

JAERI-Data/Code

JP0150749

2001-024



2階線形微分方程式に対する Waveform Relaxation 法

2001年8月

山田 進

日本原子力研究所
Japan Atomic Energy Research Institute

本レポートは、日本原子力研究所が不定期に公刊している研究報告書です。
入手の問合せは、日本原子力研究所研究情報部研究情報課（〒319-1195 茨城県那珂郡東海村）あて、お申し越し下さい。なお、このほかに財団法人原子力弘済会資料センター（〒319-1195 茨城県那珂郡東海村日本原子力研究所内）で複写による実費頒布を行っております。

This report is issued irregularly.

Inquiries about availability of the reports should be addressed to Research Information Division, Department of Intellectual Resources, Japan Atomic Energy Research Institute, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken 〒319-1195, Japan.

2階線形微分方程式に対する Waveform Relaxation 法

日本原子力研究所計算科学技術推進センター
山田 進

(2001年7月2日受理)

Waveform relaxation (WR) 法は微分方程式の初期値問題の並列数値解法の 1 つであり、方程式系をいくつかのブロックに分割し、各ブロックを並列に反復計算する解法である。最も単純な WR 法である Picard 反復は積分区間が大きい場合や方程式が stiff な場合などには収束性が悪い。そのため、成分を重複させて分割する overlapping 法や行列指數関数を用いた前処理法などの収束性を向上させるための様々な解法が提案されている。本研究では 2 階線形微分方程式 $y'' = Qy + g$ に対する overlapping 法の収束性について考察する。また、並列計算機を用いた数値計算の結果から、収束性が改善された解法の性能および計算時間を評価する。

Waveform Relaxation Methods
for Second Order Linear Differential Equations

Susumu YAMADA

Center for Promotion of Computational Science and Engineering
Japan Atomic Energy Research Institute
Nakameguro, Meguro-ku, Tokyo

(Received July 2, 2001)

A waveform relaxation (WR) method is one of the numerical methods for solving large systems of ordinary differential equations (ODEs) on parallel computers. Picard iteration, which is one of the simplest WR methods, needs an enormous number of iterations to get a suitably accurate answer, when the interval of integration is long or the stiffness ratio of the equation is large. Therefore, overlapping schemes which make some of the elements between the adjacent subsystems overlapped have been proposed to accelerate the convergence. In this paper, the convergence of the overlapping methods for the second order linear ODEs $y'' = Qy + g$ is investigated. Moreover, the method is implemented on a distributed memory parallel computer and the efficiencies and the elapsed times for various overlapping numbers are examined.

Keywords : Waveform Relaxation, Iterative Method, Overlapping, Second Order ODEs

目次

1. はじめに	1
2. 2階線形微分方程式に対する Waveform Relaxation 法の収束性	2
2.1 Picard 反復	2
2.2 Splitting 法	3
2.3 Overlapping 法	4
3. 数値実験	6
3.1 WR 法の計算方法	6
3.2 1 次元の波動方程式	7
3.3 2 次元の波動方程式	12
4. まとめ	16
謝辞	16
参考文献	17
付録 A. 行列の平方根と行列三角関数	18

Contents

1. Introduction	1
2. Convergence of Waveform Relaxation Methods for Second Order Linear Differential Equations	2
2.1 Picard Iteration	2
2.2 Splitting Method	3
2.3 Overlapping Methods	4
3. Numerical Experiments	6
3.1 How to Implement WR Methods	6
3.2 One-dimensional Wave Equation	7
3.3 Two-dimensional Wave Equation	12
4. Conclusion	16
Acknowledgements	16
References	17
Appendix A. Square Root and Trigonometric Functions of Matrix	18

1 はじめに

微分方程式は、 Isaac Newton が天体運動を表わすために提案したのが始まりだと言われている。その後、微分方程式は天体運動に限らず数多くの現象を表わすのに用いられ、またその解析的な解法も研究されており、3個の物体が相互に影響を与えていた運動を表わす微分方程式(3体問題)は、解析的には解くことができないことが証明されている。このことから、微分方程式を数值的に計算することは必要不可欠であることがわかる。事実、コンピュータが発明される以前から Euler 法や Runge-Kutta 法などの数値解法が研究、開発されていた。また、コンピュータが開発されてからは、より高度な数値解法が提案され、より複雑な微分方程式を高速かつ高精度で計算することが可能になってきている。

また近年、大規模な問題をいくつかの小さい問題に分割し、それらを並列に高速計算する並列計算機が実用化されてきている。初期値問題も例外ではなく、様々な並列計算手法が提案されてきている。その中で、偏微分方程式を離散化した際に得られる大規模な微分方程式向きの並列解法の1つに Waveform Relaxation 法 (WR 法) がある [1],[5],[10],[12],[13]。よく知られている WR 法に、初期値問題 $y'(t) = f(t, y(t))$, $y(t_0) = y_0$ に対して

$$y^{[\nu+1]}(t) = y_0 + \int_{t_0}^t f(t, y^{[\nu]}(t)) dt, \quad \nu = 0, 1, \dots$$

という反復を行なう Picard 法がある。この反復では、反復計算時に前回の反復で得られた関数値を用いて計算するため各成分が独立に計算でき、優れた並列性を持つことがわかる。しかし、収束性に関しては有限の積分区間にに対して最終的に真の解に超一次収束するが、積分区間が大きい場合や方程式が stiff の場合など非常に多くの反復回数が必要であることが知られている [1],[4],[6]。そのため、方程式が線形の場合に、収束性を改善する WR 法として係数行列を $Q = N - M$ と分割して、方程式を

$$y^{[\nu+1]'}(t) + My^{[\nu+1]}(t) = Ny^{[\nu]}(t) + g(t)$$

のようにいくつかのブロックに分割し、各ブロックごとに反復を行なう splitting 法や成分を重複させて分割する overlapping 法が提案され、実際にこれらの解法を用いた数値計算によって収束性が改善されている [2],[9],[14]。

本研究では1次元および2次元の波動方程式を離散化して得られる2階線形微分方程式

$$y''(t) = Qy(t) + g(t), \quad y(t_0) = y_0, \quad y'(t_0) = y'_0$$

に対する splitting 法および overlapping 法の収束性について理論的に考察する。また、並列計算機 SR2201 を用いた数値実験から、重複による収束性や計算時間の変化などを調べる。

2 2階線形微分方程式に対する Waveform Relaxation 法の収束性

ここでは 2 階線形微分方程式の初期値問題

$$y''(t) = Qy(t) + g(t), \quad y(t_0) = y_0, \quad y'(t_0) = y'_0, \quad t \in [t_0, T], \quad y, g \in \mathbf{R}^N, \quad Q \in \mathbf{R}^{N \times N} \quad (1)$$

