

第 4 章

周期境界問題に対する Rotated ALU 分解法を適用するための前処理法

本章では，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線形方程式に対し，ベクトル計算機向きの解法 Rotated Alternative LU (Rotated ALU) 分解法を適用するための前処理法を提案する．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，本問題への直接の適用は困難である．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 分解を適用する前処理を考える．数値実験をとおして，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．

4.1 はじめに

3 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，4 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 (4.1) のとおりである．ただし， $A_{j,k}^i, B_{j,k}^i, C_{j,k}^i, D_{j,k}^i, E_{j,k}^i$ ($i = 1, \dots, l; j = 1, \dots, m; k = 1, \dots, n$) は， 5×5 小行列である．

から求められる．ここで，

$$\mathbf{y}_{j,k} = P^{-1}\mathbf{b}_{j,k}, \quad (4.10)$$

$$Z = P^{-1}U, \quad (4.11)$$

$$Z = [Z_1 Z_2],$$

$$\begin{bmatrix} W_1^T \\ W_2^T \end{bmatrix} = \left(I + \begin{bmatrix} V_1^T \\ V_2^T \end{bmatrix} [Z_1 Z_2] \right)^{-1} \begin{bmatrix} V_1^T \\ V_2^T \end{bmatrix} \quad (4.12)$$

である．

式 (4.9) により式 (4.2) は， P を係数行列とする線形方程式 (4.10)(4.11) を解くことに帰着されることがわかる¹．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良い．本研究では，この解法を Split/SMW+Rotated ALU 分解法と呼ぶ．

4.5 数値実験

ここでは，式 (4.1) を係数行列にもつ線形方程式に対して，式 (4.3) で分解される従来の 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．

4.5.1 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 (4.5) の P と $(I + V^T P^{-1}U)$ が正則となるよう作成した．真の解 $\mathbf{x}_{j,k}$ は，乱数を用いて作成した．右辺項 $\mathbf{b}_{j,k}$ は， $\hat{G}_{j,k} \mathbf{x}_{j,k}$ と式 (4.2) 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 (4.1)．本実験では， j 方向をベクトル化した．

時間計測は，式 4.3 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(IEEE アーキテクチャ) の 1PE を用いた．

4.5.2 実験結果

計算時間を，図 4.1 に示す．横軸は j 方向の要素数 (m) を表し，縦軸は計算時間 [sec] を表しており，表 4.1 の各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

¹ 式 (4.12) は (2 ブロック) × (2 ブロック) の線形方程式であり，ブロック LU 分解を用いて計算した．

表 4.1: 実験モデル.

l	63	63	63	63	63	63	63	63
m	40	60	80	120	160	240	300	480
n	60	40	30	20	15	10	8	5

をグラフにしたのが、図 4.2 であり、その値も記載した。(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.

