応用数理工学特論特論：第6回講義ノート

担当：江口　浩平，　森　貴章

4．連立一次方程式の直接解法 (疎行列の場合)

疎行列：成分のほとんどが 0 である行列
以下に示す**ポアソン方程式**の数値解法などに表れる．

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = f(x, y)$$

- 応用：熱伝導，熱電場，流体力学，応力とひずみの解析 $\cdots$

- 物理的意味：ある点での u の値＝その周囲での u の値の平均値＋外力の項

4.1　差分法により生じる行列

二次元ポアソン方程式の離散化

- 5×5 の二次元格子
- 差分法で離散化→疎行列

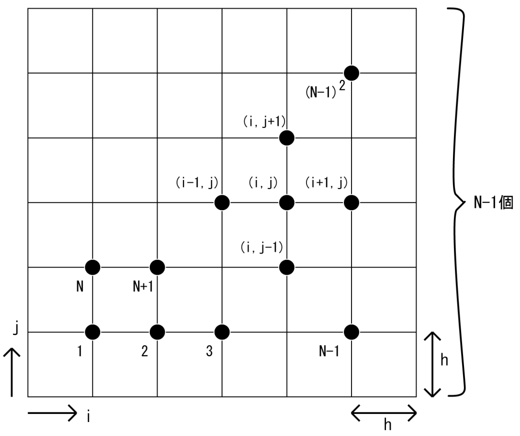


Fig. 1 差分法により生じる行列

点　(ih, jh)　での u の値を u_{ij} と書く．

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \cong \frac{u_{i-1,j} - 2u_{i,j} + u_{i+1,j}}{h^2} \tag{1}$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \cong \frac{u_{i-1,j} - 2u_{i,j} + u_{i+1,j}}{h^2} \tag{2}$$

$$\frac{1}{h^2}(u_{i-1,j} + u_{i+1,j} + u_{i,j-1} + u_{i,j+1} - 4u_{ij}) = f_{ij} \tag{3}$$

- 未知数　$(N-1)^2$ 個
- 方程式　$(N-1)^2$ 本

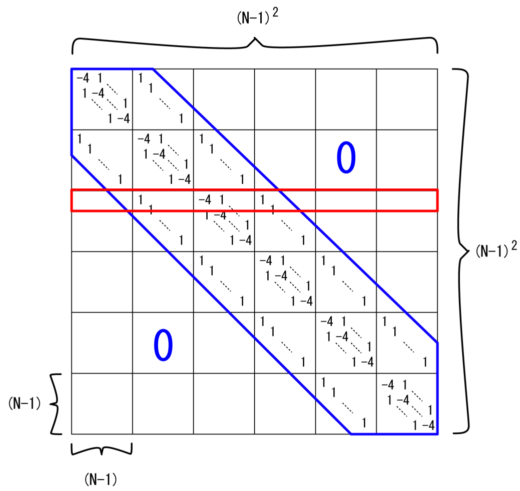


Fig. 2 差分法により生じる疎行列

非ゼロ要素は各行最大 5 個→疎行列 (Fig.2)
ガウスの消去法ではゼロ要素の考慮はされない．

4.2　疎行列向けの解法

直接法 $\cdots$ ガウスの消去法に基づく

- 帯ガウス法
- スパースソルバ

長所

1. 行列が正定値 (固有値が全て正) であれば必ず解が求まる．
2. 必要なメモリ量・計算時間が事前に予測可能．

短所

1. 必要なメモリ量が大きい (フィルインのため)

反復法 ··· 解を逐次的に改良

- ヤコビ法，SOR 法
- クロリフ部分空間法
  CGS
  Bi-CGSTAB
  GPBi-CG

長所

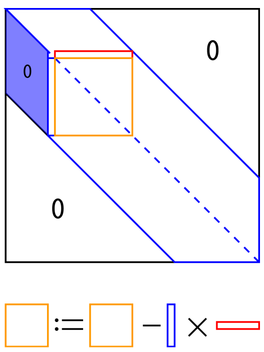
1. 必要なメモリ量が小さい (元の行列のみを使って計算可能).
2. うまくいく場合は非常に高速.

短所

1. 収束しない場合，収束に非常に時間のかかる場合がある.

4.3 帯ガウス法

帯行列向けの解法



ピボット列の長
＝ピボット行の長さ
$= m$

1 ステップの演算量 $= O(m^2)$
全演算量 $= O(m^2 n)$

Fig. 3 帯行列の場合の演算量

100×100 **格子の場合**

行列サイズ　$n = \cong 10^4$
帯幅　$m \cong 100$
ガウスの消去法の演算量：$(10^4)^3$
帯ガウス法の演算量：$(100)^2 \cdot 10^4 = 10^8$

並列性

P 個のプロセッサを使う場合，並列粒度は $O(\frac{m^2}{P})$ →小さい

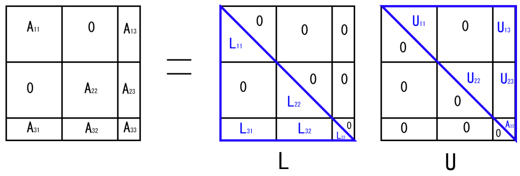


Fig. 4 縁つきのブロック対角系

スパースソルバ

係数行列を行・列の置換 (オーダリング) により，縁つきのブロック対角系に変形

$$L_{11}U11 = A_{11} \tag{4}$$
$$L_{11}U13 = A_{13} \tag{5}$$
$$L_{22}U22 = A_{22} \tag{6}$$
$$L_{23}U23 = A_{23} \tag{7}$$
$$L_{31}U11 = A_{31} \tag{8}$$
$$L_{32}U22 = A_{32} \tag{9}$$
$$L_{31}U13 + L_{32}U23 + L_{33}U33 = A_{33} \tag{10}$$

- $A_{11} = L_{11}U11$ と LU 分解
- $A_{22} = L_{22}U22$ と LU 分解

LU 分解ができることと L_{11}^{-1}, U_{11}^{-1} などが存在することは A が正定値であれば保障される．また，この過程が演算量の大部分を占め，二個の CPU で独立に実行可能である．

- $U_{13} = L_{11}^{-1} A_{13}$
- $U_{23} = L_{22}^{-1} A_{23}$
- $L_{31} = A_{31} U_{11}^{-1}$
- $L_{32} = A_{32} U_{22}^{-1}$
- $A_{33} - L_{31}U_{13} - L_{32}U_{23} = L_{33}U_{33}$ と実行可能

縁が狭ければ演算量は小さい．

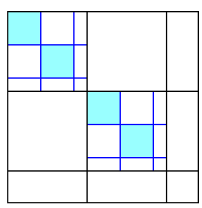


Fig. 5 並列化のための分割