

消去演算の違いによる数値誤差の一検討

A CONSIDERATION ON NUMERICAL ERROR ACCORDING TO ELIMINATION METHODS FOR LINEAR ALGEBRAIC EQUATIONS

谷口健男*・曾我明**

By Takeo TANIGUCHI and Akira SOGA

The application of the finite element method to structural analysis generally requires to solve a large and sparse set of linear equations, but it is well known that the reliability of the solution becomes low as the increase of the dimension of the linear system. The purpose of this investigation is to show how to prevent the development of the numerical error according to the elimination procedure. Through the theoretical investigation we show that the numerical error is governed by the conditioning number of the governing equation and also of matrices appearing during the elimination procedure. Successive experimental study concludes that the appropriate elimination ordering may decrease the error by an order of magnitude. Some other important informations on the elimination ordering are also given in this paper.

1. まえがき

近年、電子計算機の発達とともに、構造解析においては有限要素法が主流となってきた。一般にこの手法の適用は線形な大規模疎行列の問題に帰着するが多く、その解法としては、主に消去法をベースとした各種効率のよい解法、たとえば中・小規模の系に対しては帶行列法、スカイライン法が、また大規模な系に対してはウェーブフロント法などがよく用いられている。

しかしながらこの手法の性格上、系をより細かなメッシュで分割すればするほどよい近似解が得られる反面、元数の増加等の影響により、得られた方程式を解くうえで発生する数値誤差は大きくなる。その防止策に関しては、理論および数値実験の両側面よりの研究がなされ^{2)~6)}、倍精度計算の必要性³⁾、計算法の変更²⁾、消去順序の改良¹⁾等が提案されているものの、実際に数値解を出す者にとって、次に示される疑問に対しての解答は与えられていない。

(1) 一般的な意味での消去演算に関する誤差解析であって、上述したような各種計算法で発生する数値誤差

の差異がどうえられておらず、詳細は不明である。

(2) 上述の各種計算法を用いておののの計算の利用効率を上げるために消去順序を考慮しなければならず、構造系の有するトポロジー(有限要素メッシュの節点間の隣接関係)によってはそれぞれ違った消去順序をとる場合も生じる。このとき、その消去順序と解の精度との関連は不明である。

発生する数値誤差は対象となる係数行列の特性、用いる計算法、とその利用法(消去順序)に依存すると考えられる。本研究では、それらのうち、計算法およびそれを効果的に適用する場合問題となる消去順序と数値誤差との関係に限定して、上記(1)、(2)の問題点に対する判断材料を与えようとするものである。研究対象としての計算法は構造解析の分野で最もよく利用される帶行列法、スカイライン法、ウェーブフロント法を用いている。

2. 消去演算における数値誤差

前節でも述べたように、消去演算における数値誤差を抑制する手段として、今日さまざまな方法が提案されているが、ここではそれらのうち、分割解析と消去順序の違いを取り上げ、それらの理論的背景に検討を加えてみる。

* 正会員 工博 岡山大学助教授 工学部土木工学科
(〒700 岡山市津島中3-1-1)

** 学生会員 岡山大学工学研究科修士課程 (同上)

$$\frac{\|\delta z\|}{\|z\|} \leq X(D) \left(\frac{\|\delta D\|}{\|D\|} + \frac{\|\delta y\|}{\|y\|} \right) \left(1 - X(D) \frac{\|\delta D\|}{\|D\|} \right)^{-1} \quad \dots \dots \dots (17)$$

同様にして式(15・c)を解くとき、最終的な解 x に含まれる誤差は、

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \leq X(L^T) \left(\frac{\|\delta L^T\|}{\|L^T\|} + \frac{\|\delta z\|}{\|z\|} \right) \left(1 - X(L^T) \cdot \frac{\|\delta L^T\|}{\|L^T\|} \right)^{-1} \quad \dots \dots \dots (18)$$

