

ICC G法の有限要素方程式への適用に関する一検討

A STUDY ON APPLICATION OF THE INCOMPLETE CHOLSKY CONJUGATE GRADIENT TO THE FINITE ELEMENT EQUATIONS

吉田 裕* 依知川 哲治** 中川 昌弥***

Yutaka YOSHIDA, Tetsuji ICHIKAWA, Masaya NAKAGAWA

In this paper, the preconditioned conjugate gradient methods for the solution of sparse systems of linear algebraic equations arising from finite element structural analysis are tested using several types of incomplete cholesky factorizations.

Problems to be solved are matrices generated by finite element method for simple plane stress and plate bending structures with several types of boundary conditions.

The intention is to compare the point-wise incomplete factorizations and the block methods.

The results of numerical experiments show that the modified block incomplete cholesky conjugate methods are a practical alternative to direct methods in the solution of large, sparse systems of equations although the possibility of slow or irregular convergence due to the characteristics of the coefficient matrix remains to be refined.

1. はじめに

連立一次方程式の解法としてCG法に代表される反復法は、マトリックスとベクトルの乗算だけで解を得ることができ、直接法に比較して記憶容量の面で圧倒的に有利であり、過去に相当な検討がなされてきた経緯がある¹⁾。CG法の適用に際してはその収束性が問題となり、非線形解析のように非常に性質の悪い方程式を解かなければならないような問題に対しては、確実に解が得られる直接法が用いられている場合が多い。

一方、スーパーコンピュータの普及に伴い解析対象が大規模化され、再びCG法の系統の解法について多くの検討がなされている。^{4)~7)} 著者らも、構造問題の有限要素方程式を対象として、スケーリングを含めたいくつかの異なった種類の前処理を施したCG法を具体的な数値実験を通して比較検討し、前処理として不完全コレスキー分解を施すICC G法が、単にスケーリングのみを施したCG法に比較して反復計算回数を大幅に減少することができ、有効であることを確認した⁸⁾。しかし、平面応力問題と平板曲げ問題とでは反復に要する計算回数に大きな差があること、不完全コレスキー分解を行う際の重み係数が収束状況に与える影響、など実際の解析システムのソルバーとして採用するためには、なお検討すべき問題が多く残されている。

本研究は、平面応力問題と平板曲げ問題の有限要素方程式を対象として数値実験を行い、ICC G法の適

* 工博 東京工業大学教授 工学部土木工学科 (〒152 東京都目黒区大岡山2-12-1)

** 工修 東京工業大学助手 工学部土木工学科 (〒152 東京都目黒区大岡山2-12-1)

*** 東京工業大学大学院 修士課程学生 (〒152 東京都目黒区大岡山2-12-1)

用に関する種々の検討を行った結果を報告するものである。

2. CG法のアルゴリズムの概要

CG法は、連立一次方程式の残差ベクトル $\mathbf{r}$ が直交するように解を修正しながら反復計算を行い、有限回の反復計算で解を得ることができる。ここで、解くべき連立一次方程式を $\mathbf{A}\mathbf{x}=\mathbf{b}$ とすると、CG法のアルゴリズムは以下のように表される。

- 1) $\mathbf{r}_0 = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}_0$, $\mathbf{p}_0 = \mathbf{r}_0$, $\mathbf{x}_0$ は任意の初期ベクトル
- 2) $\alpha_k = (\mathbf{p}_k, \mathbf{r}_k) / (\mathbf{p}_k, \mathbf{A}\mathbf{p}_k)$
- 3) $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{p}_k$
- 4) $\mathbf{r}_{k+1} = \mathbf{r}_k - \alpha_k \mathbf{A}\mathbf{p}_k$
- 5) $\beta_k = -(\mathbf{r}_{k+1}, \mathbf{A}\mathbf{p}_k) / (\mathbf{p}_k, \mathbf{A}\mathbf{p}_k)$
- 6) $\mathbf{p}_{k+1} = \mathbf{r}_{k+1} + \beta_k \mathbf{p}_k$
- 7) 2)へ

