

ブロック対角化による 並列コレスキー分解の数値計算効率評価

NUMERICAL EFFICIENCY OF PARALELL CHOLESKY DECOMPOSITION BY BLOCK-DIAGONALIZATION METHOD

有尾 一郎* ・ 藤井 堅** ・ 佐藤 誠**

Ichiro ARIO, Katashi FUJII and Makoto SATO

*博士 (工学) 広島大学助手 工学部第四類 (建設系) (〒739 東広島市鏡山 1-4-1)

**工博 広島大学助教授 工学部第四類 (建設系) (〒739 同上)

Recently, the block-diagonalization method has been proposed as a means to exploit the symmetry of structures. In this paper, we employ this method in the intermediate process of the Cholesky decomposition for the stiffness matrix of symmetric structures so as to realize fast and parallel *LU* decomposition. By applying the method to regular polygonal symmetric structures with the dihedral group symmetry, we show the advantages of this method, including high-speed block Cholesky decomposition and reduced computer memory requirements.

Key Words : block-diagonalization method, paralell Cholesky decomposition, group-representation theory, symmetric structures

1. はじめに

対称性を持つ構造物の剛性行列をブロック対角化する手法 (BDM) が提案され、その数値解析上の利点が示されている^{1)~5)}。この手法は対称な系の剛性行列をその幾何学的特性に基づいた座標変換を用いることにより、剛性方程式を複数の独立な式に分解するものである。

本研究は、この BDM を行列の三角分解によく用いられる修正コレスキー法に応用し、上・下三角行列そのものを対角ブロック単位での上・下三角行列形への変換を試みるものである。すなわち、上・下三角行列を幾何学的特性に基づいた座標変換によって、複数の独立な上・下三角小ブロック行列に完全に直交分解する、*LU* 分解の並列計算法を提案し、その数値解析評価法について検討を行うものである。この計算法により、数値計算に用いる行列のサイズを大幅に低減でき、計算効率の向上と数値解析の並列化解析を実現する。

また、BDM によって直交化された小行列に対する演算効率の評価式と、条件数による計算誤差評価式を算定し、さらに、*LU* 分解の並列化に伴う演算効率と所要配列容量の評価についても客観的に回帰式を用いるなどして直接法と比較検討を行なった。数値解析例として、対称構造系 (二面体群に同変な系) のドーム構造に本手法を適用し、数値解析評価を行なって、本手法の有用性と妥当性を検証する。

2. ブロック対角化による並列コレスキー分解

この章では、幾何学的対称性を持つ系の剛性方程式のブロック対角化によるコレスキー分解について述べる^{4),5)}。ブロック対角化の対称条件については文献⁶⁾を参照されたい。

2.1 剛性方程式のブロック対角化

ブロック対角化は既に確立された手法であり、例えば文献⁷⁾に基づき概説する。ある N 自由度離散系の剛性方程式を

$$F(u, f) \equiv Ku - f = 0 \quad (1)$$

と表すこととする。ここに、 $u \in \mathbf{R}^N$ は変位ベクトル、 $f \in \mathbf{R}^N$ は荷重ベクトル、 K は逆行列を持つ正則な剛性行列で $K = U^T D U$ と修正 Cholesky 分解が可能とする。方程式 (1) の対称性を記述するにあたり、幾何学的変換を表す元 g から構成される群 G を考える。群 G の元 g が u に作用し、この g はブロック対角行列の各ブロックの既約表現¹⁾に対応している。既約表現の種類や個数は群毎に異なるので、ブロック対角形 (あるいは表現行列) も群毎に異なる。この系は群同変性の条件

$$T(g)F(u, f) = F(T(g)u, \tilde{T}(g)f) \quad (2)$$

を満たすものとする (文献⁷⁾を参照)。

ある群 G の既約表現全体を $R(G)$ とし、既約表現

¹⁾ 既約表現とは、群 G の表現行列の中で適当な直交変換によってこれ以上分解ができない最小の行列表現を意味する。

により, BDM による演算量 (あるいは配列量) は

$$\tilde{\rho} \simeq a \left(\frac{N^\alpha}{[q(G)]^{\alpha-1}} \right) \quad (14)$$