したがって式(16)～(18)より、式(1)を消去演算で解いたときの解 x に含まれる誤差は、下式のようになる。

$$\begin{aligned} \frac{\|\delta x\|}{\|x\|} &\leq X(L)X(D)X(L^T) \left(1 - X(L^T) \frac{\|\delta L^T\|}{\|L^T\|} \right)^{-1} \\ &\quad \left(1 - X(D) \frac{\|\delta D\|}{\|D\|} \right)^{-1} \cdot \frac{\|\delta L\|}{\|L\|} + X(L^T)X(D) \\ &\quad \cdot \left(1 - X(L^T) \frac{\|\delta L^T\|}{\|L^T\|} \right)^{-1} \left(1 - X(D) \frac{\|\delta D\|}{\|D\|} \right)^{-1} \\ &\quad \cdot \frac{\|\delta D\|}{\|D\|} + X(L^T) \left(1 - X(L^T) \frac{\|\delta L^T\|}{\|L^T\|} \right)^{-1} \cdot \frac{\|\delta L^T\|}{\|L^T\|} \end{aligned} \quad \dots \dots \dots (19)$$

ここで、もし

$$X(L^T) \frac{\|\delta L^T\|}{\|L^T\|} \ll 1, \quad X(D) \frac{\|\delta D\|}{\|D\|} \ll 1$$

ならば、式(19)はさらに簡単になり、下式で評価できる。

$$\begin{aligned} \frac{\|\delta x\|}{\|x\|} &\leq X(L)X(D)X(L^T) \frac{\|\delta L\|}{\|L\|} \\ &\quad + X(L^T)X(D) \frac{\|\delta D\|}{\|D\|} + X(L^T) \frac{\|\delta L^T\|}{\|L^T\|} \end{aligned} \quad \dots \dots \dots (20)$$

これより、解の相対的誤差は元の係数行列の条件数よりもむしろ、分解後の成分行列 L, D, L^T の条件数と関係があるといえる。これは式(12)に示したとおりである。したがって消去演算において、消去順序を考慮することによって分解後の成分行列の条件数を変化させることができれば、解に混入する数値誤差を抑制できることを式(19)、(20)は示しており、消去順序が数値誤差制御の重要な手段であるといえる。

3. 数値実験

1. で挙げた問題点に対して検討するために、ここでは連立一次方程式の解法として、帶行列法、スカイライン法、ウェーブフロント法を取り上げ、各種解法の差異を調べてみる。また、理論的に解の精度向上に有効であるとされる分割消去や消去順序が、実際に有限要素法を利用する立場にたったとき、どの程度の効果を期待できるのか、数値実験を通して検討を行う。

(1) 準備

a) 誤差評価

消去演算によって解に発生した数値誤差の評価として

は、計算機主体に考えて解の有効桁数を取り上げる。評価式は次式によって求まる相対誤差の最大値でもって比較する。

$$\text{Error} = \max_{i=1}^n \frac{|x_i(D) - x_i(S)|}{|x_i(D)|} \quad \dots \dots \dots (21)$$

ここで、 $x_i(D)$ と $x_i(S)$ はそれぞれ倍精度、および単精度演算による i 番目の解を示す。倍精度解は十分信頼できることを確かめたうえでそれを真値として扱う。なお、数値実験に使用した計算機は ACOS システム 1000 モデル 20 で、単精度演算は 36 bit で有効桁数は約 8 桁、倍精度演算は 72 bit で有効桁数約 18 桁である。計算機の有効桁数以下の数値の取扱いとしては、切り捨て方式よりも四捨五入方式を採用した方がより精度のよい結果を与える¹¹ことより後者を用いる。

b) モデル

有限要素法において得られた剛性行列は、その数値比のばらつきによって条件数がさまざまであり、それらを解いて得られる解の精度も異なってくる。ここでは、解法の差異および 2. で示した誤差改善効果、消去順序等の検討に焦点をあてているので、要素剛性としては自由度 1 で数値のばらつきのない単位行列を用いることにする。したがって、剛性行列には非対角項に -1.0、主対角項にその節点の隣接節点数がそのまま数値となって入るモデル行列を用いることにする。境界条件は、比較的数値誤差の発生が大であると考えられるものを多く用い、荷重条件は、荷重項の数値のばらつきによる影響をなくすために、全節点に荷重 1.0 を載荷するものとする。