ここで、初期ベクトルは $\mathbf{x}_0 = \mathbf{0}$ とし、収束判定は $(\|\mathbf{r}_k\| / \|\mathbf{b}\|)^{1/2} < 10^{-3}$ としたが、収束状況がどのように変化するか調べるため計算は 10^{-5} まで続けた。

なお、以下の計算においては、係数マトリックスの対角要素を1とするスケーリングを施した方程式に対してCG法(SCG法)を適用している。ここで、スケーリングは与えられた連立一次方程式を $\mathbf{A}\mathbf{x}=\mathbf{b}$ 、係数マトリックス $\mathbf{A}$ の対角要素だけを残したマトリックスを $\mathbf{D}$ として次のように表される。

$$\tilde{\mathbf{A}} = \mathbf{D}^{-1/2} \mathbf{A} \mathbf{D}^{-1/2} , \quad \tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{D}^{1/2} \mathbf{x} , \quad \tilde{\mathbf{b}} = \mathbf{D}^{-1/2} \mathbf{b}$$

ただし $d_{ii} = a_{ii}$

3. 解析の対象とした問題

解析の対象とした問題は、薄板有限要素による平面応力問題と平板曲げ問題であり、それぞれ1節点3自由度を持つ。これら2つの対象は、総自由度数が同じであるが、問題によって係数マトリックスの性質が異なるため、CG法での収束状況が大きく異なる特徴的な問題である。各節点は、鉛直方向変位と回転変位のオーダーもディメンジョンも違う項を含んでいる。また、ここで取り上げた問題のように一端拘束、一端自由のような問題は特に収束が悪くなることが知られている。解析対象と変形図を図-1(a)、(b)及び諸条件を表-1に示す。SCG法を適用し、両者の収束状況の違いを示したものが図-2である。

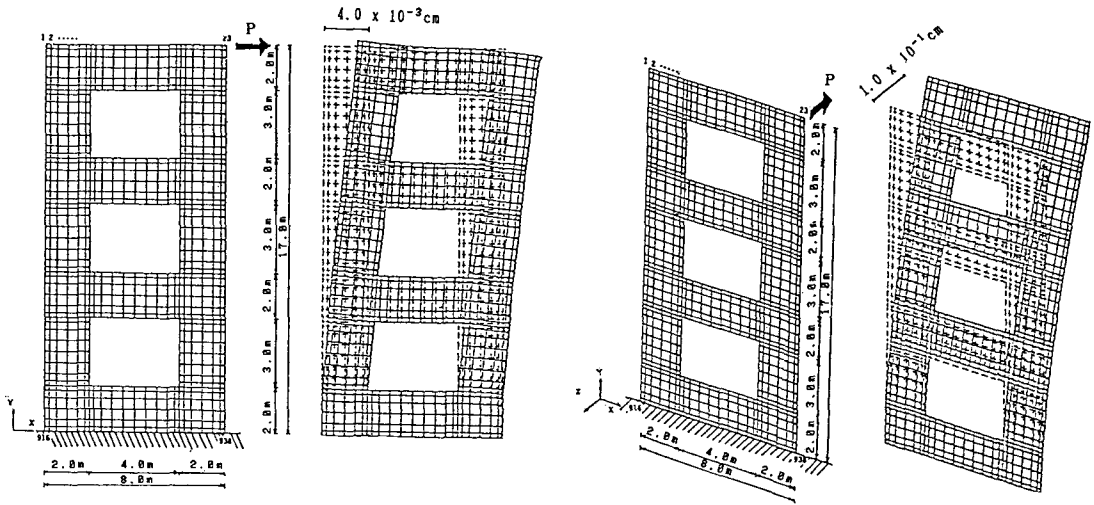
なお、以下のすべての計算において使用した計算機は、東京工業大学総合情報処理センターのスーパーコンピュータETA10-Eである。

