《論　文》　論 8-2

不完全コレスキー分解による前処理の高速化：ベクトル計算機向き手法の開発†

矢川元基*・赤星保浩*

ABSTRACT The supercomputer allows us to analyze the large-scale problem which can not have been carried out because of the limitation of calculation time so far. In the FDM, we can extract the peak performance of the supercomputer efficiently because a scheme based on the FDM is suitable for the hardware of the supercomputer. On the other hand, the FEM, which can treat arbitrary shapes and boundary conditions, is not suitable for the vector calculating machine because the finite-element subdivision is often irregular. In the present study, we develop a preconditioner suitable for a vector calculating machine in the ICCG method. The usual preconditioner by means of Incomplete Cholesky Decomposition is not suitable for a vector calculating machine because many recursions occur in a preconditioning procedure. Then, we use a finite element which has another node at a center of gravity in the usual serendipity element. Using this element, we could reduce the number of recursions in the precondition.

1. はじめに

偏微分方程式の数値解析手法として，差分法，有限要素法，境界要素法が，構造解析，流体解析，電磁場解析などの多くの分野で応用されている．特に，有限要素法は，任意形状が扱えるだけでなく，非線形性，複雑な境界条件なども容易に扱うことができることから，その適用例は枚挙にいとまがない．また，以前は記憶容量，計算時間の観点から困難であった3次元有限要素解析も，計算機の進歩と計算アルゴリズムの向上により，中規模ながら行われるようになってきた[1)~4)]．しかしながら，3次元有限要素解析では，2次元解析に比べて扱うべき変数が急増するため，大規模な計算を行おうとすると，記憶容量の制約と計算時間が問題となる．記憶容量に関しては，最終的に得られる連立一次方程式の解法に反復解法を用いることにより，大幅に改善することができる．さらに，EBE (Element by Element) 法[5)]を用いて，全体行列を記憶せずに毎回要素行列の作成を行えば，記憶容量の問題は，ほぼ解決することができる．

一方，計算時間に関しては，数 GigaFlops の最大性能を持つスーパーコンピュータの登場により，汎用機の数倍から数十倍の速さで計算できるようになってきた[6)7)]．特に，差分法ではメッシュ分割の規則性を利用することによりスーパーコンピュータの性能を十分に活かすことができる．一方，有限要素法では不規則要素分割を行うことにより任意形状を容易に表現できる反面，分割の仕方に応じて有限要素行列が不規則になるため，ベクトル計算機に適合しにくい部分が発生する．

有限要素法においては，計算時間の大半は連立一次方程式の解法が占めるので，連立一次方程式の解法の高速化が非常に重要となる．3次元解析では，記憶容量と収束の安定性の観点から対称正定値行列に対してはICCG法 (Incomplete Cholesky decomposed Conjugate Gradient Method)[8)]が用いられることが多いので，ICCG法の高速化が望まれる．ICCG法では元の行列の近似行列の逆行列を掛ける前処理部分の計算において回帰的な部分が生じるため，行列全体としてはベクトル計算あるいは並列計算機に向いていない．そこで，前処理行列において回帰性のない部分を一つのグループとして取り出し，このグループ内でベクトル

Improvement of Preconditioner by means of Incomplete Cholesky Decomposition: Development of Scheme Suitable for Vector Calculating Machine. By *Genki Yagawa* and *Yasuhiro Akahoshi* (Department of Nuclear Engineering, Faculty of Engineering, University of Tokyo).
*東京大学工学部原子力工学科
†1988年7月18日受付