に対する WR 法の収束性について述べる。

2.1 Picard 反復

2 階の微分方程式の初期値問題 (1) に対する Picard 反復は

$$y^{[\nu+1]}(t) = y_0 + (t - t_0)y'_0 + \int_{t_0}^t \int_{t_0}^s (Qy^{[\nu]}(\tau) + g(\tau)) d\tau ds \quad (2)$$

と表わせる。このとき、区間 $[t_0, t]$ およびその区間の大きさはそれぞれ window および window size と呼ばれている [1],[12]。一方、(1) の解は

$$y(t) = y_0 + (t - t_0)y'_0 + \int_{t_0}^t \int_{t_0}^s (Qy(\tau) + g(\tau)) d\tau ds \quad (3)$$

で表わせる。ここで、(2) – (3) より誤差を計算すると

$$\varepsilon^{[\nu+1]}(t) = \int_{t_0}^t \int_{t_0}^s Q\varepsilon^{[\nu]}(\tau) d\tau ds \quad (4)$$

を得る。ただし、 $\varepsilon^{[\nu]}(t) = y^{[\nu]}(t) - y(t)$ である。ここで (4) 式の両辺のノルムを計算すると、

$$\begin{aligned} \|\varepsilon^{[\nu+1]}(t)\| &= \left\| \int_{t_0}^t \int_{t_0}^s Q\varepsilon^{[\nu]}(\tau) d\tau ds \right\| \\ &\leq \int_{t_0}^t \int_{t_0}^s \|Q\varepsilon^{[\nu]}(\tau)\| d\tau ds \leq \|Q\| \int_{t_0}^t \int_{t_0}^s \|\varepsilon^{[\nu]}(\tau)\| d\tau ds \end{aligned} \quad (5)$$

を得る。このとき $\|\varepsilon^{[0]}(t)\| \leq K(t - t_0)$ を仮定すると、

$$\|\varepsilon^{[\nu]}(t)\| \leq K \frac{\|Q\|^{\nu} (t - t_0)^{2\nu+1}}{(2\nu + 1)!} \quad (6)$$

と評価できる。このことから、積分区間が有限であるなら、方程式 (1) に対する Picard 反復は収束することがわかる。また $\nu \rightarrow \infty$ のとき

$$\frac{\|\varepsilon^{[\nu+1]}(t)\|}{\|\varepsilon^{[\nu]}(t)\|} \leq \frac{\|Q\|(t - t_0)^2}{(2\nu + 2)(2\nu + 3)} \rightarrow 0$$

なので $y^{[\nu]}(t)$ は $y(t)$ へ超 1 次収束することが確認できる。

2.2 Splitting 法

次に、方程式(1)の係数行列 Q を $Q = N - M$ と分割して得られる splitting 法

$$\frac{d^2}{dt^2}y^{[\nu+1]}(t) + My^{[\nu+1]}(t) = Ny^{[\nu]}(t) + g(t) \quad (7)$$

について考える。ただし、行列 M は正定値対称行列とする。このとき、方程式(1)は

$$\frac{d^2}{dt^2}y(t) + My(t) = Ny(t) + g(t), \quad (8)$$

と変形できる。ここで、(7)-(8)を計算し、前節と同様に $\varepsilon^{[\nu]}(t) = y^{[\nu]}(t) - y(t)$ とすると

$$\frac{d^2}{dt^2}\varepsilon^{[\nu+1]}(t) + M\varepsilon^{[\nu+1]}(t) = N\varepsilon^{[\nu]}(t), \quad (9)$$

を得る。この微分方程式を解析的に計算すると

$$\begin{aligned} \varepsilon^{[\nu+1]}(t) &= (\sqrt{M})^{-1} \left(-Y_1(t) \int_{t_0}^t Y_2(\tau) N\varepsilon^{[\nu]}(\tau) d\tau \right. \\ &\quad \left. + Y_2(t) \int_{t_0}^t Y_1(\tau) N\varepsilon^{[\nu]}(\tau) d\tau \right) + Y_1(t)k_1 + Y_2(t)k_2, \end{aligned} \quad (10)$$

となる。ただし、 $Y_1(t) = \cos \sqrt{M}t$, $Y_2(t) = \sin \sqrt{M}t$ である（行列の平方根および行列三角関数については付録参照）。また k_1 , k_2 は任意定数であるが、初期条件 $\varepsilon^{[\nu+1]}(t_0) = 0$ および $\frac{d}{dt}\varepsilon^{[\nu+1]}(t)|_{t=t_0} = 0$ を考慮すると、 $k_1 = k_2 = 0$ である。そこで、(10)をまとめると

$$\begin{aligned} \varepsilon^{[\nu+1]}(t) &= (\sqrt{M})^{-1} \left(-Y_1(t) \int_{t_0}^t Y_2(\tau) N\varepsilon^{[\nu]}(\tau) d\tau + Y_2(t) \int_{t_0}^t Y_1(\tau) N\varepsilon^{[\nu]}(\tau) d\tau \right) \\ &= (\sqrt{M})^{-1} \int_{t_0}^t (Y_1(\tau)Y_2(t) - Y_1(t)Y_2(\tau)) N\varepsilon^{[\nu]}(\tau) d\tau \\ &= (\sqrt{M})^{-1} \int_{t_0}^t Y_2(t-\tau) N\varepsilon^{[\nu]}(\tau) d\tau \\ &= (\sqrt{M})^{-1} \left[Y_2(t-\tau) \int_{t_0}^\tau N\varepsilon^{[\nu]}(s) ds \right]_{t_0}^t + \int_{t_0}^t Y_1(t-\tau) \left(\int_{t_0}^\tau N\varepsilon^{[\nu]}(s) ds \right) d\tau \\ &= \int_{t_0}^t \int_{t_0}^\tau Y_1(t-\tau) N\varepsilon^{[\nu]}(s) ds d\tau. \end{aligned} \quad (11)$$

となる。また、 M は対称行列なので、あるユニタリ行列 P で $M = PDP^{-1}$ (D は対角行列) と対角化でき、ノルムをユークリッドノルムとすれば $\|P\| = \|P^{-1}\| = 1$ なので

$$\|Y_1(t-\tau)\| = \|\cos \sqrt{M}(t-\tau)\| \leq \|P\| \|\cos \sqrt{D}(t-\tau)\| \|P^{-1}\| = \|\cos \sqrt{D}(t-\tau)\| \leq 1$$