と近似でき, また本手法と従来の方法の演算量 (あるいは配列容量) の比も式 (10) と (14) より,

$$\frac{\tilde{\rho}}{\rho} \propto \frac{1}{[q(G)]^{\alpha-1}} \quad (15)$$

と近似できる. さらに, 並列計算機における計算量および計算効率は

$$\tilde{\rho}' \simeq a \left(\frac{N}{q(G)} \right)^\alpha, \quad \frac{\tilde{\rho}'}{\rho} \propto \frac{1}{[q(G)]^\alpha} \quad (16)$$

と向上できる可能性があり, その優位性は歴然である. これらの式は $\alpha \geq 2$ の場合にはブロックの個数 $q(G)$ の増加に伴い本手法の演算効率が向上することを表す.

3.2 誤差評価と条件数

連立 1 次方程式の誤差評価法として条件数という考え方が一般的である. 係数行列 A が誤差 δA を, 右辺ベクトル f が誤差 δf をそれぞれ含むとき, その解 u も δu だけ変化する. このとき, $\|A^{-1}\| \|\delta A\| < 1$ ならば解 u の相対誤差評価式

$$\delta(x) \leq \frac{\text{cond}(A)}{1 - \text{cond}(A)\delta(A)} (\delta(A) + \delta(f)) \quad (17)$$

がよく知られている^{8),9)}. ここに, 相対変化率 $\delta(\cdot) = \|\delta \cdot\| / \|\cdot\|$ を表し, $\text{cond}(A)$ の条件数は

$$\text{cond}(A) = \|A\| \|A^{-1}\| \quad (18)$$

と定義されている. この条件数は, 係数行列や右辺のベクトルが微小に変化したときに, その解の挙動の影響を数値的に評価するものである. 条件数が連立方程式の解の相対誤差の拡大因子となり, 条件数が多いときには「行列 A の条件が悪い」と呼ばれる.

本論文では, この評価式に $U^T D U$ の誤差 δU に着目し解 u の評価を行うこととする. 誤差を含んだ $U^T D U$ は

$$(U^T + \delta U^T) D (U + \delta U) (u + \delta u) = (f + \delta f) \quad (19)$$

として表される. 付録の評価式の誘導から解 u の相対誤差評価式は

$$\delta(u) \leq \frac{\varphi_1}{1 - \varphi_2} (\delta(f) + \varphi_3) \quad (20)$$

と簡略的に表される. ここに,

$$\varphi_1 = \text{cond}(U^T) \text{cond}(U) \quad (21)$$

$$\varphi_2 = (\|U^T\| + \|\delta U^T\|)(\|U\| + \|\delta U\|) - \|U^T\| \|U\|$$

$$\varphi_3 = (1 + \delta(U^T))(1 + \delta(U)) - 1$$

である. したがって, $U^T D U$ 行列の善し悪しは条件数 φ_1 に依存することになる. ただし, 行列 U^T と U は転置の関係であるので,

$$\varphi_1 = (\text{cond}(U))^2 \quad (22)$$

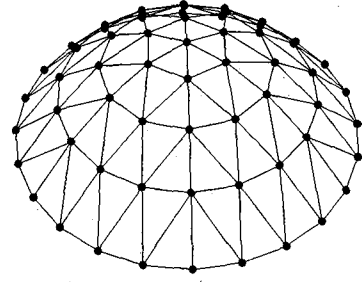


図-1 D_n 不変系 m 層ドーム構造 ($n=6, m=4$)

と書ける. 本論文の数値計算例においてこの φ_1 を誤差評価の指標として計算することとする.

4. D_n 不変な構造系への適用

本理論の数値解析例として, 正 n 角形状 (D_n 不変) の N 自由度の構造系の剛性方程式に着目する. 群 D_n の定義に関しては文献^{4),5)}に譲ることとする.

4.1 正 n 角形 m 層ドーム構造

図-1に示す 1 節点 1 自由度の n 角形 m 層ドーム構造を数値計算例として取り上げる.