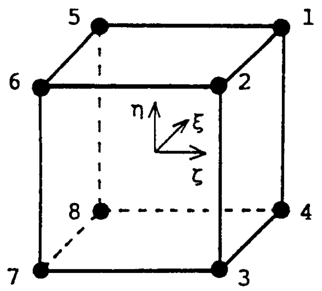
計算を行う Hyperplane 法を有限要素法に適用し，ある程度の加速率を得ている[9]．しかしながら，Hyperplane 法でのベクトル長は，総自由度の2/3乗となり，一方，ベクトルプロセッサの立ち上げ回数は総自由度の1/3乗となるため，行列とベクトルとの積の計算時間に比べて，前処理部分の計算時間の方が大きくなり，ICCG 法全体の加速率の低下および計算時間の増大を招いている．これに対して，*Johnson* らが開発した IICGJ 法（Incomplete Inverse Conjugate Gradient Jacobi Method)[10]はベクトル長が節点数に等しくなり大きな加速率を得られるが，収束性が ICCG 法に比べて安定していないという欠点がある．また，反復一回当りの演算量は，ICCG 法の倍であるので，計算時間は，ICCG 法よりもかなり大きくなる[9]．

本論文では，Serendipity 要素の重心にさらにもう一節点設けた要素を用いることにより，前処理部分におけるベクトル長を要素数と同じにすることができ，前処理部において大きな加速率を得ることが可能となった．さらに，前処理行列に対して行列の対角集中化を行うことにより，通常の ICCG 法に比べて演算量が少なくなるので，計算時間の短縮を図ることができた．

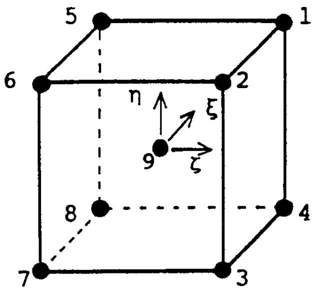
2. 理　論

2.1 有限要素

図 1(a)に示すような Serendipity などの通常の有限要素では，隣の要素との結合が密であり要素間で独立した節点がないために，全体マトリックスを解く際に回帰的な部分の発生の割合がかなり多い．このため，Hyperplane 法を用いたとしても，前処理部分のベクトル長は節点数に比べて短いためベクトル計算機上で最大性能に近い加速率を得ることができない．そこで，本研究では前処理行列における回帰的な部分を減らすという目的で，図 1(b)に示すように Serendipity 要素に重心節点を付け加えた要素を用いている．この要素では，重点節点が隣の要素の重心節点と直接結合していないため，全体マトリックスを解く際に回帰的な部分の発生の割合が少なくなる．特に，重心節点同士の回帰的部分は全く生じない．この性質を利用して，回帰性のほとんどない前処理を行うことができる．



(a) 8 節点要素



(b) 9 節点要素

図 1　有限要素

2.2 集中化

図 1(b)に示すような要素を用いても，重心節点以外の部分では，図 1(a)の要素を用いた場合と同様に回帰的な部分が非常に多い．そこで，重心節点付き要素を用いて作成される全体マトリックスにおいて，重心節点に関する部分を除いて対角集中化を行う．対角集中化は，

$$d_i=\sum_{j=1}^{NP} a_{ij}\ (i=1\sim NP) \tag{1}$$

$$d_i=a_{ii}\ (i=NP+1\sim NP+NE) \tag{2}$$

$$b_{ij}=0\ (i,j=1\sim NP,\ i\neq j) \tag{3}$$

$$b_{ij}=a_{ij}\ (i=NP+1\sim NP+NE,\ j=1\sim NP,\ i=1\sim NP,\ j=NP+1\sim NP+NE) \tag{4}$$

で与えられる．

ただし，d_i：　対角集中化後の対角成分

a_{ij}：　元の行列の成分

b_{ij}：　対角集中化後の非対角成分

NP：　重心節点を除く節点数

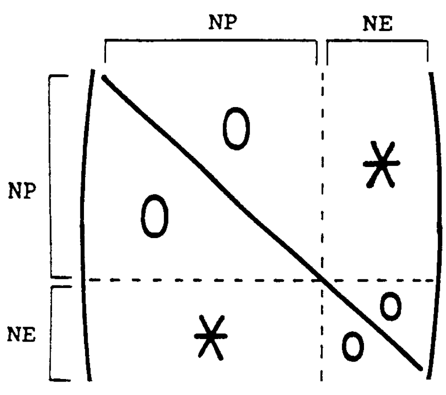


図 2　対角集中化された行列の構造

NE：　要素数

（$NP+NE$：全自由度数）

このような処理により得られる前処理行列は，図2のような構造をしている．この行列を作成するのに要する時間は，連立一次方程式を解くのに必要な時間に比べてかなり小さく，無視することができる．また，新たに必要になる配列は，対角成分を記憶するのに必要となる分だけである．