4. ICCG法について

ICCG法は、前処理として元の係数マトリックスを不完全コレスキー分解する過程を経ることにより、係数マトリックスの性質を改善しCG法の収束を速め、要する容量と計算時間に対する要求を両方とも満たそうとするものである。アルゴリズムは不完全コレスキー分解

$$\mathbf{A} = \tilde{\mathbf{U}}^T \tilde{\mathbf{D}} \tilde{\mathbf{U}} + \mathbf{R}$$

で表されるマトリックス $\tilde{\mathbf{U}}^T \tilde{\mathbf{D}} \tilde{\mathbf{U}}$ を用いて



(a)平面応力問題

(b)平板曲げ問題

図-1 解析対象及び変形図

表-1 諸 条 件	
節点数	938
要素数	816
総自由度	2745
ヤング率 E	3.0×10^5 (kgf/cm ²)
ポアソン比 ν	0.15
板厚 t	100 (cm)
荷重 P	1.0×10^3 (kgf)

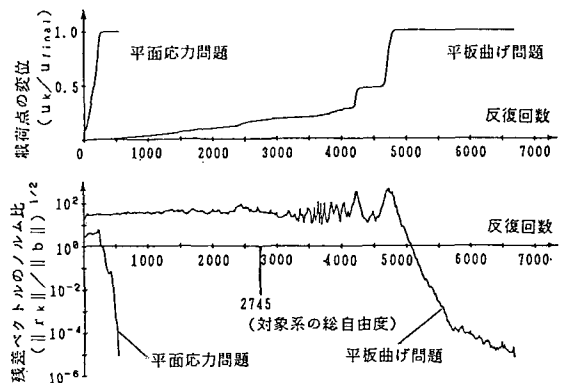


図-2 CG法による収束状況

$$\tilde{\mathbf{A}} = (\tilde{\mathbf{U}}^T \tilde{\mathbf{D}}^{1/2})^{-1} \mathbf{A} (\tilde{\mathbf{D}}^{1/2} \tilde{\mathbf{U}})^{-1}, \quad \tilde{\mathbf{x}} = \tilde{\mathbf{D}}^{1/2} \tilde{\mathbf{U}} \mathbf{x}, \quad \tilde{\mathbf{b}} = (\tilde{\mathbf{U}}^T \tilde{\mathbf{D}}^{1/2})^{-1} \mathbf{b}$$

としたときの $\tilde{\mathbf{A}} \tilde{\mathbf{x}} = \tilde{\mathbf{b}}$ にCG法を適用し、～のついていない元のマトリックス $\mathbf{A}$ とベクトル $\mathbf{x}$ で表すと、前記CG法のアルゴリズム中 1), 5), 6) が以下のように書き換えられる。

$$1') \quad \mathbf{r}_0 = \mathbf{b} - \mathbf{A} \mathbf{x}_0, \quad \mathbf{p}_0 = (\tilde{\mathbf{U}}^T \tilde{\mathbf{D}} \tilde{\mathbf{U}})^{-1} \mathbf{r}_0$$

$$5') \quad \beta_k = -(\langle \tilde{\mathbf{U}}^T \tilde{\mathbf{D}} \tilde{\mathbf{U}} \rangle^{-1} \mathbf{r}_{k+1}, \mathbf{A} \mathbf{p}_k) / (\mathbf{p}_k, \mathbf{A} \mathbf{p}_k)$$

$$6') \quad \mathbf{p}_{k+1} = (\tilde{\mathbf{U}}^T \tilde{\mathbf{D}} \tilde{\mathbf{U}})^{-1} \mathbf{r}_{k+1} + \beta_k \mathbf{p}_k$$

