $Sx_b = b_s$ が得られる．

$$\underbrace{(A_{bb} - A_{br}A_{rr}^{-1}A_{rb})}_{\text{S:シュール補元}}x_{\mathrm{b}} = \underbrace{b_b - A_{br}A_{rr}^{-1}b_r}_{b_s} \qquad (2)$$

縮小された系の係数行列 S を，A における A_{rr} のシュール補元（Schur complement）と呼ぶ．A_{rr} と A_{bb} が対角行列になるので，シュール補元は容易に求められる．本論文では元の自然な順序の係数行列をそのまま反復計算に用いる場合を“全体系”を解く，シュール補元を用いる場合を“縮小系”を解くと呼ぶ．

1次元問題では A は自然な順序で3重対角行列，RB順序に並べ換えて分割すると A_{br} と A_{rb} が対角項に平行な2本の非ゼロ要素を持つ行列，S は3重対角行列になる．2次元問題で5点差分を用いると，A は対角小行列を3重対角行列，副対角小行列を対角行列とするブロック3重対角行列（**図1**），RB順序にすると，式(1)の形になり，シュール補元を求めると，フィルインのために，自然な順序によるよりも密な行列になる．しかしシュール補元の非ゼロ要素数は，未知数が半分になっているので，自然な順序によるよりも10%ほど少ない．3次元領域で7点差分を用いると，シュール補元はさらに密になり，非ゼロ要素数は自然な順序によるよりも36%ほど増える．

シュール補元を陽に求めず，反復の中では行列ベクトル積 $Sv^{(k)}$ を $A_{bb}v^{(k)} - A_{br}(A_{rr}^{-1}(A_{rb}v^{(k)}))$ と陰的に計算すれば，行列ベクトル積の計算量は増えないが，前処理は適用できない．

シュール補元 S の条件数 κ_S は $O(h^{-1})$ で，A の条件数 κ_A の $O(h^{-2})$ に比較すると大きな改善である（h はメッシュサイズ）．CG法の反復回数は $O(\sqrt{\kappa})$ に従うと考えられるので[2)]，行列ベクトル積の計算量の増加やシュール補元を求めるオーバヘッドは，反復回数が半分になれば逆転可能と期待される．この好条件の利用者はあまり多くないようである．文献1)で

† 日本アイ・ビー・エム株式会社東京基礎研究所
Tokyo Research Laboratory, IBM Research

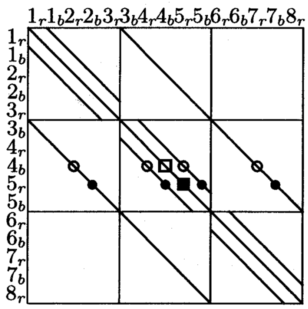

図 1　5点差分による係数行列の非ゼロ要素位置
Fig. 1　Position of nonzero-elements in coefficient matrix by 5-points scheme.

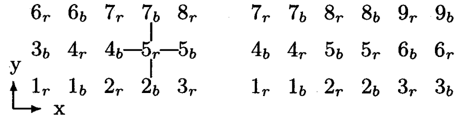

図 2　RB 順序（奇数と偶数）
Fig. 2　RB ordering (odd and even).

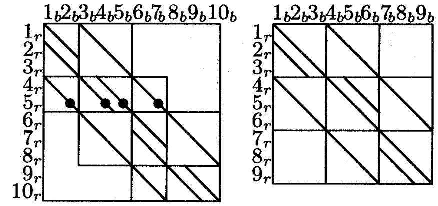

図 3　5点差分による部分行列（奇数と偶数）
Fig. 3　Submatrix of 5-points scheme (odd and even).

は 2 次元問題（対称行列）について有効性が報告されているが，3 次元問題は扱っていない．文献 2) では計算量が増加するとの理由で，陽に S を求める方法は勧めていない．また前処理行列の種類によっては，条件数 $O(h^{-2}) \to O(h^{-1})$ となるかどうかも不明である．

本論文ではシュール補元の構造を見極め，計算量を不必要に増大させない実装方式を提案する．また収束までの反復回数が半分近くに減ることを数値実験によって示す．

2. RB 順序とシュール補元

直交格子での RB 順序に基づくシュール補元の性質をまとめる．なお 2 次元領域は $nx \times ny$ の格子に分割し，自然な順序は x 方向を先に回し，3 次元領域は $nx \times ny \times nz$ の格子に分割し，x 方向を先に，次に y 方向を回すものとする．また $nx0 = \lfloor nx/2 \rfloor$, $nx1 = \lfloor (nx+1)/2 \rfloor$，$nxy0 = \lfloor (nx*ny)/2 \rfloor$, $nxy1 = \lfloor (nx*ny+1)/2 \rfloor$，$nxy = nx*ny$ とする．