2.3　ICCG 法[8)9)]

3次元解析では，2次元解析に比べて全体マトリックスの大きさがかなり大きくなるので，Skyline 法などの直接解法では計算機の記憶容量の制限を越えてしまうことがある．そこで，このような大規模なマトリックスを解く解法として，反復解法が開発されている．その中で，特に収束性が安定しているのが *Meijerink* らが開発した ICCG 法である．最近では，この ICCG 法はかなり広い分野で連立一次方程式の解法として利用されてきている．以下に，ICCG 法のアルゴリズムを示す．

有限要素式は，最終的に次のような連立一次方程式に帰着される．

$$Ax=b \tag{5}$$

ここで，A は有限要素行列，b は境界条件などを含む右辺ベクトルである．行列 A の近似行列を M とすると，ICCG 法の第一ステップは，次のようになる．

$r_0:=b-Ax$

$p_0:=M^{-1}r_0$

ここで，r は残差ベクトル，p は探査ベクトルである．第二ステップは，

$k:=0$

while $\varepsilon>10^{-6}$

begin

$\alpha_k:=(M^{-1}r_k, r_k)/(p_k, Ap_k)$

$x_{k+1}:=x_k+\alpha_k p_k$

$r_{k+1}:=r_k-\alpha_k Ap_k$

$\beta_k:=-(M^{-1}r_{k+1}, Ap_k)/(p_k, Ap_k)$

$p_{k+1}:=M^{-1}r_{k+1}+\beta_k p_k$

$\varepsilon:=|r_{k+1}|/|b|$

$k:=k+1$

end

である．ここで，(　,　) は内積を，|　| はノルムを意味する．反復計算は相対誤差 ε が収束判定値 10^{-6} 以下になるまで行う．通常の ICCG 法では行列 M に元の行列 A の不完全コレスキー分解された行列を用いるのに対して，本手法では2.2節で述べた対角集中化された行列の不完全コレスキー分解された行列を用いる．

2.4　不完全コレスキー分解

ICCG 法では，前処理の部分に M の完全な逆行列を用いるのではなく，次のような対角成分だけを修正された（不完全コレスキー分解）行列を用いる．

$$d_i=\left(\sigma a_{ii}-\sum_{j=1}^{i-1}a_{ij}^2 d_j\right)^{-1}\quad(i=1\sim N) \tag{6}$$

ここで，d_i は前処理用行列の対角成分，N は全自由度，$\sigma(\geqq 1)$ は加速係数である．σ の最適値については，数値実験結果を3.2節において示す．

3.　数値実験例

3.1　解析対象

本論文では，簡単な解析問題として，ポテンシャル問題を考える．支配方程式および境界条件は次のとおりである．

$$\kappa\Delta\phi=0\qquad \text{in}\,\Omega \tag{7}$$

B.C.

$$\phi=\bar{\phi}\qquad \text{on}\,\Gamma_1 \tag{8}$$

$$\frac{\partial}{\partial n}\phi=\bar{q}\qquad \text{on}\,\Gamma_2 \tag{9}$$

ここで，n は法線方向を，$^-$ は既知量であることを示す．

3.2　加速係数の最適化

2.4節で述べた不完全コレスキー分解における加速係数 σ の最適値を数値実験により求める．解析対象としては均質な正方領域を考え，有限要素分割は等分割とし，要素数は1000（10×10×10），総節点数は2331である．このときの加速係数 σ と，ICCG 法および本手法の収束までに必要な反復回数との関係を図3に