となる。ここで前節と同様に $\|\varepsilon^{[0]}(t)\| \leq K(t-t_0)$ を仮定すると、

$$\|\varepsilon^{[\nu]}(t)\| \leq K \frac{\|N\|^{\nu} (t-t_0)^{2\nu+1}}{(2\nu+1)!} \quad (12)$$

と評価でき、係数行列 Q の分割行列 M が正定値対称行列であるなら splitting 法でも超一次収束することが確認できる。

ところで、分割行列 M がブロック対角行列であるなら、splitting 法(7)は、各ブロックごとに独立（並列）に計算できる。そのため、並列計算するためには M がブロック対角行列になるように Q を分割する必要がある。

2.3 Overlapping 法

ここでは、図 2.1 のように成分を重複させて分割する overlapping 法について説明する。以下では簡単のため方程式の次元を $2n$ 、重複する成分数を μ とし、2 つに分割する場合、つまり成分の集合を $S = \{1, 2, \dots, 2n\}$ とし、これを $S_1 = \{1, \dots, n + \mu\}$ および $S_2 = \{n + 1 - \mu, \dots, 2n\}$ の 2 つに分割した場合の収束性を考える。ここで $2n$ 次対角行列 P_l, I_l を

$$\begin{aligned} P_l(i, i) &= 0, \quad i \notin S_l, \quad P_l(i, i) = 1, \quad i \in S_l \\ I_l(i, i) &= 0, \quad i \notin T_l, \quad I_l(i, i) = 1, \quad i \in T_l \end{aligned}$$

と定義する。ただし $T_1 = \{1, \dots, n\}, T_2 = \{n + 1, \dots, 2n\}$ とする。このとき M_l, N_l を $P_l Q = N_l - M_l$ ($l = 1, 2$) を満足する行列で、 M_l は正定値対称行列とする。このとき、 $y_1^{[\nu+1]}, y_2^{[\nu+1]}$ をそれぞれ S_1, S_2 に対する $\nu + 1$ 回目の反復の値とすると、overlapping 法は

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dt^2} y_l^{[\nu+1]}(t) + M_l y_l^{[\nu+1]}(t) &= N_l y^{[\nu]}(t) + g(t), \quad l = 1, 2 \\ y^{[\nu+1]} &= I_1 y_1^{[\nu+1]} + I_2 y_2^{[\nu+1]} \end{aligned} \tag{13}$$

と表せる。

このとき、 S_1, S_2 に対応する $y^{[\nu+1]}$ の成分をそれぞれ $v^{[\nu+1]}, w^{[\nu+1]}$ 、また g の成分を g_1, g_2 と表し、 $2n + 2\mu$ 次ベクトル $z(t), v(t)$ をそれぞれ

$$z(t) = \begin{pmatrix} v(t) \\ w(t) \end{pmatrix} \in \mathbf{R}^{2n+2\mu}, \quad \tilde{g}(t) = \begin{pmatrix} g_1(t) \\ g_2(t) \end{pmatrix} \in \mathbf{R}^{2n+2\mu}$$

とおき、 \tilde{M}, \tilde{N} を

$$\begin{aligned} \tilde{M}(i, j) &= \begin{cases} M_1(i, j) & , \quad 1 \leq i \leq \frac{n}{2} + \mu, 1 \leq j \leq \frac{n}{2} + \mu \\ M_2(i - 2\mu, j - 2\mu) & , \quad \frac{n}{2} + \mu + 1 \leq i \leq n + 2\mu, \frac{n}{2} + \mu + 1 \leq j \leq n + 2\mu \\ 0 & , \quad \text{otherwise} \end{cases} \\ \tilde{N}(i, j) &= \begin{cases} N_1(i, j - 2\mu) & , \quad 1 \leq i \leq \frac{n}{2} + \mu, \frac{n}{2} + 3\mu + 1 \leq j \leq n + 2\mu \\ N_2(i - 2\mu, j) & , \quad \frac{n}{2} + \mu + 1 \leq i \leq n + 2\mu, 1 \leq j \leq \frac{n}{2} - \mu \\ 0 & , \quad \text{otherwise} \end{cases} \end{aligned}$$

とすると、式 (13) は

$$\frac{d^2}{dt^2} z^{[\nu+1]}(t) + \tilde{M} z^{[\nu+1]}(t) = \tilde{N} z^{[\nu]}(t) + \tilde{g}(t) \tag{14}$$

と表せる。このとき、 \tilde{M} はブロック対角行列なので splitting 法と同様ブロックごとの並列計算が可能である。さらに、分割数が 2 以外の場合も同様の議論で、並列計算が可能なように方程式系を分割することができる。

このとき、重複している成分は重複しているブロックごとに計算され、ブロックごとに異なる値を取ることになる。そのため今回の数値実験では、計算終了時にその成分を重複数が 0、つまり $\mu = 0$ のときに計算するブロックで計算された値をその成分の値として採用することにする。

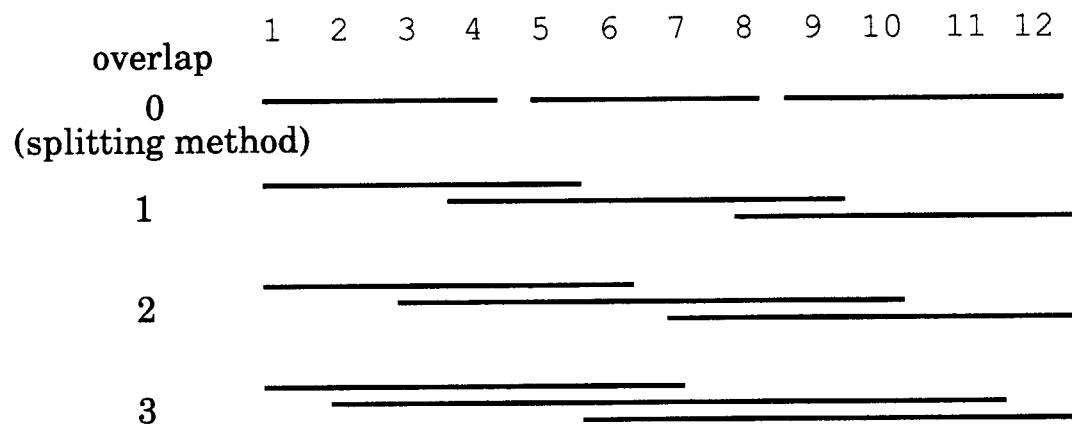


図 2.1: 12 要素の分割例

3 数値実験

ここでは、波動方程式を離散化して得られる 2 階線形連立微分方程式

$$y''(t) = Qy(t) \quad (15)$$

を WR 法で並列計算し、分割する際の成分の重複数と収束性や計算時間の関係を調べる。

3.1 WR 法の計算方法

本節では、WR 法の計算方法について簡単に説明する。WR 法は (2) のように反復方法であり、時間方向の (t についての) 積分については適当な数値積分分解法を用いる必要がある。一般に 2 階の微分方程式を数値積分するには、 $z = y'$ とおき、1 階の連立微分方程式系にして計算するが、方程式 (15) は、2 階の関数値 $y''(t)$ を計算するときに 1 階の導関数値 y' を必要としないため、今回は 2 階の方程式から直接計算できる Runge-Kutta-Nyström(RKN) 法 [3]