(1) 数値計算効率と所要配列容量の圧縮率

この系全体の剛性行列の行列サイズは

$$N = 1 + \frac{m(m+1)}{2} n \quad (23)$$

と表される. ブロックの全個数 $q(D_n)$ は十分大きな n に対し,

$$q(D_n) \simeq n = \frac{2(N-1)}{m(m+1)} \simeq \frac{2}{m(m+1)} N \quad (24)$$

である. 一般にバンド幅を考えない修正 Cholesky 法の演算数 ρ は行列サイズ N に対して

$$\rho = \frac{N^3}{6} + \mathcal{O}(N^2) \simeq a N^3 \quad (25)$$

と表される. これに対して本手法による演算量の主要項は

$$\tilde{\rho} \simeq a \left(\frac{N^3}{[q(D_n)]^2} \right) = \frac{a m^2 (m+1)^2}{4} N \quad (26)$$

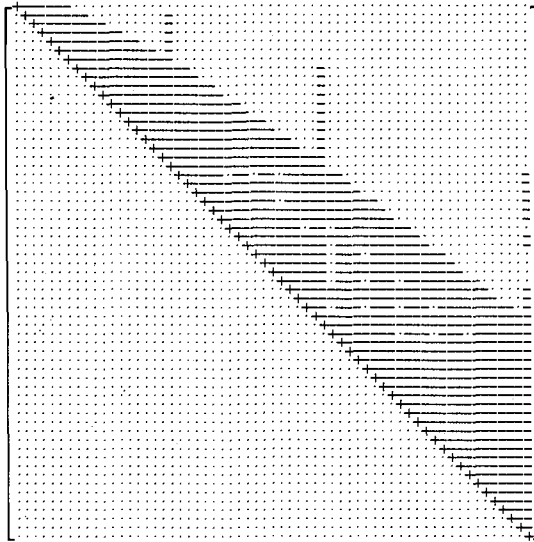
に支配される. したがって, この系に対する本手法と従来の方法との演算効率の比は

$$\frac{\tilde{\rho}}{\rho} \simeq \frac{a}{[q(D_n)]^2} \propto \frac{1}{n^2} \quad (27)$$

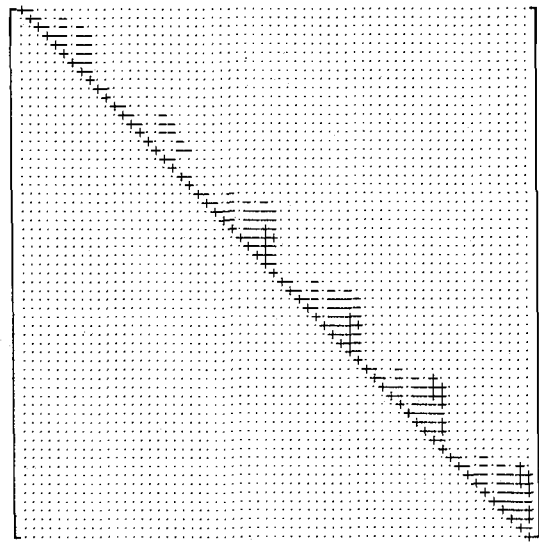
と表される. すなわち, 本手法により演算量を $1/n^2$ に減少できる.

直接法による三角行列の配列容量は

$$\phi = \frac{N^2 + N}{2} \quad (28)$$



(a) 直接法による上三角行列 U



(b) ブロック上三角化行列 $\tilde{U}$

図-2 上三角行列 U とブロック上三角化行列 $\tilde{U}$

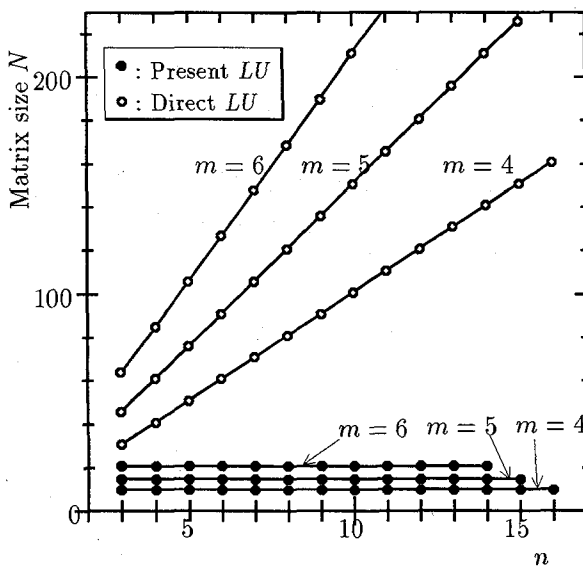


図-3 $3 \leq n \leq 16, 4 \leq m \leq 6$ における行列サイズ

と表され、本手法による配列量は

$$\tilde{\phi} \simeq a \left(\frac{N^2}{q(D_n)} \right) = a \frac{m(m+1)}{2} N \quad (29)$$