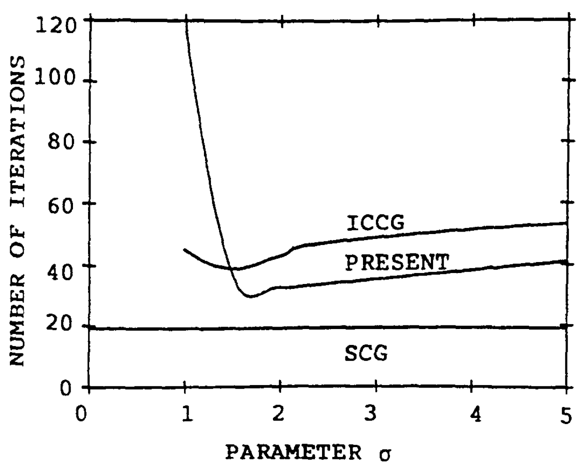


図3　加速係数の影響

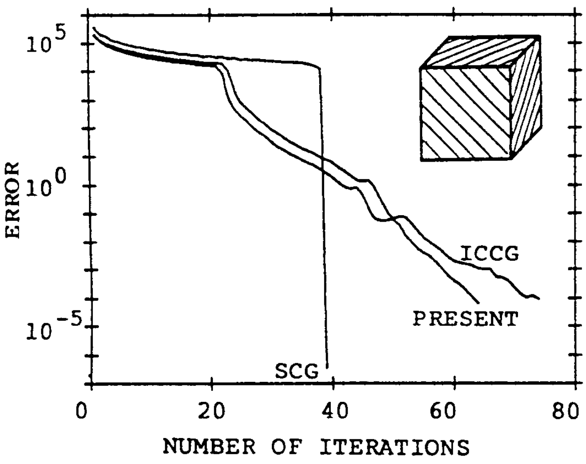
示す．参考のために，CG法に対角スケーリングを施したSCG法（Scaled Conjugate Gradient Method）の反復回数も図3に示す．図3からICCG法も本手法も加速係数の最適値は1.5～2.0の範囲にあることが分かる．この値より大きいとき，両手法の収束性は安定している．SCG法は，加速係数σを含まないので収束回数は一定である．3.3，3.4節での解析において，ICCG法の加速係数σの最適値を1.5，本手法の最適値を2.0とする．

3.3 正方領域における収束性

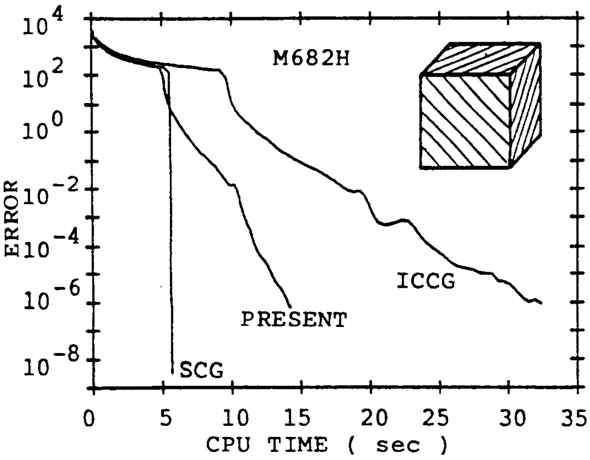
3.2節と同様に正方領域で，等分割とした場合を考える．要素数は8000(20×20×20)，節点数は17261である．①全領域を均質とした場合と，②要素1000(10×10×10)の部分と残りの要素7000の部分のκが異なる場合との収束の様子を比較する．