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= y_n + hy'_n + h^2 \mathbf{b}^T \bar{f}(\mathbf{e}t_n + \mathbf{c}h, \mathbf{Y}) \\ y'_{n+1} &= y'_n + h \mathbf{d}^T \bar{f}(\mathbf{e}t_n + \mathbf{c}h, \mathbf{Y}) \\ \mathbf{Y} &= \mathbf{e}y_n + \mathbf{c}hy'_n + h^2 A \bar{f}(\mathbf{e}t_n + \mathbf{c}h, \mathbf{Y}) \end{aligned}$$

を用いることにする。ただし、解法の安定性が収束性に影響しないように解法が A-安定になるよう係数を

$$\begin{aligned} A &= \begin{pmatrix} \frac{1}{24} & \frac{3-2\sqrt{3}}{24} \\ \frac{3+2\sqrt{3}}{24} & \frac{1}{24} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b} = \left(\frac{3+\sqrt{3}}{12}, \frac{3-\sqrt{3}}{12} \right), \\ \mathbf{c} &= \left(\frac{3-\sqrt{3}}{6}, \frac{3+\sqrt{3}}{6} \right)^T = (c_1, c_2)^T, \quad \mathbf{d} = \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right), \quad \mathbf{e} = (1, 1)^T \\ \bar{f}(t_n \mathbf{e}t_n + \mathbf{c}h, \mathbf{Y}) &= \begin{pmatrix} f(t_n + c_1 h, \mathbf{Y}) \\ f(t_n + c_2 h, \mathbf{Y}) \end{pmatrix} \end{aligned}$$

とする。この解法は 2 段 Gauss 型 Runge-Kutta 法に基づく indirect collocation 法 [11] と呼ばれるものであり、基になる Runge-Kutta 法の性質を持っている。そのため、この解法について全体の次数は 4 次、各ステージの次数は 2 次であり、安定性に関しては A-安定および P-安定である [11]。

ところで、この RKN 法は陰的解法なので、splitting 法および overlapping 法の場合には計算過程で

$$\mathbf{Y}^{[\nu+1]} = \mathbf{e} \otimes y_n + h \mathbf{c} \otimes y'_n + h^2 A \otimes (N\mathbf{Y}^{[\nu]} - M\mathbf{Y}^{[\nu+1]})$$

つまり、

$$(I + h^2 A \otimes M)\mathbf{Y}^{[\nu+1]} = \mathbf{e} \otimes y_n + h \mathbf{c} \otimes y'_n + h^2 A \otimes N\mathbf{Y}^{[\nu]} \quad (16)$$

という連立一次方程式から $\mathbf{Y}^{[\nu+1]}$ を求める必要がある。ただし、 I は単位行列である。ところで、分割行列 M が定数行列の場合には $(I + h^2 A \otimes M)$ も定数行列になる。よって一度 LU 分解しておけば、その後はその値を用いて前進・後退代入するだけで $\mathbf{Y}^{[\nu+1]}$ を求められる。また、ここで用いる RKN 法においては行列 M が三重対角の場合でも、 $A \otimes M$ は三重対角にはならないため、今回の計算では密行列用の(通常の)LU 分解を用いることにする。

表 3.1: SR2201 の性能

ピーク性能 (1CPU)		300 Mflops	
メモリ (1CPU)		256 Mbytes	
キャッシュメモリ	1 次	命令用	16 Kbytes
		データ用	16 Kbytes
	2 次	命令用	512 Kbytes
		データ用	512 Kbytes
プロセッサ間ネットワーク	方式	多次元クロスバネットワーク	
	転送速度	300 Mbytes/sec(单方向)	

ところで、これまでに示したように Picard 法や分割行列 M が正定値対称行列の splitting 法は有限な積分区間で収束するが、window size が大きい場合、反復回数が非常に多くなってしまう。そのため、実際の計算では積分区間全体を 1 つの window としないで、いくつかの window に分割し、小さい window size で反復計算するのが望ましい。ただし、分割を増やしすぎると同期や通信の回数が増加し、かえって遅くなることもあるので注意が必要である [15]。

また、今回の数値計算では分散メモリ型スカラ並列計算機 SR2201 の使用する。この SR2201 は各プロセッサ間のネットワークにはクロスバネットワークが採用されており通信速度は 300MBytes/sec である（詳しい性能は表 3.1）。さらに、プログラミング言語に Fortran、プロセッサ間のデータの通信には MPI[7] を用いて並列プログラミングする。ところで、WR 法は反復計算時には他ブロックの成分の値が必要な場合には、前回の反復での値を使用するため、window 内での計算中は通信を行う必要はない。そのため、今回作成したプログラムでは反復計算が 1 回終わるごとに同期を取り、各ブロックで必要な成分の値だけを通信するようにしている（図 3.1 参照）。以上の条件で作成されたプログラムを、制御構造の変換、演算順序の変更などを含めプログラム全体を最適化し、さらに擬似ベクトル化を行い並列計算する。

3.2 1 次元の波動方程式

ここでは波動方程式の初期値・境界値問題

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad (0 \leq x \leq 1) \quad (17)$$

初期条件、境界条件

$$u(x, 0) = \sin \pi x, \quad u(0, t) = u(1, t) = 0, \quad \frac{d}{dt} u(x, 0) = 0$$

を空間方向に 3200 分割し、空間方向の微分を 3 点差分で近似した

$$y''(t) = Qy(t), \quad y(t) = (u_1, \dots, u_{3200})^T \quad (18)$$

について、反復回数と収束の関係を調べる。ここで $x_i = i/3201$, $u_i = u(x_i, t)$ であり、行列 Q は

$$Q = \frac{1}{(\Delta x)^2} \begin{pmatrix} -2 & 1 & & & \\ 1 & -2 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & 1 & -2 & 1 & \\ & & 1 & -2 & \end{pmatrix} \in \mathbf{R}^{3200 \times 3200}$$