ここで反復計算1回につき、1度の後退代入計算が必要となる。

ここではスケーリングした係数マトリックスに対し、不完全コレスキー分解として以下の2通りの方法を用いた。

(a) コレスキー分解で係数マトリックスを書き換えてゆく際には、零要素から非零要素に変わるfill-

i_n が生じるが、それを無視してコレスキー分解を行い、非対角要素は計算することなく元の係数マトリックスのものを対角要素のみ作成する方法で、以下の手順によりコで示される2式を繰り返し計算される。

$$\begin{aligned}\tilde{u}_{11} &= a_{11} \\ \tilde{u}_{ij} &= a_{ij} \\ \tilde{d}_{ii} &= 1 / \tilde{u}_{ii} \\ \tilde{u}_{ii} &= (\text{const}) \times a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} \tilde{u}_{ki} \tilde{d}_{kk} \tilde{u}_{ki}\end{aligned}$$

(b) 節点の自由度のブロックの小行列を要素単位として、(a)と同様に対角要素に対応するブロックを作成する方法。

$$\begin{aligned}\tilde{u}_{11} &= a_{11} \\ \tilde{u}_{ij} &= a_{ij} \\ \tilde{d}_{ij} &= \tilde{u}_{ij}^{-1} \\ \tilde{u}_{ii} &= (\text{const}) \times a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} \tilde{u}_{ki}^T \tilde{d}_{kk} \tilde{u}_{ki}\end{aligned}$$

図-3において、元の係数マトリックスAの上三角行列（対角要素は書き換えられていく） $\tilde{U}$ と計算される対角要素からなる対角マトリックス $\tilde{D}$ を用いて、(a)の方法による不完全コレスキー分解の過程を簡単に説明する。不完全コレスキー分解で対角要素 $\tilde{d}_{ii}(=\tilde{u}_{ii})$ が計算される順番は図中①の方向である。i番目の対角要素を計算するには、i列にある上三角部分の非零要素 $\tilde{u}_{ki}(=a_{ki}, k < i)$ と、その要素に相当する行の既に計算されている対角要素 $\tilde{d}_{kk}$ が必要で、これを黒丸で示す。

このとき、元の係数マトリックスの非対角要素で零要素の部分については計算は行わない。通常のコレスキー分解であれば非対角要素 $\tilde{u}_{ki}$ も順次計算し書き換えられ、それらを用いて分解を進めていくが、この場合元の係数マトリックスはベクトルとの積に用いるので非対角要素 $\tilde{u}_{ki}$ を求める計算は行わず、元の係数マトリックスの非対角要素をそのまま用いる。そのため、計算される対角要素 $\tilde{d}_{ii}$ が負になってしまう場合が出て来るが、これを防ぐために元の対角要素 a_{ii} に重みをつけるのがconstである。

(b)においても分解の手順は(a)の方法と同じであるが、節点の自由度のブロック単位（図-3中□の部分）で計算を進める。この場合、対角部分のブロックは全ての要素を計算する。ブロックの小行列を単位として分解をすすめ、逆行列も求める必要があるので

分解には手間がかかるが、後退代入計算の部分では(a)の方法と同程度の演算量となる。ここでconstは、対角部分のブロック小行列の対角要素が負にならないように決めるものとし、対角部分のブロック小行列の全ての要素に乗じている。

このように分解を進めて行くことにより、最終的に図-4に示すようなマトリックス $\tilde{U}^T \tilde{D} \tilde{U}$ を得ることができる。ここで、新たに計算され