と計算できる。本手法と従来の方法による配列の圧縮率は

$$\frac{\tilde{\phi}}{\phi} \simeq \frac{a}{q(D_n)} \propto \frac{1}{n} \quad (30)$$

となる。このように、本手法は所要配列容量の圧縮にも有効である。

(2) 実行列の演算効率と所要配列容量の評価

NEC 製 EWS-4800 を用いて D_n 不変 m 層ドーム構造の剛性行列のプログラムを作成し、この行列を修正

Cholesky 法により直接分解したときと、本手法に基づいて分解したときとの計算時間および所要配列容量をそれぞれ実測した。計算機の実環境としてはシングルタスクでバッチ処理方式のほぼ同一条件で行なった。

図-2(a) は剛性行列を直接修正 Cholesky 分解したときの U を、図-2(b) は本手法によりブロック三角化した $\tilde{U}$ を示す。ここに、パラメータ $(n, m) = (6, 4)$ 、行列内の $+$ は正値を、 $-$ は負値を、ドット ($\cdot$) はゼロ成分をそれぞれ表す。本手法では、並列計算機を用いるときには各既約表現に対応する U^{μ} の配列を、また、単一計算機では全既約表現の中で最大の行列サイズの配列容量をそれぞれ確保しておけば十分であるので、所要記憶容量の大幅な縮小が図れる。

図-3 は系のパラメータ m と n と行列サイズ N との関係を示す。図中の ($\circ$) 印が直接法、($\bullet$) 印が本手法に対するデータの値をそれぞれ表す。直接法では n は N にほぼ線形な関係で増加するのに対し、本手法では n が増加しても n 個の既約表現が出現するために、1 つの既約表現に対する N^{μ} は一定値となり、その行列の縮小化に伴う効果は大きい。

図-4 は三角行列の有効な成分の配列容量をパラメータ n と m の関数としてプロットしたものである。図中の本手法のデータ ($\bullet$) は、直接法のデータ ($\circ$) に比べて配列容量の所要量が非常に少なくなっている。

図-5 は $U^T D U$ 分解に費やした実計算時間を n に対する対数目盛りでプロットしたものであり、図中の直線はそれぞれの m に対する回帰直線を表す。表-1 に回帰直線の式を示す。表-1 から m に関係なく平均化すると直接法ではほぼ n^3 に、本手法では n にそれぞれ比例