2.1 2 次元 5 点差分

図 2 の左は $nx = 5$ の場合で，自然な順序は $1_r, 1_b, 2_r, 2_b, 3_r, 3_b, \cdots$ となる（r と b は R と B の略である）．RB 順序は R を先に番号付けしてから B を番号付けするので $1_r, 2_r, 3_r, \cdots, 1_b, 2_b, 3_b, \cdots$ となる．

図 1 は自然な順序に対応するブロック 3 重対角行列で，各ブロックは図 2 の横方向の格子線に対応している．対角小行列は 3 重対角行列，副対角小行列は対角行列なので，ブロックを意識することなく，これを 5 つの 1 次元配列に格納するデータ構造が一般的に用いられている．非対角項は対角項から，下三角では $-nx$ と -1，上三角では 1 と nx 要素離れている．本論文ではこの行列を "5 本対角行列 $(-nx, -1, 0, 1, nx)$" と記す．ただしこの場合は正側と負側で対称なので，"5 本対角行列 $(sym, 0, 1, nx)$" と略す．

(1)　**行列の分割**

図 2 左に nx **が奇数の場合**の格子点 5_r が接続する格子点を示した．この接続関係は図 1 の行列では ● 印の非対角要素が対応する．● 印は行位置が R，列位置が B の要素で，格子点 5_r から下：2_b，左：4_b，右：5_b，上：7_b への連成項である．1 つ若い格子点 4_b の接続関係を○印で加えた．図 2 に同色の接続関係が存在しないことが，図 1 の行列の行と列が同色の位置の非対角項がすべてゼロであること，RB 順序で A_{rr} と A_{bb} が対角行列になることに対応している．

図 3 に分割された小行列 A_{rb} を示した．図 1 の格子点 5_r の接続関係は図 3 の ● 印に移る．また格子点 4_b の接続関係は A_{br} に回る．A_{rb} の対角小行列は図 3 左のように $nx1 \times nx0$ と $nx0 \times nx1$ とが交互に現れるので，非ゼロ要素は 4 本の直線上に並び，A_{rb} は 4 本対角行列 $(-nx1, -1, 0, nx0)$ になる．

nx **が偶数の場合**は，図 3 右のように，5 本対角行列 $(sym, 0, 1, nx1)$ になる．これは図 2 では，同じ番号の R と B が R-B と並ぶ格子線と B-R と並ぶ格子線が交互に現れるからである．

A_{br} についても同様のことがいえ，nx が**奇数**なら 4 本対角行列 $(-nx0, 0, 1, nx1)$，**偶数**なら 5 本対角行列 $(sym, 0, 1, nx1)$ になる．

(2)　**シュール補元**

シュール補元 S のフィルインは A_{br} と A_{rb} の積を考えてもよいが，差分格子上で考えたほうが分かりやすい．非ゼロ要素の位置は，"ある格子点が消去されると，接続関係が，消去された格子点が直接接続していた格子点に延長される" ことから特定できる．**図 4** で

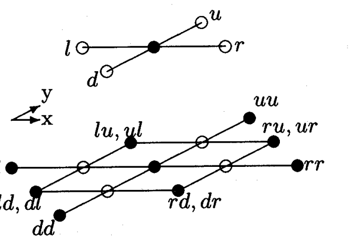

図4 2次元5点差分スキームでの格子点間の連成
Fig. 4 Grid-points coupling of 2-D 5-points difference scheme.

は●印が B, ○印が R とする（図の小文字の r, l, u, d は Right, Left, Up, Down の略）. たとえば左の図の中央の格子点の右に位置する r を消去すると，●印の格子点からは，r に直接接続していた ru, rr, rd の3格子点に接続関係が延びる．同様に u を消去すると ul, uu, ur の3格子点に延びる（ru と ur は同じ格子点）．このようにして r, u, d, l の4格子点を消去すると，図右の●印の8格子点と接続し，対応する行列ではこれらはフィルインとなる．すなわち自然な順序では5点差分だったものが，シュール補元では9点差分の形になる．S は nx が**奇数の場合**は9本対角行列 $(sym, 0, 1, nx0, nx1, nx)$ になる．対角線と平行な非ゼロ要素が4本 $(\pm nx0, \pm nx1)$ 追加された形の行列になるが，総格子点数が半分なので，行列全体の非ゼロ要素数は10%減る．しかし nx が**偶数の場合**は13本対角行列 $(sym, 0, 1, 2, nx1-1, nx1, nx1+1, nx)$ に膨張する．