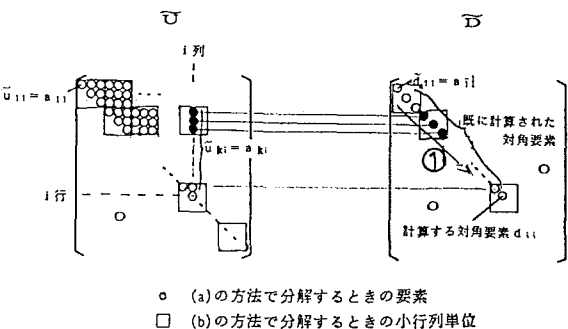


図-3 不完全コレスキー分解の過程

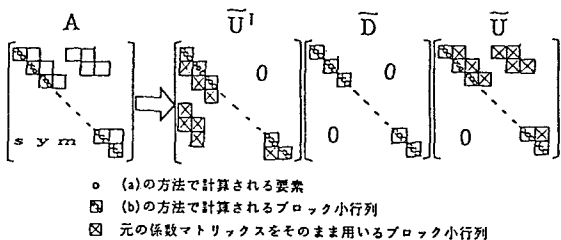


図-4 不完全コレスキー分解でできるマトリックス $\tilde{U}^T \tilde{D} \tilde{U}$

る対角要素に相当する容量が必要になる。

5. 前処理の方法による収束性の違いについて

ICCG法での平面応力問題、平板曲げ問題それぞれの収束状況を、スケーリングだけを施したCG法の収束状況と併せて図-5(a)、(b)に示す。平面応力問題、平板曲げ問題ともに反復計算回数が大幅に減少し、前処理の効果が大きいことを示している。しかし、収束に要する反復計算回数は、平面応力問題で128回であるのに対して、平板曲げ問題では依然として1521回を要している。

なお、constの値は平面応力問題では(a)1.2、(b)1.0、平板曲げ問題では(a)1.7、(b)1.2とした。

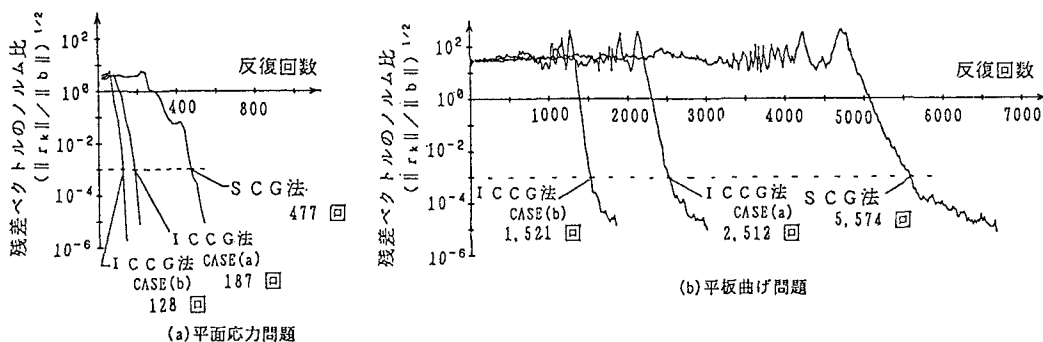


図-5 前処理の方法が収束性に及ぼす影響

6. 重み係数constの値が収束性に及ぼす影響について

不完全コレスキー分解のアルゴリズムの中で、対角部分にける重み係数constの値が収束性に及ぼす影響について、(b)の方法で不完全コレスキー分解したICCG法によりconstの値を変えて計算した結果が図-6(a)、(b)、図-7(a)、(b)である。なお、平板曲げ問題の場合const=1.0では負の対角要素が出てきてしまい1万回の反復計算をしても収束しなかった。constの値を大きくとるほど収束性が悪くなり、収束性のよくない平板曲げ問題ほど、その反復計算回数に及ぼす影響が大きくなる。constの値は、小さいものから捜して行くとなると手間がかかるが、対角要素が負にならないような最も小さな値が良いようである。(a)の方法で不完

全コレスキー分解した際の最小値(平面応力問題1.2、平板曲げ問題1.7)を(b)の方法の不完全コレスキー分解に適用し比較したものが図-8(a)、(b)である。どちらの問題においても、収束回数にそれほど大きな差はみられないが(b)の分解の方が若干収束が速い。(a)と(b)それぞれの不完全コレスキー分解で対角要素が負にならないようなconstの最小値は(b)の分解では平面応力問題1.0、平板曲げ問題1.2であり、(b)の分解の方が小さくすることができ、収束性の改善は大きい。