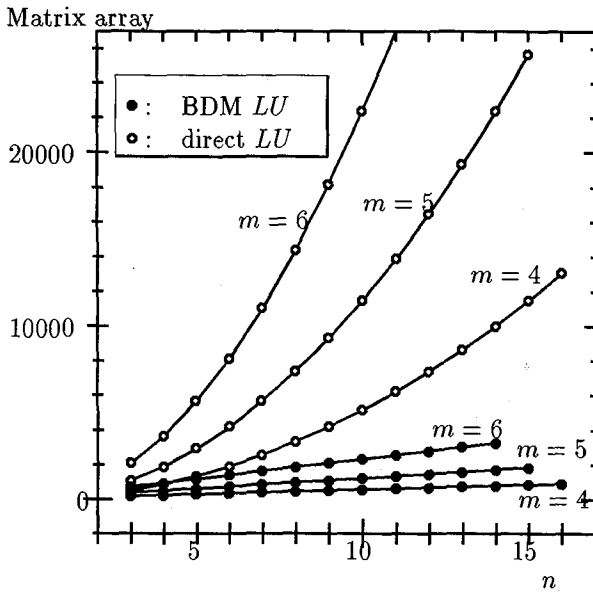


図-4 $3 \leq n \leq 16, 4 \leq m \leq 6$ に対する $\tilde{\phi}$ および ϕ

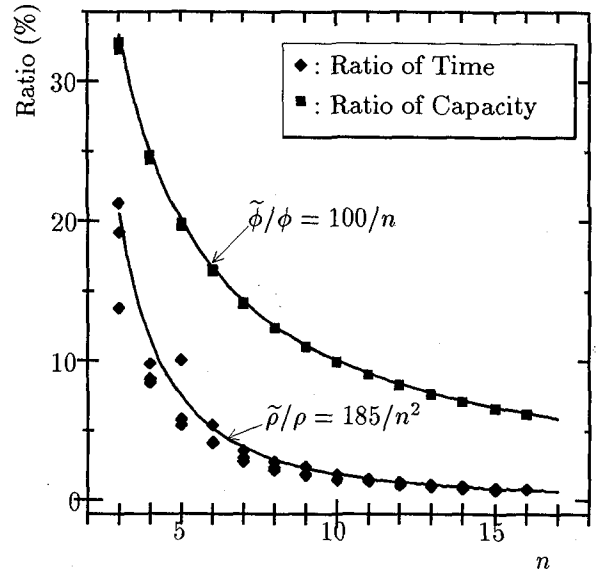


図-6 $3 \leq n \leq 16, 4 \leq m \leq 6$ に対する所要配列容量の圧縮比率と計算効率の比較

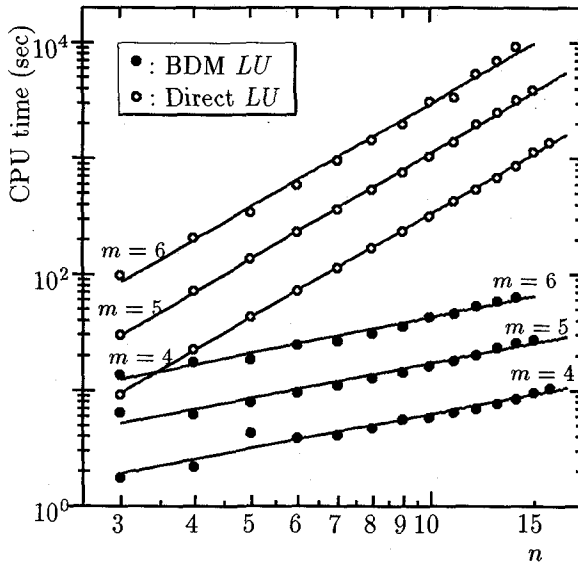


図-5 $3 \leq n \leq 16, 4 \leq m \leq 6$ に対する $U^T D U$ 分解の実測時間

表-1 n に対する実計算時間の回帰直線式

	直接法	本手法
$m=4$	$\bar{\rho} = n^{2.95} + 0.369$	$\tilde{\rho} = n^{0.984} + 0.642$
$m=5$	$\bar{\rho} = n^{3.01} + 1.07$	$\tilde{\rho} = n^{0.992} + 1.72$
$m=6$	$\bar{\rho} = n^{2.95} + 3.30$	$\tilde{\rho} = n^{1.03} + 3.95$
傾向	$\bar{\rho} = n^{2.97} + b$	$\tilde{\rho} = n^{1.00} + b$
効率	$\tilde{\rho}/\bar{\rho} \propto 1/n^{1.97} \propto 1/N^2$	

することが分かる。計算効率比は、算定式(27)による値 $1/n^2$ と、計算結果による値 $1/n^{1.97}$ が非常によく一致しており、算定式の妥当性ならびに本解法の実計算効果を示している。以上の結果から n を変化させたときの両手法の所要配列容量と計算効率の比率を図-6に示す。図中の印(■)は所要配列容量の圧縮比率を示し

ており、 n の増加に伴い、比率は低下する。すなわち、本手法の圧縮比率が相対的に向上する。また、このデータから平均化した近似式は $1/n$ に比例することが確かめられた。同様に、印(◆)で示す計算時間の効率比も、多少ばらつきはあるものの $1/n^2$ に比例することが実際に確かめられ、演算効率評価の妥当性を示せた。