(2) 数値実験および考察

(実験 1) 解法の違いによる誤差発生の差異

ここで用いる解法のうち、帶行列法とスカイライン法は容量および演算時間に差異はあるものの、消去演算過程は全く同じである。ところが、ウェーブフロント法は

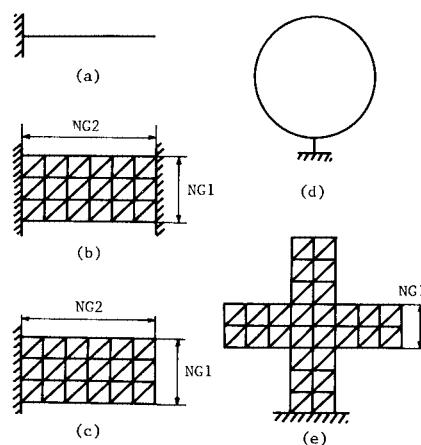


図-1 モデル

要素剛性の組込みと消去を同時にを行うため、消去過程の数値の取扱いは前述の 2 者と異なる。まず、この解法の差異の解の精度に与える影響度を調べてみる。図-1(b)のモデルを用いたときの結果を図-2 に示す。同一順序で消去した場合、帶行列法とウェーブフロント法の解法の差異は、ほとんど誤差に影響を及ぼさないことがわかる。このことは後の異なるモデルを扱った実験 3(i) の結果からもいえる。また、各手法のそれぞれ最適な消去順序をとった場合についても、実験 3(ii) に示す。

(実験 2) 分割消去法の適用による解の精度の改善効果

分割消去法を用いた場合、理論的に導かれる有効な条件数は式(8)に示したとおりである。しかしながらその仮定として $\|A_{21}A_{11}^{-1}\|$, $\|A_{12}\bar{A}_{22}^{-1}\|$ が誤差伝播に関して 1 の程度であるときに限られる。これは、概念的に非対角ブロック行列 A_{21} , A_{12} が主対角ブロック行列 A_{11} , A_{22} に比べて小である場合であると考えられる。そこで、ここでは行列 A_{11} , A_{22} に対する A_{21} , A_{12} の大きさを分割数を変えることによって変化させ、誤差改善の度合を調べてみる。モデルとしては、図-1(c) を用いて、元