① 均質な場合

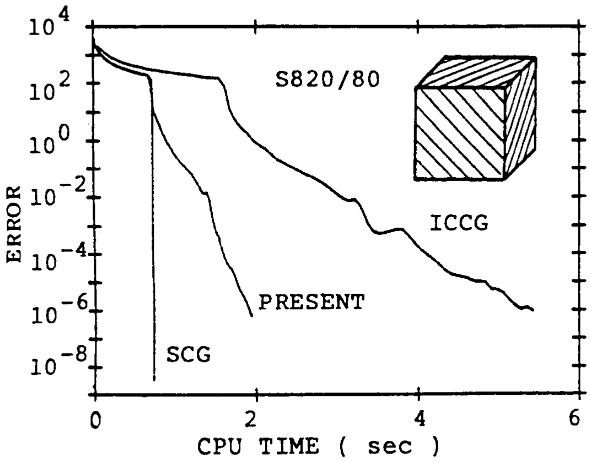
本手法，ICCG法，SCG法における相対誤差と反復回数との関係を図4(a)に示す．この問題では，有限要素行列の固有値分布がかなり縮退していると考えられるので，三者の内最も少ない反復回数でSCG法が収束している．一方，本手法とICCG法とは，ほとんど同じ収束性を示している．本手法とICCG法の収束性がほぼ同じとなったのは，解析対象が均質で要素分解が等分割であるので，対角集中化の近似がかなり良い近似となっているためと考えられる．汎用計算機M682Hを用いた場合の，相対誤差と計算時間との関係を図4(b)に示す．反復回数と反復一回当りの演算量が最も少ないSCG法が，全計算時間も最も少なくなっている．その次に演算量が少ない本手法が，二番目に全計算時間が少なくなっている．ICCG法は，三者の中で最も演算量が多いので，全計算時間も多くなっている．図4(c)にスーパーコンピュータS820/80を用いた場合の，相対誤差と計算時間との関係を示す．図4(b)と比較すると，M682Hの場合と同じ順番で計算時間が短くなっている．**表1，2**に本手法とICCG法における前処理部分（$M^{-1}r$）と，行列とベクトルとの積部分（Ar，以後本処理と呼ぶ）との計算時間の比較を示す．表1において，前処理部と本処理部との比が0.61(M682H上）であることから，本手法の前処理部の演算量が少ないことが確認できる．また，M682H上で0.61であるのがS820/80上で0.21であることから，前処理部が本処理部に比べてベクトル計算機に向いていることが分かる．このことは，本処理部が17.8倍に加速されているのに対して，前処理部が52.4倍に加速されていることからも分かる．一方，表2において，本処理部が17.8であるのに対して，前処理部は4.8倍とあまり加速されていない．これは，回帰的な部分が多いため，ベクトル長が短く



(a) 収束の様子



(b) M682Hによる計算時間



(c) S820/80による計算時間

図4 均質領域

表1　本手法の加速率
(M, A は行列，r はベクトル)

	M682H	S820/80	ratio
$M^{-1}\cdot r$	1.68	0.03	52.4
$A\cdot r$	2.77	0.16	17.8
ratio	0.61	0.21	

表2　ICCG 法の加速率

	M682H	S820/80	ratio
$M^{-1}\cdot r$	10.00	2.05	4.8
$A\cdot r$	3.17	0.18	17.8
ratio	3.15	11.53	

ベクトルプロセッサの立ち上げ回数が多くなっているためである．表1, 2より，本手法の前処理部分がベクトル計算機に適合しており，高い加速率が得られていることが分かる．

② 不均質な場合

①では均質な場合について数値実験を行ったが，固有値が縮退していたのでSCG法の反復回数が最も少なくなった．そこで，固有値分布が比較的バラ付いていると考えられる不均質な場合の数値実験を行う．要素分割は①と同じとし，1000要素と残りの7000要素のκを変える($\kappa_{1000}=10^7$, $\kappa_{7000}=1$)．本手法，ICCG法，SCG法の相対誤差と反復回数との関係を図5(a)に示す．この場合は，均質な場合と比べて，有限要素行列の固有値分布が広がっているので，SCG法の反復回数が最も多く，本手法とICCG法の反復回数はそれに比べて少ない．本手法とICCG法の反復回数がほぼ同じであることから，対角集中化による近似が有効であることが分かる．S820/80上で実行した場合の，相対誤差と計算時間との関係を図5(b)に示す．この場合，均質な場合と同様にICCG法の計算時間が最も大きく，本手法とSCG法の計算時間は同程度で，ICCG法の約半分となっている．

3.4 不規則分割領域

3.3節では，等分割の要素分割を用いたが，本節では不規則分割に対する対角集中化の有効性を検証する．要素分割は，粗い場合と細かい場合の2種類を用いる．解析モデルとして，CT試験片（貫通き裂付き）を取り上げる．固定境界条件は，