である。ただし、 $\Delta x = 1/3201$ である。

まず初めに、行列 $Q (= N - M)$ の分割について考える。一般には M, N の決め方は任意であるが、本実験の splitting 法では M が $d \times d$ 行列である M_d を $3200/d (= k)$ 個対角に並べたブロック対角行列 $M = \text{diag}\{M_d, \dots, M_d\}$ になる場合を考える。ここで行列 M_d は

$$M_d = \frac{1}{(\Delta x)^2} \begin{pmatrix} 2 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & -1 & 2 & -1 & \\ & & -1 & 2 & \end{pmatrix} \in \mathbf{R}^{d \times d}$$

である。実際に並列計算をする際には、このように分割した k 個のブロックにプロセッサを割り当てて計算することになる。

次に、成分を重複させて分割する overlapping 法について説明する。成分の重複の方法も分割方法と同様に任意であるが、今回の計算では図 2.1 の様に両端のブロックは片側だけ、それ以外は両側の成分を重複させる。このときの重複数を μ とすると、方程式の次元は、両端のブロックで $d + \mu$ 、それ以外は $d + 2\mu$ になる。この場合も splitting 法と同様、分割した連立方程式の各ブロックにプロセッサを割り当てて並列計算を行なう。

ここでは 32 台のプロセッサを使用して並列計算を行なう。つまり、上記の方程式系を $k = 32$, $d = 100$ となるように分割し、積分区間および window size を $[0, 10^{-3}]$ (つまり、積分区間が window size と同じ)、きざみ幅を $h = 10^{-5}$ 、反復停止条件を $\|y^{[\nu]} - y^{[\nu-1]}\| < 10^{-7}$ とし、SR2201 で並列計算した。このときの計算結果を表 3.2 に示す。ここで、次元の最大は分割した方程式系の最大のブロックの次元を、計算時間の WR 反復および平均はそれぞれ WR 法の計算時間、反復 1 回あたりの計算時間を表わしている (図 3.2 参照)。また、反復回数、WR 法の計算時間および、反復 1 回あたりの計算時間のグラフをそれぞれ図 3.3、図 3.4 および図 3.5 に示す。

この結果から、重複する成分数を増加させればさせるほど、より少ない反復回数で収束することが確認できる。また、重複数が 30 くらいまでは合計の計算時間も減少しているが、重複数がそれ以上に増加すると、重複による各ブロックの成分数の増加による反復 1 回あたりの計算量の増加が、収束性の向上による高速化の効果より大きいため、全体の計算時間が増加することも確認できる。

ところで、WR 法の反復計算において計算の大部分は連立方程式 (16) を計算する際の前進・後退代入計算であると思われる。今回の計算では、方程式 (16) を 32 個のブロックに分割したときの分割された連立方程式の最大の次元を d とおくと $d = 2(100 + 2\mu)$ である、1 つの window を 100 ステップで計算しているので 1 回の反復で 100 回前進・後退代入計算をしている。ここで、前進・後退代入計算の計算量は加算および乗算とも $d^2 + O(d)$ であるので、ここでの計算量を $2d^2$ とみなした時の計算速度 (Flops 値) を図 3.6 に示す。この結果から、本実験の計算速度はピーク