2.2 3次元7点差分

nx, ny **ともに奇数**の場合は，A_{br} は6本対角行列 $(-nxy0, -nx0, 0, 1, nx1, nxy1)$, A_{rb} は6本対角行列 $(-nxy1, -nx1, -1, 0, nx0, nxy0)$ になる．

シュール補元 S の非ゼロ要素の位置は，2次元の場合の接続関係を xy 面，yz 面，xz 面に重ねた形になる．自然な順序では7点差分だったものが，シュール補元では19点差分の形になる☆．S は，対角線と平行な非ゼロ要素の線が12本 $(\pm nx0, \pm nx1, \pm(nxy1 - nx1), \pm nxy0, \pm nxy1, \pm(nxy1 + nx0))$ 追加された形の19本対角行列 $(sym, 0, 1, nx0, nx1, nx, nxy1 - nx1, nxy0, nxy1, nxy1+nx0, nxy)$ で，非ゼロ要素数は36%程度増える．

nxy **が偶数の場合**，たとえば nx が奇数，ny が偶数の場合，A_{br} と A_{rb} が11本対角行列 $(sym, 0, 1, nx0, nx1, nx, nxy1)$ になり，これらの積であるシュール補元は47本対角行列に膨張する．この膨張は1次元配列を用いるデータ構造に原因があり☆☆，真の非ゼロ要素はこの配列内でも約40%しかない．

2.3 奇数調整

膨張の問題は，2次元の場合は nx が奇数になるようにダミーの格子点を想定し，対応する係数行列の要素には，対角項に1を，非対角項にゼロを入れることで解決できる．3次元の場合も同様に，nx, ny がともに奇数になるように調節する．本論文ではこの調整を**奇数調整**と呼ぶことにする．

2次元問題で $nx = 4$ に対し，奇数調整した場合の係数行列は次のようになる．

$$\left(\begin{array}{cccc|c|cccc|c|cc}
a & r & & & & u & & & & & & \\
l & a & r & & & & u & & & & & \\
 & l & a & r & & & & u & & & & \\
 & & l & a & & & & & u & & & \\
\hline
 & & & & 1 & & & & & & & \\
\hline
d & & & & & a & r & & & & u & \\
 & d & & & & l & a & r & & & & \\
 & & d & & & & l & a & r & & & \\
 & & & d & & & & l & a & & & \\
\hline
 & & & & & & & & & 1 & & \\
\hline
 & & & & & d & & & & & a & \ddots \\
 & & & & & & & & & & \ddots & \ddots
\end{array}\right)$$

奇数調整によって得られた係数行列に，適当な行，列の交換（permutation）を考えれば，もとのダミー格子点を含めない係数行列 A と単位行列 I を対角小行列とするブロック対角行列が得られる．

$$\left(\begin{array}{c|c} A & \\ \hline & I \end{array}\right)$$

A と I は独立なので，CG 法では反復ベクトル $v^{(k)}$ のダミー格子点に対応する要素をゼロに保ちさえすれば，収束に影響を与えない．これは通常初期ベクトルの対応する要素をゼロにすることで満たされる．

3. 数値実験

3次元問題で収束性を調べた．例題は解析領域 $[0,1] \times [0,1] \times [0,1]$ における次の偏微分方程式の7点中心差分による離散化（各方向を等分割）とした．

$$-(Ku_x)_x - (Ku_y)_y - (Ku_z)_z + Gu_x = F$$

移流項の係数 G がゼロの場合はポアソン方程式となり，A は対称行列になる．

拡散係数 K が領域全域で一定（$=1$）の場合と，変化する場合（**図5**の斜線領域で $K = 10^4$，網掛け領域で $K = 10^{-5}$，その他は $K = 100$）を扱う（左図

☆ 19は，対角項に6つ（u-d, d-u, f-b, b-f, r-l, l-r）の重なり，斜めの12点で2つの重なりがあるので，$6 \times 6 - (12 \times 1 + 1 \times 5)$ からも確かめられる．

☆☆ $a(nx, ny, nz)$ のように，問題の次元数と同じ配列次元数を用いると膨張しない（奇数調整も要らない）．

表 1 対称係数行列の反復回数と条件数
Table 1 Number of iterations and condition number of symmetric coefficient matrix.