なお、以下の計算におけるconstの値は対角要素が負にならないような最小値を用いている。

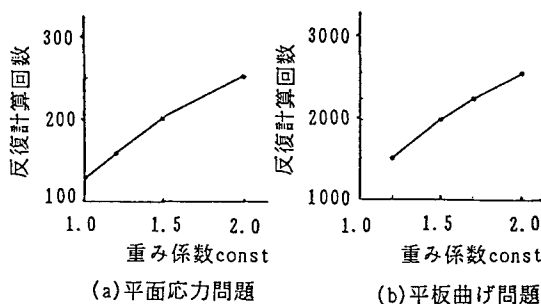
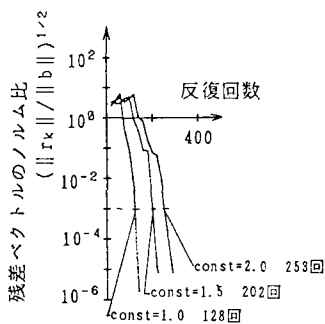
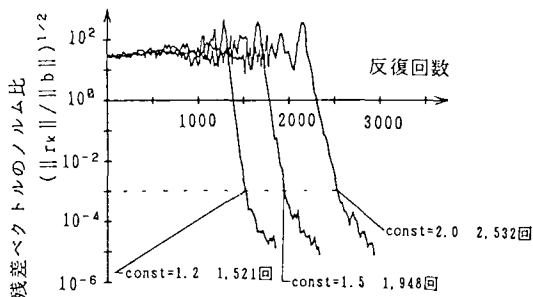


図-6 重み係数と反復計算回数

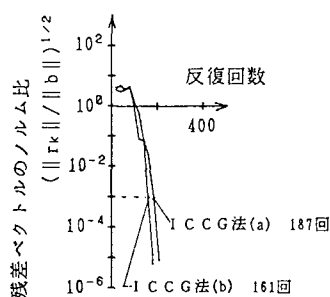


(a)平面応力問題

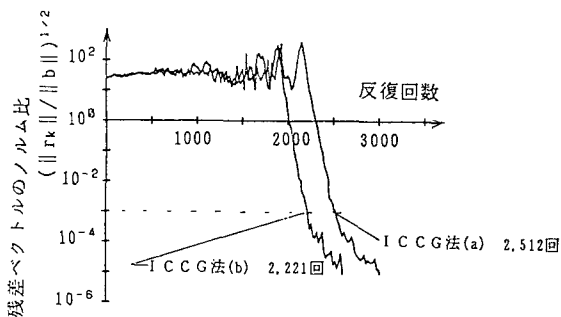


(b)平板曲げ問題

図-7 重み係数による収束状況の違い(その1)



(a)平面応力問題 const=1.2



(b)平板曲げ問題 const=1.7

図-8 重み係数による収束状況の違い(その2)

7. 荷重条件の違いが収束性に及ぼす影響について

平板曲げ問題において、上端部の1点に荷重をかけた問題(図-1(b))と2点に荷重をかけてねじりを与えた問題、平板全体に等分布荷重をかけた問題(図-9)のそれぞれの(b)のIC

