I-3　前処理付共役勾配法の特性についての一検討

東京工業大学　正員　野村卓史
東京工業大学　正員　吉田　裕
新日本製鉄　正員　能勢哲郎

1．はじめに

非線形問題あるいは非定常問題の有限要素解析は，通常，連立一次方程式を繰返し解いて逐次的に解き進める過程がとられる。コンピュータの計算能力は，特にスーパーコンピュータの出現によって急速に向上しつつあるが，限られた記憶容量の範囲でいかに大きな次元の連立一次方程式をいかに効率よく解くことができるかということは常に重要な問題である。連立一次方程式の解法は反復法と直接法とに大別される。反復法の系統は解を得るための演算回数が確定せず，解くべき方程式の係数行列の性質によっては収束に困難を生じることのあることが欠点であるが，直接法と比較して記憶容量の点で有利であることから見直されつつある。特に共役勾配法の収束性の向上を図った前処理付共役勾配法は注目されている解法の一つである。この解法を有限要素方程式に適用した場合の特性について具体的な解析例に基づいて検討したので，ここに報告する。

2．前処理付共役勾配法について

共役勾配法（以下ＣＧ法）によって連立一次方程式 $Ax=b$ を解く際に，係数列Ａの固有値が密集している場合には方程式の元数よりも少ない数の反復計算で解が得られる。前処理付共役勾配法（以下ＰＣＧ法）はこの性質を積極的に利用しようとする解法である。ここでは前処理として不完全コレスキー分解（$A=U^T U+R$；$R\neq0$，Ｕは上三角行列）を用いる場合を対象とする。すなわち行列 Ｕ は，非ゼロ成分のみから成る行列 Ａ に対して，もともと係数がゼロであった個所に生じる fill－in を無視してコレスキー分解を適用することにより作成される。

ちなみにＮｘＭ節点（Ｎ≦Ｍ）の長方形領域の問題（１節点１自由度）を解くために必要な係数行列の記憶領域は

Skyline 法：　$(M-1)N^2+2MN-M$　語　（行列Ａ）

ＰＣＧ法　：　$\{10+7(N+M-2)+5(N-2)(M-2)\}\times2$　語　（行列ＡとＵ）

のようになる。Ｎ≧８の範囲では Skyline法の方が多くの語数を必要とし，バンド幅Ｎの２乗のオーダーで増加するため，同じ記憶容量ではＰＣＧ法の方がはるかに大きな問題を解くことが出来ることになる。

3．収束の状況と計算時間について

図１はＰＣＧ法によって問題を解く場合に収束解の得られる状況，およびそれに要する計算時間などを調べる目的で行った有限要素解析の一例で，２次元定常熱伝導解析に用いた有限要素モデルである。解析対象の内外は流体にさらされており，流体との間の熱伝達率を高低２種類設定した。１節点１自由度で6795節点，6232要素から成る。この問題の係数行列を記憶するために必要な記憶容量はＣＧ法で 258KB，ＰＣＧ法で 516KB，Skyline 法の場合は節点番号の振り方によるが１つの試算では約 3.5MBになる（ただし８バイト実数）。

この問題をＣＧ法とＰＣＧ法によって解いた（東大大型計算機センターHITAC S810 による）。図２は解が収束する状況を，収束判定規準で参照する残差ベクトルのノルム比 ρ によって示す。図２によれば，この問題では境界での熱伝達率を小さくすると，ＣＧ法，ＰＣＧ法のいずれの場合でも収束にいたるまでの反復計算回数が増しており，また初期において残差が減少しにくい領域が現れる。これは設定した熱伝達率のオーダーが相対的に相当小さいことの影響である。同様な収束し難さは，例えば解析対象領域内にさまざまなオーダーの熱伝導率から成る部分を混在させた場合の解析例でも生じた。図２に代表されるように，ＣＧ法で収束しにくかった問題はＰＣＧ法でも収束しにくく，ＰＣＧ法によって収束に至る過程が抜本的に改善さ