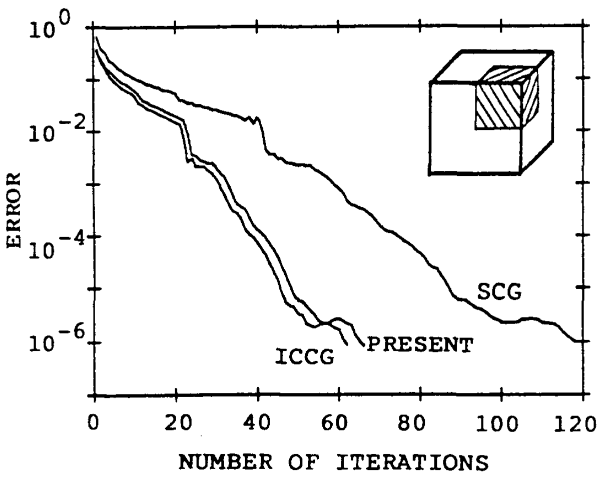
$$\phi(115\leqq X\leqq 200,\ Y=0,\ 0\leqq Z\leqq 20)=0 \qquad (10)$$

$$\phi(X=200,\ Y=100,\ Z=20)=1 \qquad (11)$$

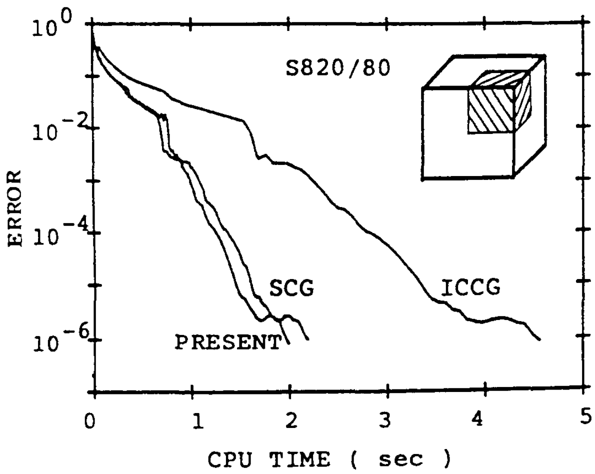
である．その他の境界面上では，自然境界条件を課す．

① 粗い要素分割

図6に解析に用いたCT試験片の寸法と要素分割を示す．要素分割は，Z方向は一層とし，1/2対称性を利用する．要素数は252，節点数は826である．このときの本手法，ICCG法，SCG法の収束の様子を図7(a)に示す．本手法およびICCG法の反復回数は，SCG法の2/3程度である．これは，要素分割が不規則である分だけSCG法の反復回数が多くなっている．しかし，その反復回数がICCG法の1.5倍程度で済んでいるのは全自由度数が比較的小さいからである．図7(b)にS820/80を用いた時の相対誤差と計算時間を示す．本手法はICCG法よりかなり速く，SCG法より少しだけ速くなっている．