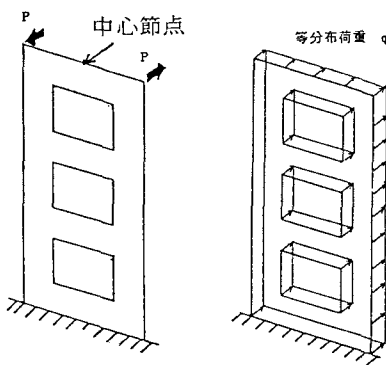


図-9 荷重条件の違い

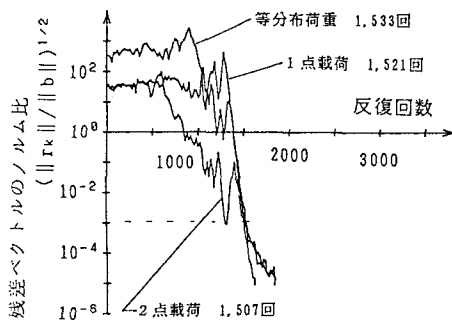


図-10 荷重条件の違いが収束性に及ぼす影響

CG法による収束状況を図-10に示す。これら3つの問題は係数マトリックスが同じものであり、CG法の収束性が係数マトリックスの条件数に依存することを考えれば当然の結果ではあるが、収束していく様子が若干の違いはあっても、同じ程度の反復回数で収束している。なお、constの値は1.2としている。

8. 境界条件の違いが収束性に及ぼす影響について

前述のねじりを与えた問題に対し、上端部の中心の節点の面外方向変位を、等分布荷重をかけた問題では上端部の全ての節点の面外方向変位を強制的に拘束した場合の(b)のICCG法による収束状況を図-11(a), (b)に示す。上端部を拘束されている問題では、各節点の変位の大きさの相対的な差が拘束していない場合に比べて小さく、数値誤差の影響が少ないため収束性はよくなっている。拘束条件の違いによる収束性の変化は大きいといえる。なお、constの値は1.2としている。

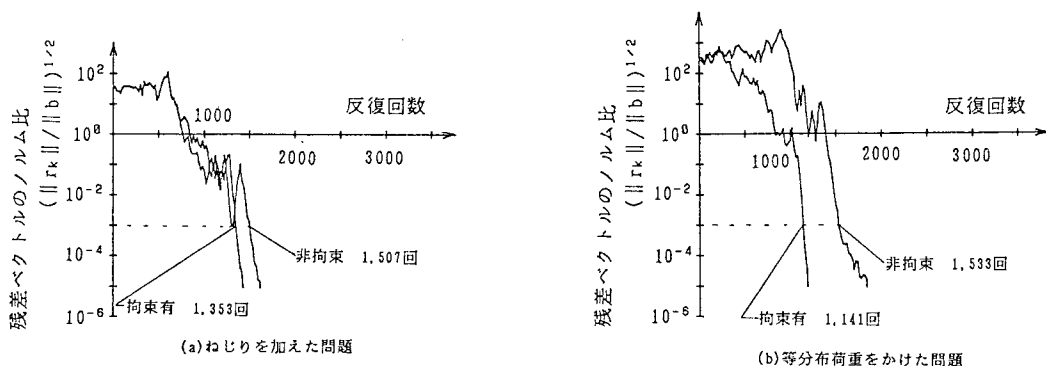


図-11 境界条件の違いが収束性に及ぼす影響

9. 剛性の不均一性が収束性に及ぼす影響について

材料非線形解析において塑性状態に入るとCG法の収束性が悪くなることが知られているが、平面応力問題に対して、図-12に示すように一部の剛性を低下させて弾塑性解析を模した計算を行った。SCG法および(b)のICCG法によって計算を行った場合の収束状況を、図-13に示す。一部分の剛性を低下させた問題に対しても、ICCG法では収束性が相当改善されることが分かる。なお、constの値は1.0としている。

- $E = 3.0 \times 10^5 \text{ kgf/cm}^2$
- ☒ 剛性の違う要素
- (case-1 $E = 3.0 \times 10^3 \text{ kgf/cm}^2$)
- (case-2 $E = 3.0 \times 10^2 \text{ kgf/cm}^2$)