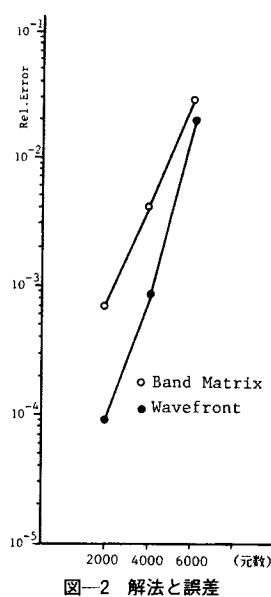


図-2 解法と誤差

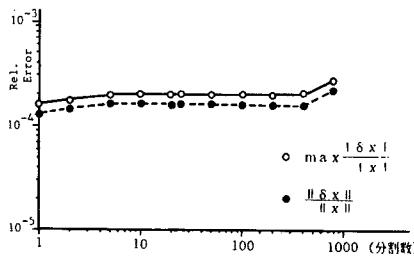


図-3 分割消去と誤差

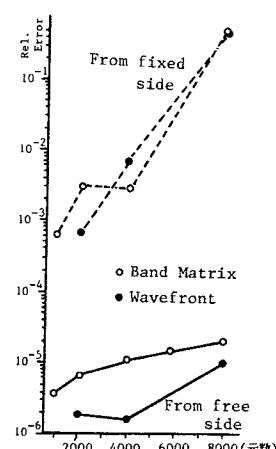


図-4 消去順序と誤差 I

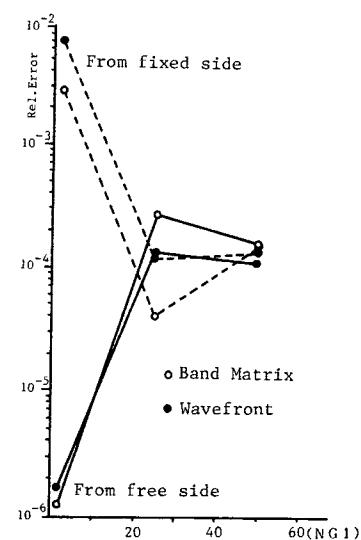


図-5 消去順序と誤差 II

数 4 000 元、NG 1 : NG 2 = 5 : 800 にとる。結果を図-3 に示す。横軸は分割数、縦軸は誤差をとっている。ただし、誤差の評価は式(21)と、また式(6)と同一の評価を行なうため、ノルムの意味での相対誤差 $\|\delta x\|/\|x\|$ の 2 つの方法で行なっている。なお、ノルムはユークリッドノルムを用いる。この結果より、分割数を減少させることは、非対角ブロック行列を主対角ブロック行列に対して小さくさせることになるにもかかわらず、誤差改善はなされていないことがわかる。これはとりもなおさず $\|A_{m-1,m}A_{m-1,m}^{-1}\|$, $\|A_{m-1,m}\bar{A}_{mm}^{-1}\|$, … が 1 の程度になっていないためである。その理由としては、分割数が増加すれば上記のノルムはしだいに大きくなり、しかもそれらの積で表わされるわけであるから誤差改善は困難になる。逆に分割数が小さければ A_{mm-1} , $A_{m-1,m}$ は $A_{m-1,m-1}$, A_{mm} に比べて十分小さいが、大次元行列において一般に $\bar{A}_{m-1,m-1}^{-1}$, \bar{A}_{mm}^{-1} は大きくなる傾向を示すため、結局、上記ノルムは 1 の程度にならざる、誤差改善もなされないと考えられる。このことは図-1(c) のモデルで、簡単に NG1=2 として、それぞれのノルムを求めてみると、

$$\|A_{m-1,m}\bar{A}_{mm}^{-1}\| = \frac{\sqrt{5}(2m-1)}{2m+1} > 1 \quad \text{for } m \geq 2$$

$$\|A_{m,m-1}\bar{A}_{m-1,m-1}^{-1}\| = \frac{\sqrt{8m^2-4m+1}}{2m+1} \geq 1 \quad \text{for } m \geq 2$$

となることからもわかる。

したがって、分割消去法の適用による誤差改善は、ほとんど期待できないという推論を得ることができる。

(実験 3) 消去順序の違いによる誤差発生の差異

i) 構造系モデルの自由境界からの消去と固定境界からの消去による差異

図-1(c) に示す片持ちはりについて、消去順序を自由境界からと固定境界からとに分け、それぞれの解の誤差を調べてみる。ただし、解法は帶行列法とウェーブフロント法の2手法を用いる。結果を図-4, 5に示す。図-4では横軸に元数を、図-5では縦幅NG1をパラメーターにとっている。同一対象物を解いているが、すなわち $X(A)$ は一定であるにもかかわらず、自由境界からと固定境界からの消去では、解に発生する誤差がかなり異なることがわかる。このことは式(20)に示したように、分解後の成分行列の条件数にかなりの差異が生じているからと考えられる。これを調べるためにモデル図-1(a), (c) を用いて、小さな系でそれぞれの $X(L)$, $X(D)$ を求めてみる。結果を表-1, 2に示す。ただし、ノルムはユーリッドノルムを用いる。元数の増加により、自由境界からと固定境界からの消去では、成分行列 D の条件数 $X(D)$ に大きな差がみられる。いま、 $X(A)$ を減少させるため、元数一定で縦幅NG1を増やした場合、結果は表-2に示されるとおりである。このとき、自由境界からの消去と固定境界からの消去の $X(D)$ にはほとんど差異がみられなくなり、このことは発生する誤差もほとんど変わらなくなることを示している。またNG1が大きくなるにつれて自由境界から消去したときの誤差がしだいに小さく、固定境界から消去したときの誤差がしだいに大きくなるのは、演算回数の増加による $\|\delta L\|/\|L\|$, $\|\delta D\|/\|D\|$ の増加比と $X(D)$ の減少比に関係していると考えられる。すなわち、自由境界からの消去では後者が卓越しているため、NG1の増加とともに誤差発生はしだいにおさまるが、固定境界からの消去ではその逆で、誤差は増加するものと考えられる。したがって、片持ちは

表-1 消去演算の条件数①

n	Free		Fixed		$X(A)$
	$X(L)$	$X(D)$	$X(L)$	$X(D)$	
2	3.0E+00	2.0E+00	2.3E+00	4.3E+00	7.0E+00
5	1.1E+01	5.0E+00	7.4E+00	1.6E+01	1.8E+01
10	3.2E+01	1.0E+01	1.9E+01	4.1E+01	3.4E+02
20	9.1E+01	2.0E+01	5.3E+01	1.1E+02	1.8E+03
50	3.6E+02	5.0E+01	2.0E+02	3.9E+02	1.8E+04