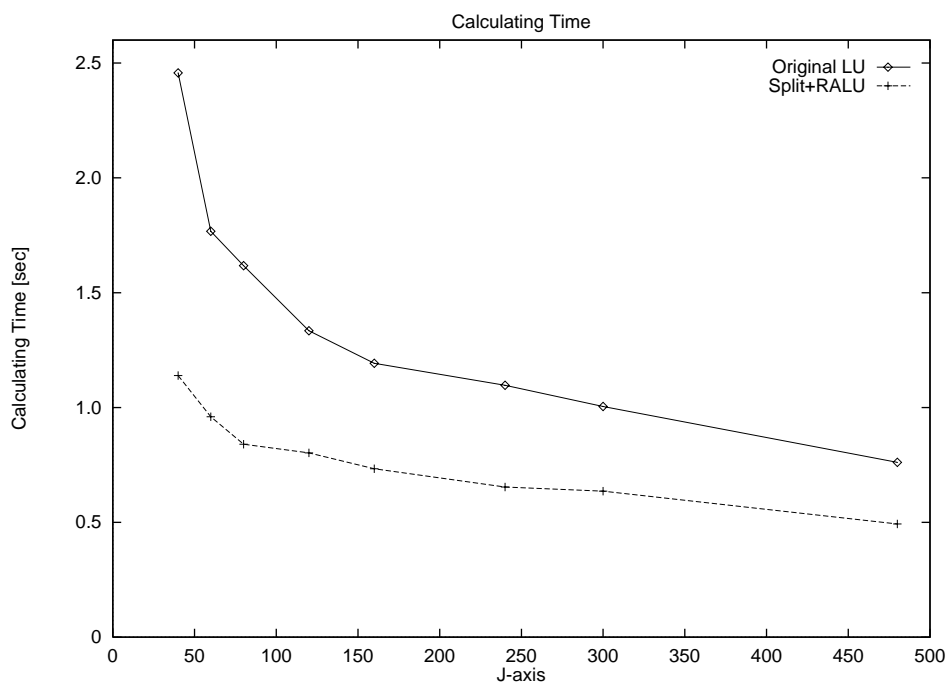


図 4.1: 従来の LU 分解法と Split/SMW+Rotated ALU 分解法との計算時間の比較.

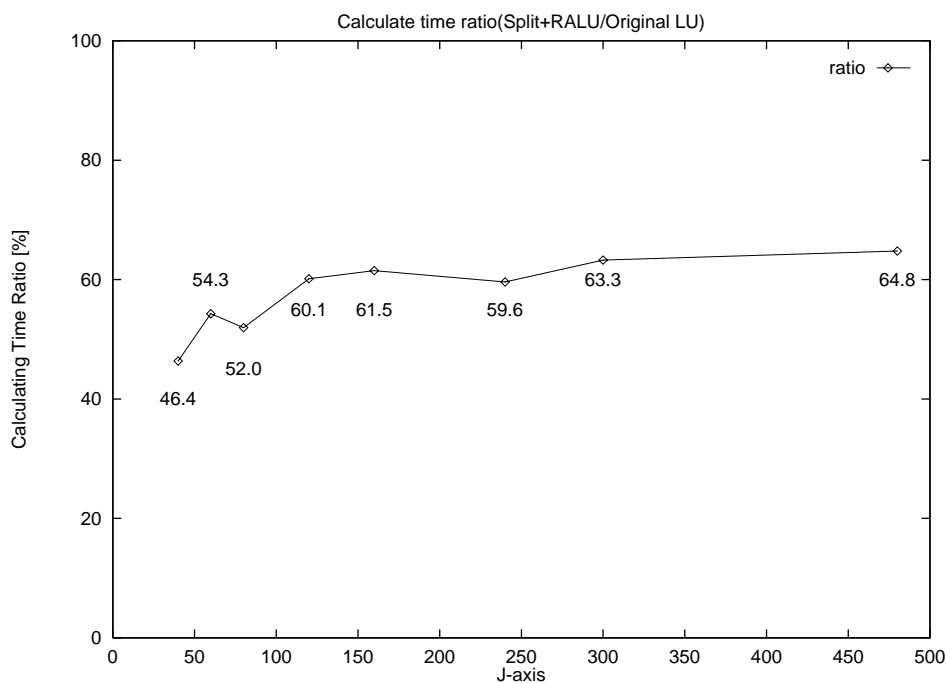


図 4.2: 従来の LU 分解法と Split/SMW+Rotated ALU 分解法との計算時間比.

解の精度に関して, 単精度で計算を行ったところ, 表 4.1 の全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 (4.13) 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. これは, IEEE アーキテクチャの単精度におけるマシンプレシジョン $\varepsilon_M = O(10^{-7})$ と比較しても十分な精度である [41].

$$\frac{\|\mathbf{x}_{j,k} - \bar{\mathbf{x}}_{j,k}\|_2}{\|\mathbf{x}_{j,k}\|_2} \sim O(10^{-6}) \quad (4.13)$$

$\mathbf{x}_{j,k}$: 真の解, $\bar{\mathbf{x}}_{j,k}$: 数値解

4.6 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線形方程式を解く場合, 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前処理を提案した. 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から確認された.

この成果は文献 [26] として掲載された.