(3) Z条件数による誤差評価

図-1のドーム構造の LU 分解後の三角行列 U の誤差評価として式(22)の条件数⁴ について実際に計算を行った⁵。一般に条件数は行列の条件の悪さを測る尺度として用いられるが、ここではパラメータ (n, m) に伴う N 条件数と Z 条件数の変化を調べ、直接 LU 分解法と本手法による三角行列の条件の悪さを測ることとする。すなわち、式(22)の計算は1より大きく、1に近いほど良好と言える。

パラメータ (n, m) の変化による行ノルム計算の Z 条件数の結果については図-7に示す。従来の直接法では本手法に比べ (n, m) の増加に対して行列 U の条件が悪化しており、行列誤差の影響は大きいことが推察される。これに対して、本手法は直接法に比べ (n, m) が増加しても Z 条件数はほぼ一定値を維持し、その行列の条件の良好さを示している。両手法とも三角行列は正規化されているに関わらず、解析方法にはっきりとした違いが現れた。このことにより、本手法は直接法より U についての誤差が低く抑制され、計算の信頼

⁴ 条件数には行列のノルムの定義に基づき、ユークリッドノルム計算の N 条件数、行ノルム計算の Z 条件数、固有値計算からの P 条件数とスペクトル条件数などがある(文献 8), 9)などを参照)。

⁵ P 条件数とスペクトル条件数については、異なるブロックに固有値が散逸するのでこれらの条件数の計算はここでは割愛する。

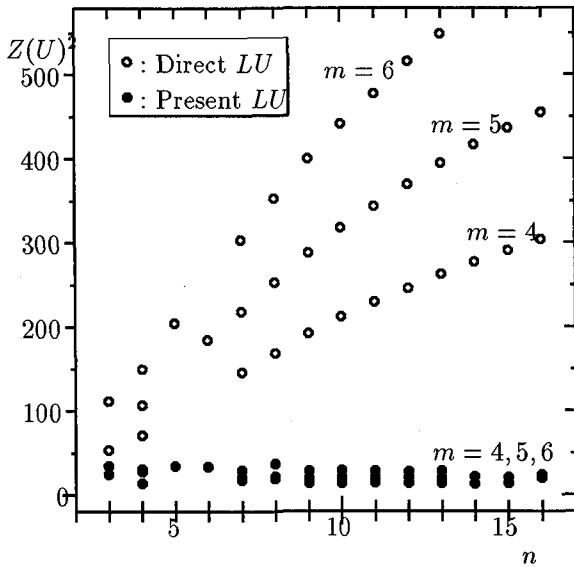


図-7 三角行列の条件数 φ_1

性も向上できる可能性が実計算により確かめられた。

結 論

本研究では、ブロック対角化法に基づく LU 分解を用いることにより、対称構造系の剛性行列に対する修正 Cholesky 分解を高速化かつ並列化する手法を示し、その演算効率の高さと所要配列の少なさを実構造例に示せた。今後の課題として、本格的な構造解析への適用が望まれる。

付 録 $U^T D U$ 行列の相対誤差評価式

$U^T D U$ 分解後の相対誤差評価式の誘導を行う。理論上は行列 K の誤差評価式に帰着するが、行列ノルムの積となるので計算上は丸め誤差等が拡大されて現れる。ここでは、三角行列 U の誤差 δU についてのみ着目し、対角行列 D のノイズは考慮しないものと仮定する。 $U^T D U$ 分解式は

$$(f + \delta f) = (U^T + \delta U^T) D (U + \delta U) (u + \delta u)$$

として表される。これに、 $U^T D U u = f$ を用いると

$$\delta u = (U^T D U)^{-1} (\delta f - \varphi_0 (u + \delta u))$$

ここに、

$$\varphi_0 = \delta U^T D U + U^T D \delta U + \delta U^T D \delta U$$

が得られるから、 $\|\delta u\|$ に適した行列ノルムを用いて、

$$\begin{aligned} \|\delta u\| &\leq \|(U^T D U)^{-1}\| (\|\delta f\| + \|\varphi_0 (u + \delta u)\|) \\ &\leq \|U^{-1}\| \cdot \|D^{-1}\| \cdot \|(U^T)^{-1}\| \\ &\quad \times (\|\delta f\| + \|\varphi_0 (u + \delta u)\|) \end{aligned}$$