表-2 消去演算の条件数②

n = 100 NG1xNG2	Free		Fixed		$X(A)$
	$X(L)$	$X(D)$	$X(L)$	$X(D)$	
2x50	6.4E+02	1.0E+02	3.8E+02	5.6E+02	3.7E+04
4x25	3.6E+02	1.1E+02	2.3E+02	2.3E+02	1.0E+04
5x20	2.9E+02	1.1E+02	2.0E+02	1.9E+02	6.7E+03
10x10	1.8E+02	1.1E+02	1.5E+02	1.4E+02	1.7E+03
20x 5	1.5E+02	1.1E+02	1.3E+02	1.3E+02	6.2E+02
25x 4	1.4E+02	1.1E+02	1.3E+02	1.3E+02	4.8E+02
50x 2	1.3E+02	1.1E+02	1.2E+02	1.3E+02	2.5E+02

りのような一般に条件数 $X(A)$ が大きい構造系においては、固定境界よりも自由境界からの消去が望ましいといえよう。

II 各種計算法の計算効率を上げるための消去順序と解の精度

各種計算法を用いるとき、それぞれ容量的に、あるいは演算時間的に効率のよい消去がなされる。そこでここでは、そのときのそれらの消去順序と解の精度の関係はどうになっているかを、図-1(e) に示すモデルを用いて調べる。帶行列法、スカイライン法、ウェーブフロント法を用いて図-6に示す各手法に適した消去順序で消去演算を行った結果を図-7に示す。横軸は元数で縦幅NG1をパラメーターとして変化させている。結果として、帶行列法で解いたときの解に発生する誤差が他

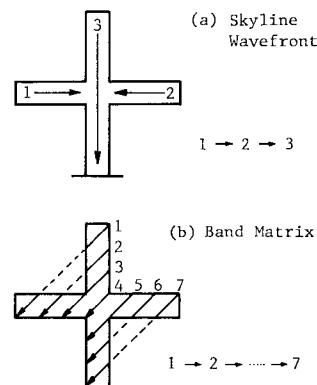


図-6 各手法の最適消去順序

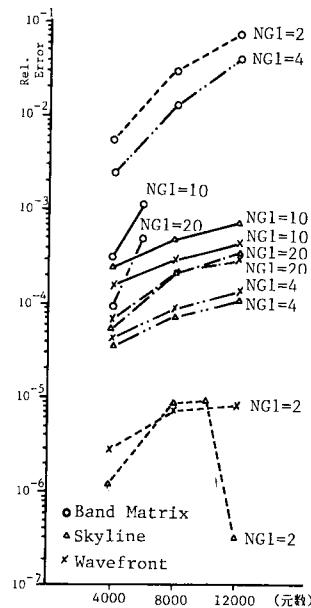


図-7 消去順序と誤差

の2手法に比べて、NG 1 が小さい、すなわち元の剛性行列の条件数 $X(A)$ が大きい場合に限ってかなり大きいことが得られている。帶行列法のとった消去順序において、フィルイン（前進消去過程で、消去前零であったものが、消去後非零化した要素）が発生したことによる演算回数の増加はオーダー的には、ごくわずかであり、またこの誤差発生の挙動は実験3(i)と全く同じである。よって、このことは先の結果より、分解後の成分行列の条件数 $X(D)$ の影響であると推測できる。すなわち、系のトポロジーが複雑な場合（たとえば突出領域を有するような系）、帶行列法のための最適消去順序をとることは、突出部の中途から自由端への消去部分を生じさせ、実験3(i)の結果に示したとおり、誤差発生を大にさせかねないといえる。したがって、最適な消去順序によって演算回数が減ったからといって誤差発生が小になるとは限らない。

次に最適な消去順序をとってプロファイル領域が最小になった場合を考えてみる。このとき、作成される剛性行列の非零要素の配置としては、消去順序によってさまざまな場合が考えられる。そこで、それらの非零要素の配置のばらつきによる誤差への影響を調べてみる。用いた解法はスカイライン法で、図-8に示す、容量が全く同じであるにもかかわらず、非零要素の配置が異なる行列についてそれぞれの解に発生する誤差を調べてみる。結果を図-8に示す。これより、演算領域が最小化された状況下において、その中の消去順序の違いによる非零要素のばらつきの誤差への影響はほとんどないといつてよい。

最後に、補足的に今回用いたモデルについて、数値実験で得られたデータを図-9、10にプロットしてみる。これより、上述の解法を用いた場合に最低3桁の精度保障のある解を得ようとするのであれば、元数の上限値の