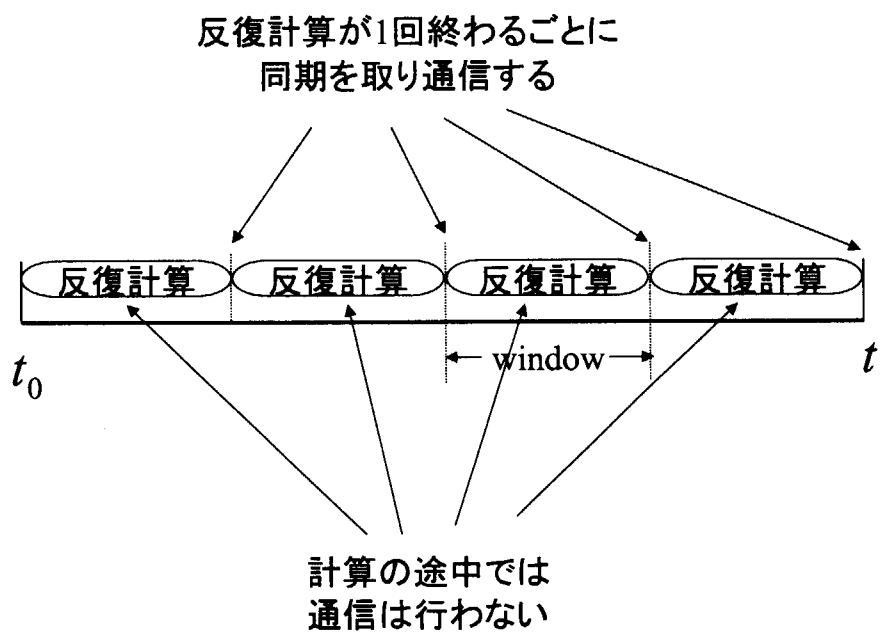


図 3.1: Window と通信の関係

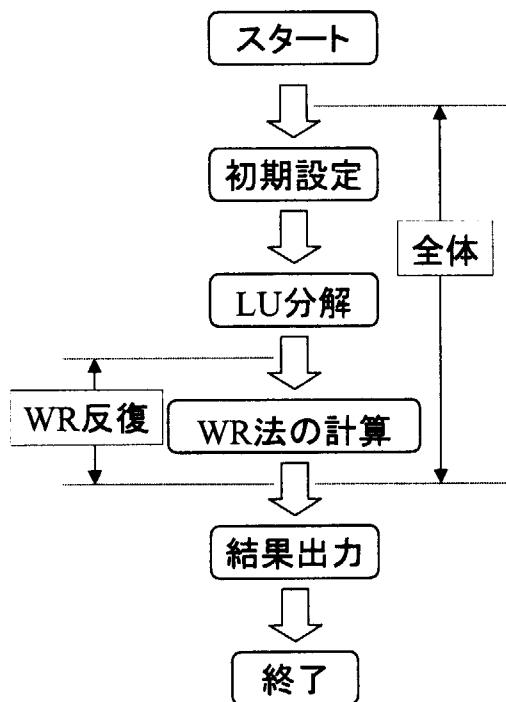


図 3.2: フローチャートおよび計算時間

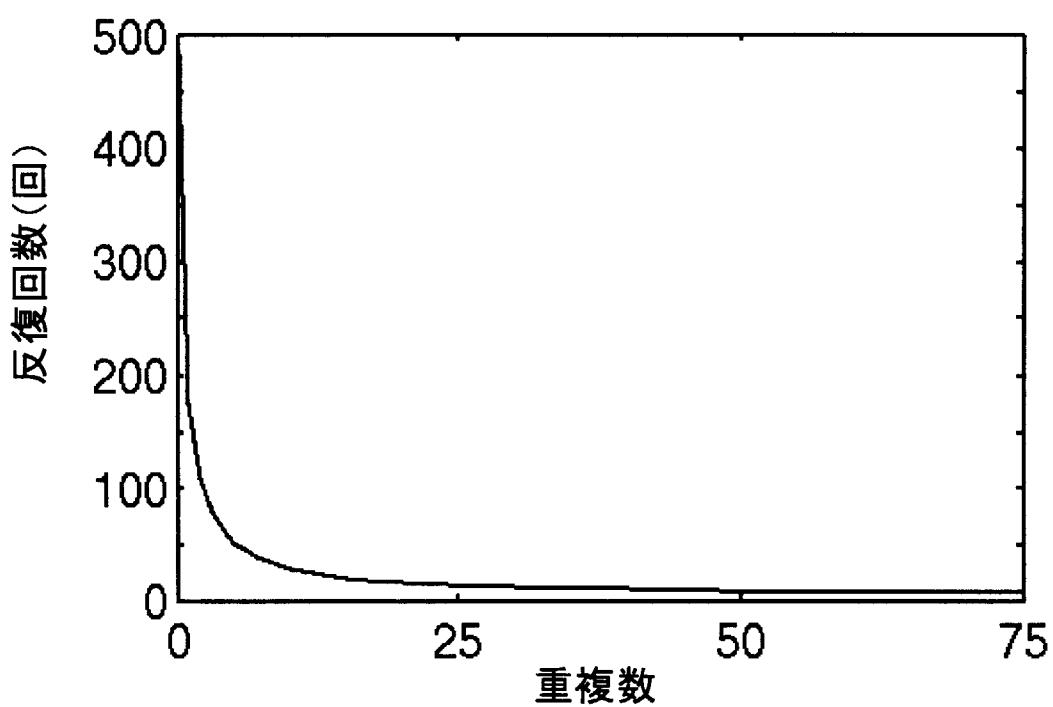


図 3.3: 反復回数

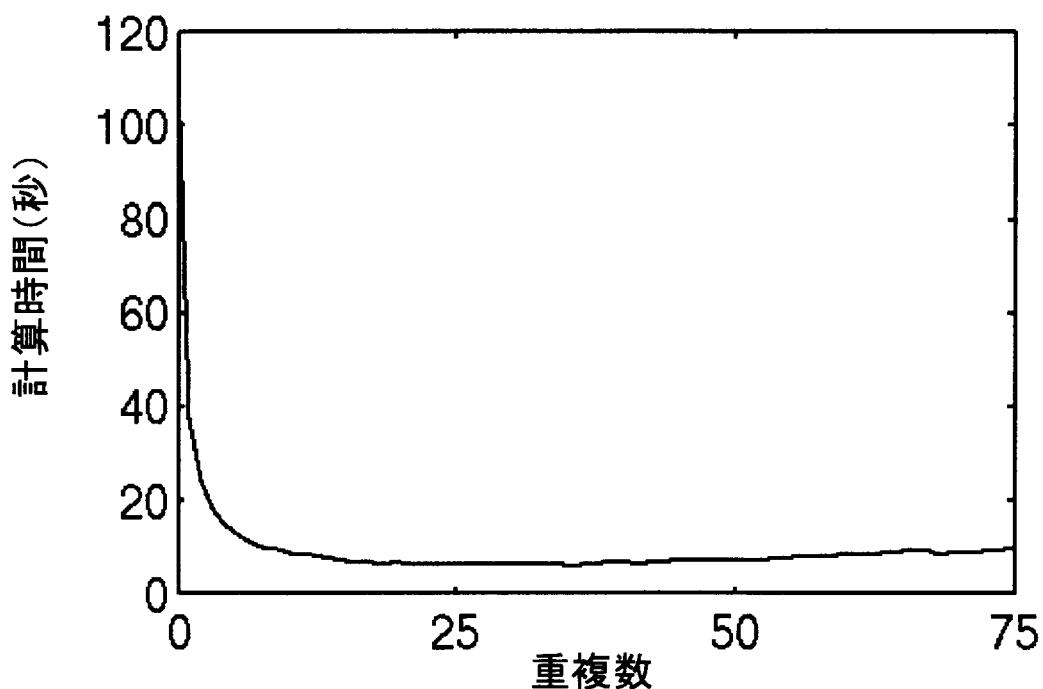


図 3.4: 計算時間

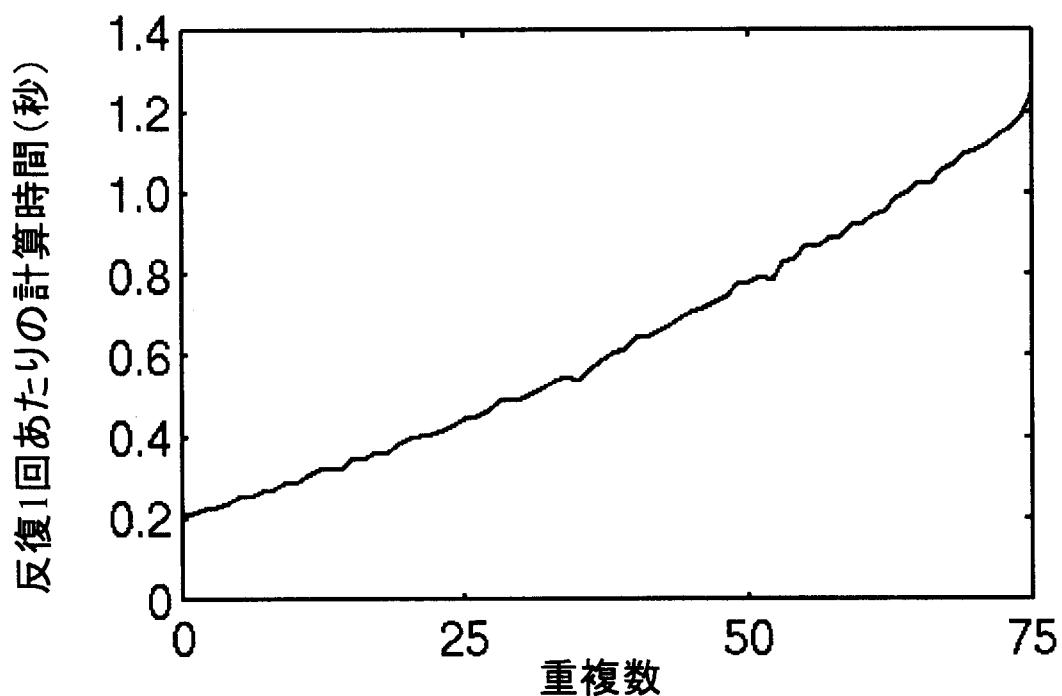


図 3.5: 反復 1 回あたりの計算時間

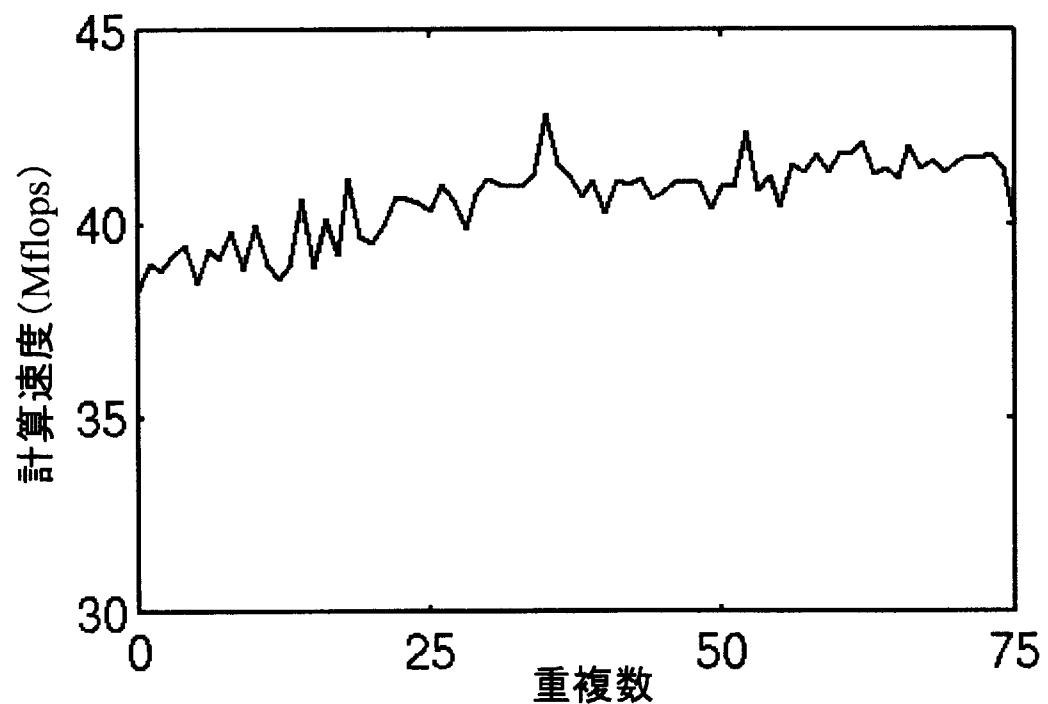


図 3.6: 計算速度

表 3.2: 計算結果

重複数 μ	次元		反復回数	計算時間(秒)			計算速度 (Mflops)
	全体	最大		合計	WR 反復	平均	
0	3200	100	483	101.063	100.798	0.209	38.996
1	3262	102	175	37.603	37.352	0.213	38.805
2	3324	104	109	24.542	24.305	0.223	39.225
3	3386	106	80	18.581	18.333	0.229	39.448
4	3448	108	64	15.402	15.139	0.237	38.456
5	3510	110	53	13.627	13.341	0.252	39.377
10	3820	120	30	8.993	8.646	0.288	38.947
20	4440	140	17	7.291	6.746	0.397	38.947
30	5060	160	13	7.272	6.469	0.498	38.894
40	5680	180	11	8.227	7.080	0.644	39.189
50	6300	200	9	8.521	7.029	0.781	39.643
60	6920	220	9	10.289	8.324	0.925	40.001
70	7540	240	8	11.436	8.865	1.108	40.648

性能の 13~14% になっており、また重複が増え 1 ブロックあたりの計算量が増えると計算速度も徐々に向上していることが確認できる。

