行列多項式前処理による共役勾配法系アルゴリズムのプラズマシミュレーションへの適用

5F－2

鈴木　信太郎　　石黒　美佐子
茨城大学工学部

1．はじめに

共役勾配法系アルゴリズムは，ベクトル・並列処理に勝れており，大規模線形方程式のスーパーコンピュータ向き解法として広く利用されている。しかしながら，その効率は前処理をいかにうまく並列計算できるかにかかっている。本研究では，多様な係数行列に適用可能なノイマン級数行列および行列多項式[1]を前処理行列として導入し，プラズマ流体シミュレーションのフーリエ変換と差分併用による離散化行列，ならびに有限要素法行列でのベクトル並列処理の効果を検証する。

2．ノイマン級数行列による前処理手法

ここでは，共役勾配法系アルゴリズムの並列処理向き前処理手法としてノイマン級数行列を考える。

係数行列をブロック行列とする。不完全ＬＵ分解後の単位三角行列Ｌ（Ｕ）を次のように分離する。

$$[L]_i = [I+E+F]_i \qquad (1)$$

ここで，Ｅは対角に隣接する要素，Ｆはその他の要素，ｉは縦のブロック番号を示す。これにより，行列Ｌを係数行列とする方程式は次のようになる。

$$[I+E+F]_i x = y_i$$

$$[I+E]_i x_i = y_i - [F]_i x_{i-1} \qquad (2)$$

ここで $[I+E]^{-1}$ にノイマン級数展開を施せば解は次のようになる。

$$x_i = [I+E]_i^{-1}(y_i - [F]_i x_{i-1})$$

$$= [I-E+E^2-E^3+\dots]_i (y_i - [F]_i x_{i-1}) \qquad (3)$$

Ｅの要素の絶対値が対角に比べ十分小さければ２次程度で展開を打ち切れ，またＦの要素が十分小さい場合はＦのかかる計算を省略できる。

この方法は，再帰演算を含まず，ベクトル・並列処理に適しているといえる。

差分法行列へのベクトル計算処理および並列計算処理の適応性については文献[2]に示した。

Application of a CG-like Algorithm with Matrix Polynomial Preconditioning to Plasma Simulation.
Shintaro SUZUKI and Misako ISHIGURO.
Faculty of Engineering, Ibaraki University.

3．プラズマ流体方程式への並列処理の適用

プラズマ流体方程式をトカマク形状で解析する。角度方向はフーリエ変換で小円半径方向は差分法で離散化する。これらの離散化によりＮ×Ｎのブロック対角行列(Fig. 1)を係数とする線形方程式を解く問題に帰着される。フーリエ変換併用によるＮ個の小行列は，対角ブロック以外の要素が２桁程度小さな値をとるので前処理では無視することができる。

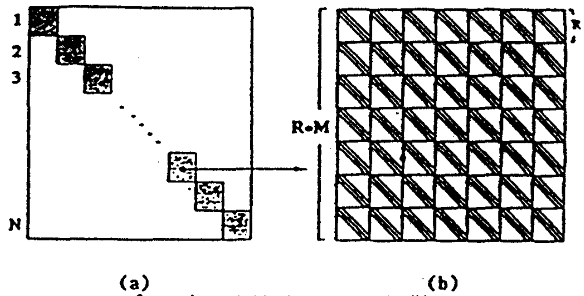

Fig. 1 プラズマ流体方程式の離散化行列

Fig. 2に並列計算機 Kendall KSR1-32 でのメッシュ数R=1000，フーリエモード数M=50での処理時間を示す。解析にはBi-CGSTAB 法を用いている。この結果では，KSR1のキャッシュメモリの効果もあり 16 CPUで16.9倍の台数効果が得られている。また，前処理により処理時間は1/3となった。