目安として、1 000 元程度までであると予測される。また、図-10の横軸のパラメーター NG 1 の増加は元の行列の条件数の減少に一致している。したがって、条件数が大であれば、消去順序によって誤差改良の余地があるといえ、解の改善を施した場合、およそ 3 000 元くらいの系までは単精度で 3 術の精度保障が得られるといえよう。また、今回のモデルについては数値比を考慮していない行列を対象としたので、実際には、その誤差発生の傾向は同じであるにしても、ここでの結果よりは上めに出てくるものと思われる。

4. 結 論

ケーススタディーを通して得られた結果および考察を要約すれば、次のようになる。

(1) 組込みプロセスに違いのある帶行列法（またはスカイライン法）とウェーブフロント法を連立一次方程式の解法として用いた場合、解に発生する誤差は基本的にはほとんど差異がみられないと考えられる。

(2) 一般の FEM 解析で得られる剛性行列に対して、分割消去法の適用による誤差改善は、実際には非常に困難であると推測される。

(3) 消去演算による解の誤差は、三角分解後の成分行列の条件数と深く関係し、このことは消去順序を考慮してやれば、誤差の発生をある程度おさえることが可能であることを示している。その一例として、片持ちばかり等の系を扱う場合、その剛性行列の条件数が大であれば、消去順序として、固定境界よりも自由境界からの消去を行う方が精度のよい解を得ることができる。

(4) 各種解法の効率化を図った消去順序と誤差発生をおさえる消去順序とは必ずしも一致せず、注意を要する。

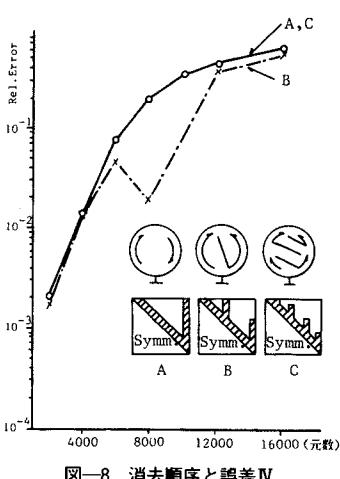


図-8 消去順序と誤差IV

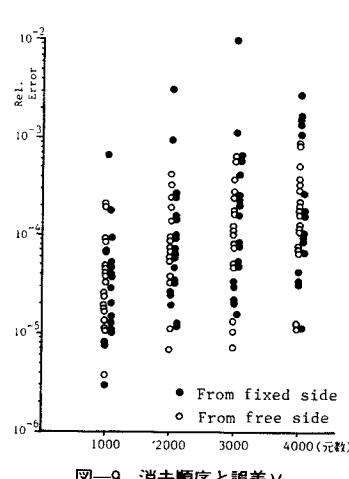


図-9 消去順序と誤差V

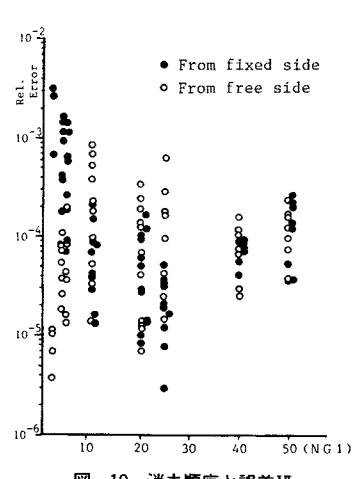


図-10 消去順序と誤差VI

参考文献

- 1) 谷口健男・曾我 明：大規模消去演算における数値誤差，数理解析研究所講究録 548，京都大学数理解析研究所，pp. 50～70，1985年2月。
- 2) 山本善之・山田善一：マトリックス構造解析の誤差論，pp. 39～73，培風館，1972年。
- 3) Roy, J. R. : Numerical error in structural solutions, Journal of Structural Division, ASCE, ST4, pp. 1039～1054, 1971.
- 4) Melosh, R. J. : Manipulation errors in finite element analysis, Recent Advances on Matrix Methods of Structural Analysis and Design, Univ. of Alabama press, pp. 851～877, 1971.
- 5) Wilkinson, J. H. : Rounding errors in algebraic processes, Her Britannic Majesty's Stationery Office, 1963.
- 6) 一松 信・戸川隼人：数値計算における誤差，pp. 49～69，共立出版，1975年。

(1985.6.19・受付)