3.3 2 次元の波動方程式

ここでは、2 次元の波動方程式

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \quad (0 \leq x \leq 1, 0 \leq y \leq 1), \quad (19)$$

$$u(x, y, 0) = \sin \pi x + \sin \pi y, \quad \frac{\partial u}{\partial t}(x, y, 0) = 0,$$

$$u(0, y, t) = u(1, y, t) = u(x, 0, t) = u(x, 1, t) = 0$$

を x, y 空間方向とともに n 分割し、右辺の偏微分を 5 点差分で近似した 2 階線形方程式 $y'' = Qy$ に対しての WR 法を考える。方程式の分割方法は任意であるが、今回の計算では収束性が優れている次の分割方法 [14] を採用する。

- 本実験での分割方法

$nk \times nk$ の空間を $n \times n$ の空間に k^2 分割する (図 3.7 参照)。つまり、ベクトル $z(t)$ を

$$z(t) = (z_{11}, z_{12}, \dots, z_{kk})^T$$

とおき $z_{11}, z_{12}, \dots, z_{kk}$ をそれぞれ独立 (並列) に計算する。ただし、 z_{ij} は近似解 $u_{l_1 l_2}$ ($in - n + 1 \leq l_1 \leq in, jn - n + 1 \leq l_2 \leq jn$) を添字に関して辞書式順序で並べた n^2 次元ベクトルである。

重複に関しては重複度 μ のとき、 z_{ij} は $u_{l_1 l_2}$ ($in - n + 1 - \mu \leq l_1 \leq in + \mu, jn - n + 1 - \mu \leq$

$l_2 \leq jn + \mu$ を添字に関して辞書式順序で並べたベクトルとする。ただし、 l_1 または l_2 が 0 以下または nk より大きい場合にはその成分は除く(図 3.8 参照)。ところで、1 次元の問題では μ は重複させる成分数であったが、今回の問題では図 3.8 に示したように μ は重複させる幅であり、重複させる成分の数ではないことに注意する必要がある。