となり、 $\|\delta u\|$ にかかる項を左辺に移行すると

$$\begin{aligned} \left(1 + \frac{\|\varphi_0\|}{\|D\|}\right) \|\delta u\| &\leq \|U^{-1}\| \cdot \|D^{-1}\| \cdot \|(U^T)^{-1}\| \\ &\quad \times (\|\delta f\| + \|\varphi_0\| \cdot \|u\|) \end{aligned}$$

$$\leq \|U^{-1}\| \cdot \|(U^T)^{-1}\| \left(\frac{\|\delta f\|}{\|D\|} + \frac{\|\varphi_0\| \cdot \|u\|}{\|D\|} \right)$$

と得られる。 $\|f\| \leq \|U^T\| \cdot \|D\| \cdot \|U\| \cdot \|u\|$ を用いて $\|\delta U^T\| < 1, \|\delta U\| < 1$ と仮定すると、

$$(1 - \varphi_2) \|\delta u\| \leq \varphi_1 \|u\| \left(\frac{\|\delta f\|}{\|f\|} + \varphi_3 \right)$$

となり、この式の両辺を $\|u\|$ で割ると

$$\frac{\|\delta u\|}{\|u\|} \leq \frac{\varphi_1}{1 - \varphi_2} \left(\frac{\|\delta f\|}{\|f\|} + \varphi_3 \right)$$

の誤差評価式が導ける。ここに、

$$\begin{aligned} \varphi_1 &= (\|U^T\| \cdot \|U\|) (\|U^{-1}\| \cdot \|(U^T)^{-1}\|) \\ &= (\|U^T\| \cdot \|(U^T)^{-1}\|) (\|U\| \cdot \|U^{-1}\|) \\ &= \text{cond}(U^T) \text{cond}(U) \end{aligned}$$

$$\varphi_2 = (\|U^T\| + \|\delta U^T\|) (\|U\| + \|\delta U\|) - \|U^T\| \cdot \|U\|$$

$$\begin{aligned} \varphi_3 &= \frac{\|\delta U^T\|}{\|U^T\|} + \frac{\|\delta U\|}{\|U\|} + \frac{\|\delta U^T\| \cdot \|\delta U\|}{\|U^T\| \cdot \|U\|} \\ &= \left(1 + \frac{\|\delta U^T\|}{\|U^T\|}\right) \left(1 + \frac{\|\delta U\|}{\|U\|}\right) - 1 \end{aligned}$$

である。以上からベクトル u の誤差は条件数 φ_1 によって拡大される可能性があり、 $U^T D U$ の U に対する相対誤差評価式を導ける。

参考文献

- 1) Zloković, G. : Group Theory and G-vector Spaces in Vibrations, Stability and Statics of Structures, ICS, Beograd, (In English and Serbo-Croatian), 1973.
- 2) Dinkevich, S. : Finite symmetric systems and their analysis, *International Journal of Solids and Structures*, 27(10), pp. 1215-1253, 1991.
- 3) Healey, T.J. and Treacy, J.A. : Exact block diagonalization of large eigenvalue problems for structures with symmetry, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 31, pp. 265-285, 1991.
- 4) Murota, K. and Ikeda, K. : Computational use of group theory in bifurcation analysis of symmetric structures, *SIAM Journal on Statistical and Scientific Computing*, 12(2), pp. 273-297, 1991.
- 5) Ikeda, K. and Murota, K. : Bifurcation analysis of symmetric structures using block-diagonalization, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 86(2), pp. 215-243, 1991.
- 6) Ikeda, K., Ario, I. and Torii, K. : Block-diagonalization analysis of symmetric plates, *International Journal of Solids and Structures*, 29(22), pp. 2779-2793, 1992.
- 7) Ario, I., Ikeda, K. and Murota, K. : Block-diagonalization method for symmetric structures with rotational displacements, *Journal of Structural Mechanics and Earthquake Engineering, JSCE*, No. 489/I-27, pp. 27-36, 1994.
- 8) R. Anthony and R. Philip : A First Course in Numerical Analysis, 2nd ed., McGraw-Hill, Inc., 1978.
- 9) 林 正・濱田 政則, 土木学会編 新体系土木工学 1, 数値解析, 技報堂出版, 1994.