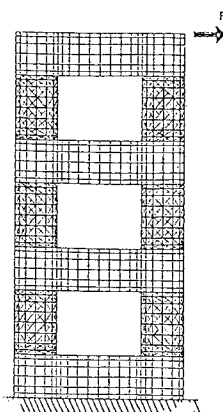


図-12 剛性の不均一な平面応力問題

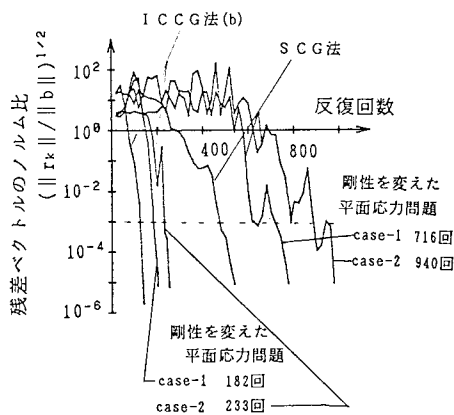


図-13 剛性の不均一性が収束性に及ぼす影響

10. 要する計算時間について

SCG法と(b)のICCG法により平面応力問題、平板曲げ問題それぞれの解析に要した計算時間を表-2に示す。ICCG法において反復計算1回にかかる計算時間は後退代入計算があるだけ余計にかかるが、反復回数の減少がそれを大きく上回り、全体の計算時間の減少につながっている。しかし、ここに挙げた計算時間はベクトル計算との適合性は考えておらず、計算機システムとの適合性を考慮してプログラミングした場合、後退代入計算にデータの依存がありベクトル化には不適であるため、計算時間が大きく変化することは十分考えられる。

表-2 解析に要する計算時間 (ETA10-EによるCPU-time)

	解法の種類	前処理過程 (s)	反 復 計 算 過 程			全計算過程 (s)
			回数	1 回当り (s)	全過程 (s)	
平面 応力	SCG法	—	477回	0.086	41.02	51.5
	ICCG法(b)	0.11	128回	0.188	24.06	34.7
平板 曲げ	SCG法	—	5574回	0.086	479.36	487.1
	ICCG法(b)	0.11	1521回	0.188	285.95	293.7

11. おわりに

以上、いくつかの条件を変えた解析を通して、ICCG法の有限要素方程式への適用に関する検討を行った。その結果、ICCG法の収束性は不完全コレスキー分解する際の重み係数constや対象とする問題の諸条件に大きく影響を受けるが、条件の悪い問題に対しても、SCG法に比べて一様に反復計算回数を大幅に減少することができ、有効であることが分かった。しかし、計算効率の面からみると後退代入計算を含まないSCG法が有利になる可能性があり、今後の検討課題と考える。

参考文献

1) A. Ralston and H. S. Wilf: "MATHEMATICAL METHODS for DIGITAL COMPUTERS", John Wiley & Sons, Inc., 1967
2) 戸川隼人: "マトリックスの数値計算", オーム社, 1971
3) 村田, 小国, 唐木: "スーパーコンピュータ", 丸善, 1985
4) 三好, 高野, 吉田: "スーパーコンピュータによる大規模構造解析", 構造工学における数値解析法シンポジウム論文集, Vol. 11, pp. 217~220, 1987
5) 三好, 高野, 吉田: "スーパーコンピュータによる三次元有限要素解析", 構造工学における数値解析法シンポジウム論文集, Vol. 10, pp. 287~292, 1986
6) 藤掛, 村野: "不完全共役勾配法とスカイライン法との連立一次方程式解法効率の比較", 構造工学における数値解析法シンポジウム論文集, Vol. 10, pp. 28~33, 1986
7) 三好, 高野: "構造解析における反復解法について", 構造工学における数値解析法シンポジウム論文集, Vol. 12, pp. 19~22, 1988
8) 吉田, 依知川, 中川: "連立一次方程式算法の計算機システム適合性に関する一検討", 構造工学における数値解析法シンポジウム論文集, Vol. 13, pp. 149~154, 1989

(1989年10月2日受付)