(a) 収束の様子



(b) S820/80による計算時間

図5　2領域問題

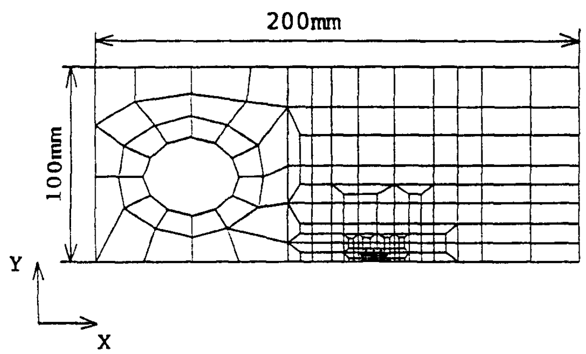


図6　CT 試験片要素分割
（要素数252，節点数826）

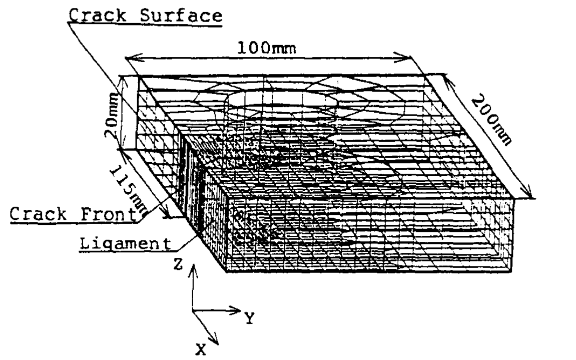
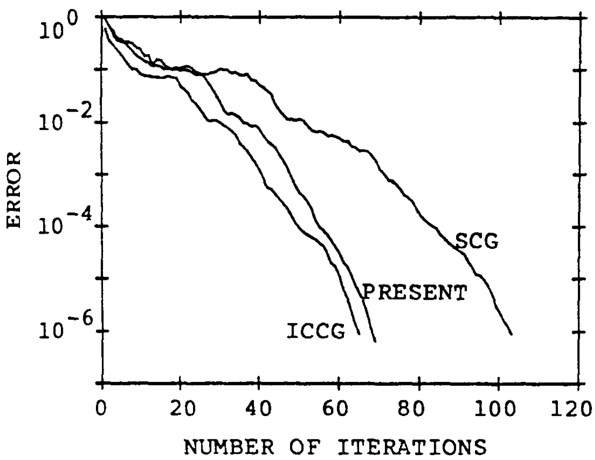
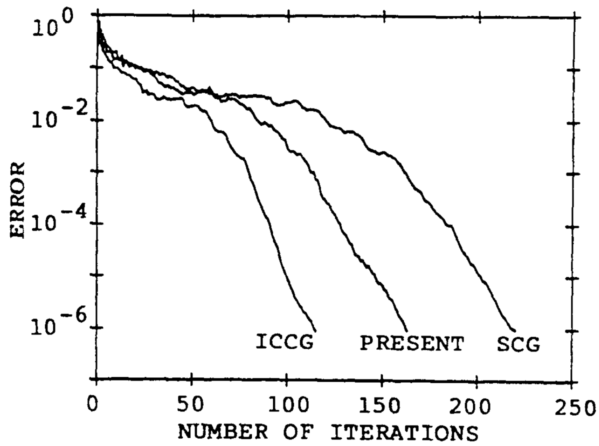


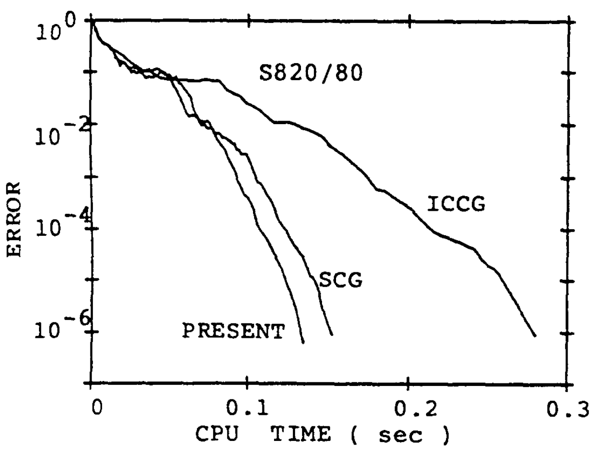
図8　CT 試験片要素分割図
（要素数3475，節点数7945）



(a)　収束の様子

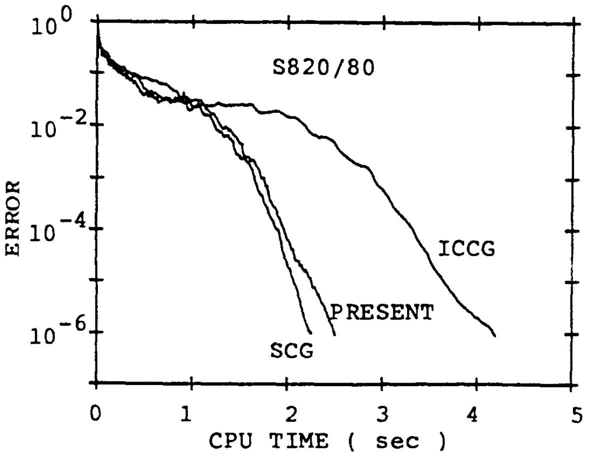


(a)　収束の様子



(b)　S820/80 による計算時間

図7　粗い要素分割による場合



(b)　S820/80 による計算時間

図9　細かい要素分割による場合

② 細かい要素分割

図8に①と同じ CT 試験片を細かく要素分割した場合の要素分割の様子を示す．ここで，要素数は3475，節点数は7945である．このときの本手法，ICCG 法，SCG 法の収束の様子を図9(a)に示す．自由度がかなり大きく，要素分割が不規則であるため，本手法の反