Number of Meshes	K 一定						K 変化	
	CG 法		ICCG 法		MICCG 法		ICCG 法	
	Full	Reduced	Full	Reduced	Full	Reduced	Full	Reduced
41^3	135 (714)	68 (179)	52 (73.6)	30 (22.4)	29 (17.8)	19 (5.5)	81 (237)	45 (62.9)
60^3	196 (1505)	98 (377)	73 (155)	42 (46.6)	38 (35.8)	22 (9.2)	110 (274)	61 (76.4)
80^3	259 (2656)	130 (665)	96 (272)	54 (81.8)	49 (62)	27 (15)	145 (864)	80 (247)

No. of iterartions (Condition number)

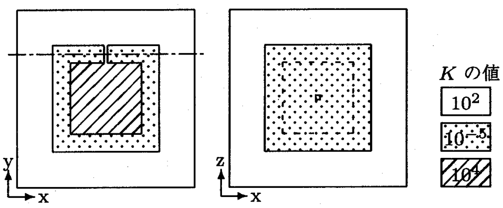

図 5 拡散係数の分布
Fig. 5 Distribution of diffusion coefficients.

の鎖線断面で上から見た図が右図)☆. 生成項 F は中心に位置する $0.1 \times 0.1 \times 0.1$ の立方体の部分領域で $F = 100$, その外側はゼロ, 境界条件は領域の 6 つの面のうち, 上面を除いて $u = 1$, 上面 ($y = 1$ の面) で $u = 0$ のディリクレ条件とした. 係数行列は対角項を 1 にスケーリング, 収束は相対残差 $\|r_i\|_2/\|r_0\|_2 < 10^{-8}$ で判定, 初期反復ベクトルは右辺ベクトルとしている.

K 一定の問題を前処理なしの CG 法, ICCG 法 (「0-レベル」のフィルインだけを考慮), MICCG 法 ($\theta = 0.95$) で[3], また K が変化する問題を ICCG 法で解き, 収束までの反復回数と条件数 (括弧内) を**表 1** に示した. 縮小系の反復回数はほぼ 50%台に減っている☆☆.

CG 法と ICCG 法では, 反復回数を条件数の平方根で割ると, CG 法は 5, ICCG 法は 6 になる. これは固有値の分布状態が保存されたまま行列が縮小され, 条件数 κ が $O(h^{-2}) \to O(h^{-1})$ となって, 反復回数が $O(\sqrt{\kappa})$ に比例して減少したからと考えられる. MICCG 法の場合は 6.2 から 8.1 の幅を持つが, これには θ の影響や, 修正分解と摂動との組合せによる影響と考えられる[2].

移流項を $G = 2\exp(2(x^2 + y^2))$ とした**非対称行列** (K 変化) を不完全 LU 分解つきの Bi-CGSTAB 法で解き, 収束までの反復回数を**表 2** に示した. 対称行列の場合と比較すると, 縮小の効果は少なめで, ばらつきも大きいが, 縮小系を用いる利点は確かめられた.

表 2 非対称行列の反復回数
Table 2 Number of iterations for unsymmetric matrix.

Number of Meshes	Full	Reduced
41^3	83	48
60^3	92	75
80^3	130	81

4. おわりに

3 次元 7 点差分の問題で, RB 順序に基づくシュール補元を CG 法に用いることが有効であることを確かめた. RB 順序に基づく縮小系を利用するという発想自身は, 格子点の順序付けというよりは, "差分スキームの変更" と解釈したほうが理解しやすい. これまでの文献の中には,「縮小すること自身が有力な前処理である」というように, "縮小系を用いるか, 前処理を用いるか" を 2 者択一的に位置付ける傾向も見受けられる. これはシュール補元を陽に求められない場合は正当な位置付けかもしれないが, 本論文で述べたように, 奇数調整できれば行列の膨張は抑えられ, ある程度の記憶域の増加に耐えられれば, 二者択一的に考える必要はなくなる.

参 考 文 献

1) Meier, U. and Sameh, A.: The behavior of conjugate gradient algorithms on a multivector processor with hierarchical memory, *J. Comp. Appl. Math.*, 24, pp.13–32 (1988).
2) Barrett, R., et al., 長谷川里美, 長谷川秀彦, 藤野清次 (訳) : 反復法 Templates, 朝倉書店 (1996).
3) 森 正武 : FORTRAN 77 数値計算プログラミング (増補版), 岩波書店 (1987).

(平成 11 年 5 月 6 日受付)
(平成 11 年 9 月 2 日採録)

☆ 中央の出口は 1 辺 0.02 の正方形なので, nx, nz が 50 よりも小さい偶数の場合は出口が塞がれる. このため分割数 40 でなく 41 とした.

☆☆ 条件数は反復ごとに得られる 3 つのスカラー量を保存することで, ポスト処理により 3 重対角行列の両端の固有値として求めた (「ランチョス法との関連」による[2]).