れることはなかった。

図２によれば，前処理の効果によって反復計算の回数は２ケースとも 1/5程度に低減されている。しかしＰＣＧ法の計算過程にはＣＧ法と比べて次の２つの過程に余計な計算時間を必要とする：（ａ）前処理の不完全コレスキー分解，（ｂ）反復計算１回につき１度の後退代入計算。表１は実際にかかった計算時間を示したものであるが，（ｂ）の後退代入のために１回の反復計算に要する計算時間はＰＣＧ法ではＣＧ法の約６倍となった。これに不完全コレスキー分解の過程を加えると，全体としての計算時間はＰＣＧ法の方がＣＧ法より相当多い結果となった。ここに示した結果は，係数行列の記憶方法が不完全コレスキー分解に対して最適ではなく，そのためにベクトル演算による加速があまり利いていない。プログラムの改良によってその差をさらに縮めることは可能であるが，いずれにしても，ＰＣＧ法の効率を評価する際には，単に収束計算回数が減る点にのみ注目するのではなく，計算時間も考慮した上で判断すべきであることが指摘できる。

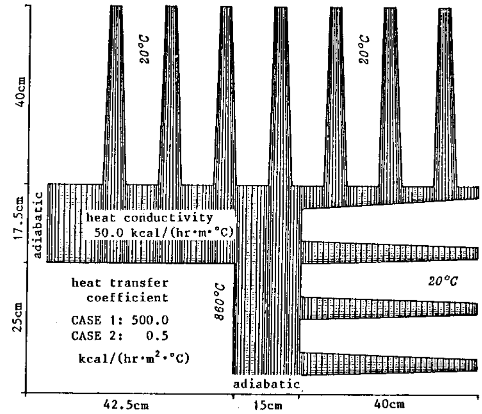

図１　検討のための有限要素モデル

４．おわりに

ＰＣＧ法の適用について検討したが，ＣＧ法で収束しにくい問題に対しては同じように収束しにくくなること，および，最適なプログラミングによる結果ではないが，前処理の過程および反復計算ごとの後退代入計算にかなり時間がかかること，そのためＣＧ法と比べて反復計算の回数は少なくなっても，全体的な計算時間は必ずしも有利とは限らないこと，などの結果が得られた。

１）村田健郎：『科学技術計算と高速算法』，Computer Today，NO.2，1984，pp.51-61.
２）村田，小国，唐木：『スーパーコンピュータ』，丸善，1985.
３）Maijerink and van der Vorst: Math. Comp.，Vol.31，pp.148-162.

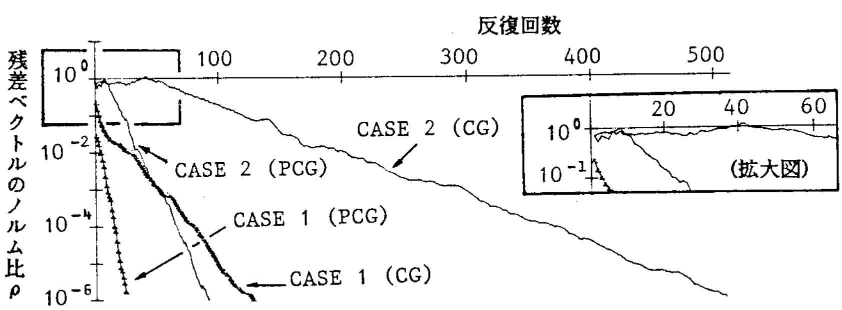

図２　解が収束する状況

表１　計算時間の実例 (HITAC S810 による CPU-Time)

	解法	前処理過程	反復計算回数	反復計算の全過程	反復計算1回当り	全ての計算過程
ＣＡＳＥ　１	ＣＧ法	－	129 回	4.0 秒	0.031 秒	9.2 秒
	ＰＣＧ法	583 秒	26 回	4.6 秒	0.177 秒	588.0 秒
ＣＡＳＥ　２	ＣＧ法	－	511 回	16.0 秒	0.031 秒	21.1 秒
	ＰＣＧ法	583 秒	93 回	15.9 秒	0.177 秒	598.6 秒