4．行列多項式による前処理手法

ノイマン展開法では，前処理でのデータ依存がなくなるので並列性は向上がみられるが収束性の面では，問題によってそれほど改善されないことが解っ

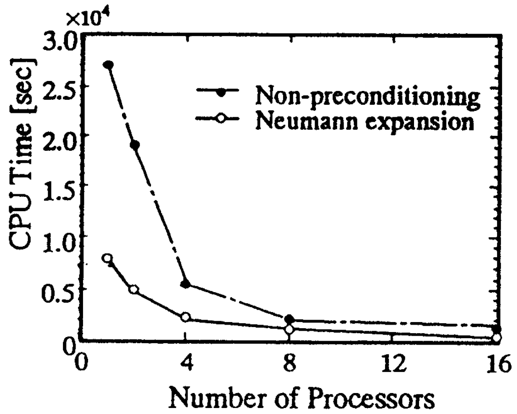

Fig. 2 プラズマ流体方程式の並列処理

た[2]。そこで，(3)式の代わりに次のような行列多項式を前処理因子として考える。Eは非対角要素：

$$x = (\alpha_0 I - \alpha_1 E + \alpha_2 E^2 \cdot\cdot + \alpha_n E^n)\, y \quad (4)$$

共役勾配法では係数行列の固有値が1付近に分布しているほど収束性がよいとされている。そこで，固有値分布を1に近づけるように(4)式の係数列を調整する。ここでは，行列Eの固有値が$[-\rho, \rho]$の間で一様に分布していると仮定し，前処理後の固有値分布$\mu(\lambda)$を1に近づけるように次式を最小化する。

$$G = \int_{-\rho}^{\rho} \{1 - \mu(\lambda)\}^2 d\lambda \quad (5)$$

これより，求める係数列に対する連立方程式

$$\sum_i T_j^i \alpha_i = t_j \quad (6)$$

を得る。ここで，

$$T_j^i = \int_{-\rho}^{\rho} \lambda^{i+j} (1 - \lambda)^2 d\lambda \quad (7)$$

$$t_j = \int_{-\rho}^{\rho} \lambda^j (1 - \lambda)\, d\lambda \quad (8)$$

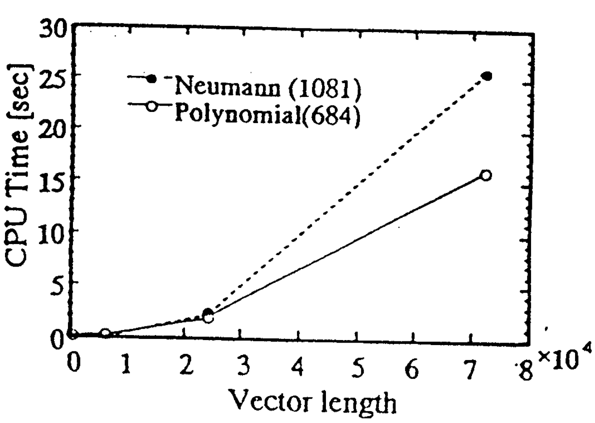

Fig. 3 行列多項式による前処理

解析する問題が十分大規模であれば$\rho = 1$と仮定できる。Fig. 3にプラズマ流体方程式を解析した場合のノイマン級数行列とのベクトル計算機HITAC S-3800での計算時間比較を示す。()内はR=1200, M=60での反復回数を示す。行列多項式による前処理では，固有値分布の改善により反復回数，処理時間共に最大で約40%程度に減少した。

5．有限要素法行列への行列多項式前処理の適用

有限要素法による線形方程式の係数行列は帯行列となる。その行列は，対角付近に非ゼロ要素が集中し優対角性の強いものとなる。そこで，ここでは前述の級数展開を1次で打ち切って計算量を押さえる。すなわち，

$$x = (\alpha_0 I - \alpha_1 E)\, y \quad (9)$$

多項式行列前処理では正規化のみ行った場合に比較し，反復回数で50%程度の減少がみられた。

6．おわりに

プラズマ流体方程式の離散化行列に前処理手法としてノイマン級数行列を適用し，並列処理における有効性を確認した。また，行列多項式前処理へと拡張することにより収束性が改善されることを確認した。

有限要素法による離散化行列への行列多項式前処理の適用では，帯行列への適応性を確認した。

謝辞

本研究にあたり，ご協力をいただいた日本原子力研究所ならびにキャノンスーパーコンピューティングSI（株）に感謝いたします。

参考文献

[1] 田中，寺坂：小規模ブロック化行列の多項式を用いた共役勾配法の前処理手法の開発，情報処理学会論文誌 Vol. 35, No. 8, pp. 1519-1530(1994).

[2] 石黒，鈴木：ノイマン展開法前処理によるCGアルゴリズムのベクトル，並列処理について，情報処理学会研究報告 Vol. 94, No. 51, pp. 25-32(1994).