博士課程（前期）論文要旨，2008 年 1 月 31 日

グラフ理論を応用した高速有限要素法ソルバーの開発

野田智之，複雑系科学専攻, 350604215

本研究では，有限要素法で得られる大規模で疎な正定値実対称行列を係数とする連立 1 次方程式を解くためのソルバーを開発した．これまで，大規模で疎な正定値実対称行列に適した直接法としてマルチフロンタル法が注目されてきた．マルチフロンタル法では，Cholesky 分解された下三角行列の非零成分の集合が木構造のグラフ (消去木) を形成することを利用して，非零成分のみを選択的に計算する．その際，前処理として，Cholesky 分解後に非零となる fill-in 成分を減らすために行列を並び替える ND 法や，計算順に行列を並び替えるポストオーダリングなどが提案されている．また，下三角行列の列ごとに非零成分の集合を求めるアルゴリズムであるシンボリック分解が提案されている．本研究では，これらの手法を取り入れたマルチフロンタル法のプログラムを開発した．その性能は，研究室で開発された従来のプログラムや公開されているプログラムとの比較によって確認した．

キーワード: 有限要素法, マルチフロンタル法, ND 法, ポストオーダリング, シンボリック分解

1　はじめに

偏微分方程式の境界値問題に対する数値モデルの大規模化は連立方程式の大規模化をもたらす．有限要素法によって得られる標準的な連立方程式は，大規模で疎な正定値実対称行列を係数とする連立 1 次方程式となる．このような疎な行列の問題を解くためには零成分を排除した計算法を用いることで計算量を飛躍的に節約できることが知られている．また，悪条件の行列に対しては間接法よりも直接法が有利であることが知られている．これまで，大規模で疎な正定値実対称行列に適した直接法としてマルチフロンタル法が注目されてきた．

本研究では，マルチフロンタル法とそれに付随する前処理を取り入れて，有限要素法解析に適したソルバーの開発を目指した．

2　理論と方法

正定値実対称行列 $\boldsymbol{A}$ を係数とする連立 1 次方程式 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$ を下三角行列 $\boldsymbol{L}$ に Cholesky 分解 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{LL}^{\mathrm{T}}$ あるいは修正 Cholesky 分解 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{LDL}^{\mathrm{T}}$ し，二つの代入計算 $\boldsymbol{Lz} = \boldsymbol{b}$, $\boldsymbol{L}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{z}$ あるいは $\boldsymbol{DL}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{z}$ を行う方法を Cholesky 法あるいは修正 Cholesky 法と呼ぶ．

$\boldsymbol{A}$ が疎のとき，$\boldsymbol{L}$ の非零成分は，例えば図 1 のようになる．ただし，$\bullet$ は $\boldsymbol{A}$ の対応成分が非零の成分，$\circ$ は Cholesky 分解後に非零となる fill-in 成分を表す．ここで，$\boldsymbol{L}$ の対角成分をノードと呼び，$i = \min_k\{k > j \mid L_{kj} \neq 0\}$ のとき，ノード i はノード j の親であると関連付ける．この関係はノードの集合について図 2 のような木構造のグラフ (消去木) を与える．

マルチフロンタル法では，次の計算を繰り返す (図 3 参照)．消去木を深さ優先探索し，最初にノード i を選ぶ．$\boldsymbol{A}$ の i 列 (A_{*i}) 非零成分を第 1 列にした下三角行列 $\boldsymbol{A}_i$ を作る．最初のノードのときは $\boldsymbol{A}_i$ をフロンタル行列 $\boldsymbol{F}_i$ とする．$\boldsymbol{F}_i$ に Cholesky 分解の最初の消去演算を施し $\boldsymbol{F}_i^{\mathrm{e}}$ を得る．$\boldsymbol{F}_i^{\mathrm{e}}$ の第 1 列は L_{*i} となる．$\boldsymbol{F}_i^{\mathrm{e}}$ から第 1 列を除いたアップデート行列 $\boldsymbol{U}_i$ を作る．次に，深さ優先探索順に次のノード j を選ぶ．ノード j のフロンタル行列 $\boldsymbol{F}_j$ は次のように作る．ノード j の $\boldsymbol{A}_j$ を作り，ノード j を親に持つノード $k \in \mathcal{N}_j$ のアップデート行列 $\boldsymbol{U}_k$ を $\boldsymbol{A}_j$ に合わせて拡張した行列 $\bar{\boldsymbol{U}}_k$ ($k \in \mathcal{N}_j$) を作りながら $\boldsymbol{A}_j$ に足し合わせて $\boldsymbol{F}_j$ を作る．$\boldsymbol{F}_j$ に Cholesky 分解の最初の消去演算を施し $\boldsymbol{F}_j^{\mathrm{e}}$ (第 1 列は L_{*j}) を得る．この計算を深さ優先探索順に繰り返すことで $\boldsymbol{L}$ を得る．

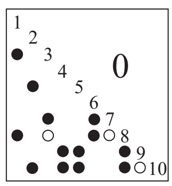

Fig. 1　$\boldsymbol{L}$ の非零成分

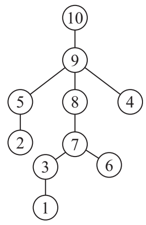

Fig. 2　消去木

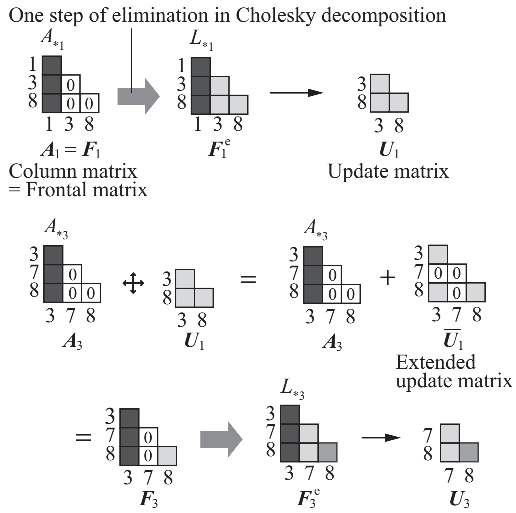

Fig. 3　マルチフロンタル法における演算

マルチフロンタル法の性能を上げる前処理として，行列の並べ替え手法が提案されている．Fill-in の成分を減らすために ND (Nested dissection) 法，消去木の深さ優先探索順にノード番号を入れ替えるポストオーダリング，メモリを最小化する最適ポストオーダリングなどが提案されている．並べ替えでは，行列の対称性を失わないように置換行列 $\boldsymbol{P}$ を用いた同時置換 $\tilde{\boldsymbol{A}} = \boldsymbol{PAP}^{\mathrm{T}}$, $\tilde{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{Px}$, $\tilde{\boldsymbol{b}} = \boldsymbol{Pb}$ が行われる．また，列の非零成分の集合を求めるアルゴリズムとして，シンボリック分解が提案されている．

本研究では，これらの手法を取り入れたマルチフロンタル法のプログラムを開発した．その性能は，研究室で開発された従来のソルバーや公開されているソルバーとの比較によって確認した．