復回数はICCG法の1.5倍，SCG法は2倍となり，ICCG法の反復回数に比べてかなり大きくなっている．これから，本手法における対角集中化近似にはある程度の限界があることが分かる．図9(b)にS820/80を用いたときの相対誤差と計算時間を示す．計算時間は本手法とSCG法がICCG法に比べて約半分であることが分かる．これから，不規則で細かい要素分割の場合でも，本手法が有効であることが理解できる．

3.5 考　察

3.3，3.4節の数値実験の結果をまとめると，以下のようになる．

• 等分割の場合は，均質，不均質に関係なく，対角集中化が有効に働き，本手法とICCG法との反復回数はほぼ同じである．一方，計算時間は反復回数が同程度であるので，演算量が少なく加速率の大きい本手法の方が短くなっている．

• 不規則分割の場合，自由度数が少ない時は本手法とICCG法との反復回数はほぼ同じであるが，自由度数が増大すると対角集中化近似の限界を越えるため，本手法の反復回数はICCG法に比べある程度増える．しかし，SCG法の反復回数よりは少ない．また，計算時間に関しては，自由度数の増大に伴ってICCG法の演算量が本手法より多くなるので，本手法の方がICCG法よりも短い．

本手法は，ICCG法の前処理部のみを改良したので反復回数が同じ場合でも，計算時間はせいぜい半分程度にしかならない．したがって，より高速に連立一次方程式を解くためには，反復回数がICCG法より少なくなるような前処理が必要である．

4. 結　論

本研究では，Serendipity要素の重心に，さらにもう一節点設けた要素を用い，重心節点部分を除いて集中化して得られたマトリックスを前処理用のマトリックスとして用いることにより，前処理部分をベクトル計算機向きに改良した．本手法を等分割（均質，不均質）の場合，不規則分割の場合に適用し，その有効性を確認した．本手法の特徴は，マトリックスの対角集中化を行なうことにより，前処理部分の回帰性が減少すること，ベクトル長が要素数と一致すること，演算量がかなり低減化されることである．

参 考 文 献

1) 矢川、赤星：核融合炉（FER）内の3次元渦電流解析，第9回計算電気電子工学シンポジウム論文集，125/128 (1988)

2) 中田，高橋，藤原，岡田：非対称穴あき導体の3次元渦電流解析，第9回計算電気電子工学シンポジウム論文集，119/124 (1988)

3) G. Yagawa and Y. Akahoshi: A Finite Element Analysis of Eddy Current Distribution for Large-Scale Structure: Application of ICCG Method, Computers in Engineering 1988, Vol. 3, ASME, 661/666 (1988)

4) 村田他編著：工学における数値シミュレーション，丸善 (1988)

5) J. M. Winget and T. J. R. Hughes: Solution Algorithms for Nonlinear Transient Heat Conduction Analysis Employing Element-by-Element Iterative Strategies, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 52, 711/815 (1985)

6) 村田，小国，唐木：スーパーコンピューター科学技術計算機への適用―，丸善 (1985)

7) S. Fernbach (長島訳)：スーパーコンピューター，パーソナルメディア (1988)

8) J. A. Meijerink and H. A. Van der Vorst: Iterative Solution Method for Linear Systems of Which the Coefficient Matrix is a symmetric M-matrix, Mathematical Computation, 31, 148/162 (1977)

9) 後：ベクトル計算機向きICCG法，数理解析研究所講究録，514, 110/134 (1984)

10) O. G. Johnson and G. Paul: Vector Algorithms for Elliptic Partial Differential Equations based on the JACOBI Method, Elliptic Problem Solvers, Academic Press, 345/351 (1981)