この方法で分割し WR 法で計算する。ここで扱う問題は x, y 方向どちらも 25, 50, 75 および 100 分割及して得られる方程式を 25 個のプロセッサで並列に計算する。このとき、 $k = 5$ かつ $n = 5, 10, 15$ および 20 である。また、計算の条件として、積分区間を $[0, 1]$ 、window size を 10^{-1} (window 数は 10)、きざみ幅を $h = 10^{-3}$ (各 window 内が 100 ステップ)、反復停止条件を $\|y^{[\nu]} - y^{[\nu-1]}\| < 10^{-7}$ とし、1 次元の問題同様、微分方程式の解法として前述の RKN 法を用い、並列計算機 SR2201 で計算する。ここで用いたプログラミング言語は Fortran であり、MPI を用いて並列化している。この時のブロックの重複幅と収束までの反復回数、計算時間および前回と同様に分割した最大の次元が d の場合に前進・後退代入 1 回あたりの計算量を $2d^2$ としたときの計算速度を表 3.3-表 3.6 に示す。

この結果から、分割する際に成分の重複を増やせば、収束性が向上することが確認できる。しかし、今回の重複法の場合、重複幅を増やすと、各ブロックの成分数の増加量が大きいため、反復 1 回あたりの計算量の増加もかなり大きい。そのため、元のブロックの成分数が少ない場合には、重複による収束性の向上による高速化の影響よりも、成分数の増加による計算量の増加の影響が大きく、すぐに遅くなってしまうことが確認できる。一方、成分数が多い場合には、ある程度までは重複幅を増やすことにより、重複しない場合より速く計算できるが、重複幅を増やしすぎると成分数が少ないと同様、遅くなることが確認できる。また、計算速度は分割した方程式の次元が小さいときはピーク性能の約 7% であるが、次元が大きくなると約 15% まで上昇していることも確認できる。

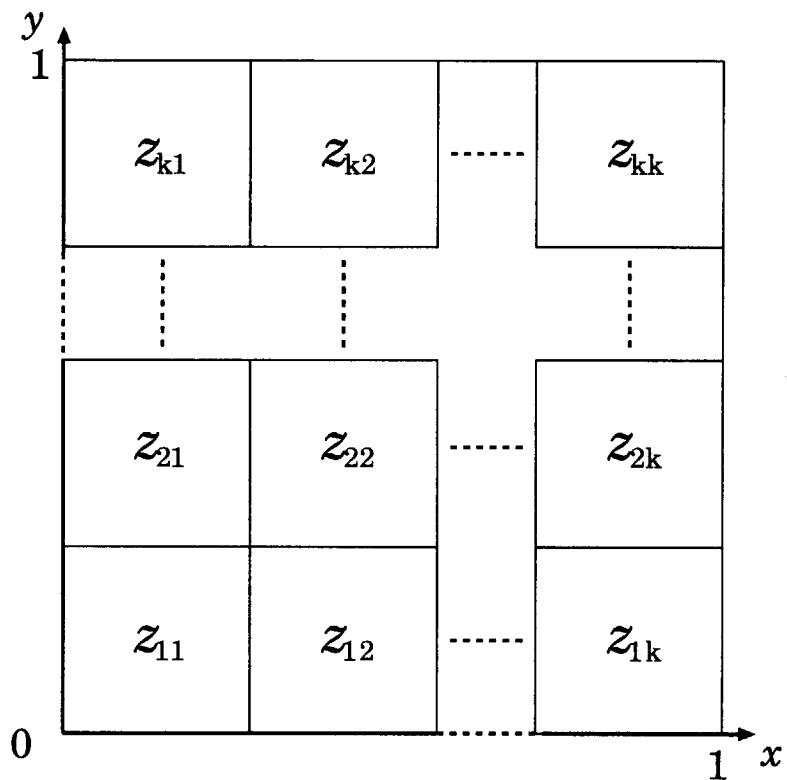


図 3.7: 2 次元問題の分割方法

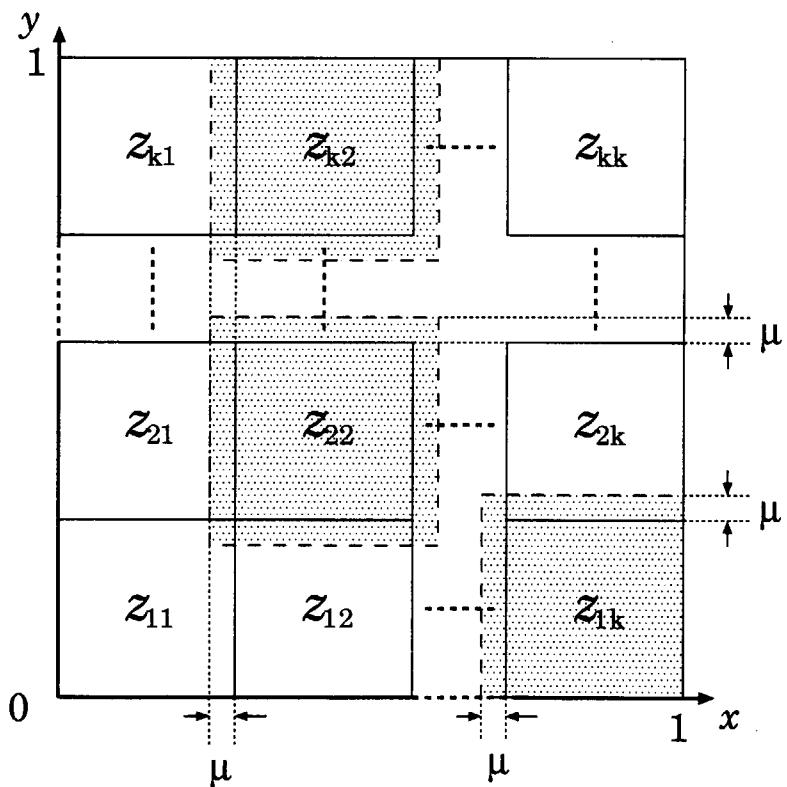


図 3.8: 2 次元問題の重複方法

表 3.3: 計算結果 ($n = 5$)

重複幅	次元		反復回数		計算時間(秒)			計算速度 (Mflops)
	全体	最大	合計	平均	合計	WR 反復	平均	
0	625	25	99	9.9	2.350	2.323	0.023	21.313
1	1089	49	59	5.9	4.171	4.129	0.070	27.445
2	1681	81	49	4.9	7.893	7.756	0.158	33.161
3	2401	121	49	4.9	16.446	16.046	0.327	35.768
4	3249	169	49	4.9	29.427	28.416	0.580	39.400

表 3.4: 計算結果 ($n = 10$)

重複幅	次元		反復回数		計算時間(秒)			計算速度 (Mflops)
	全体	最大	合計	平均	合計	WR 反復	平均	
0	2500	100	146	14.6	33.522	33.229	0.228	35.150
1	3364	144	70	7.0	31.819	31.153	0.445	37.275
2	4356	196	59	5.9	46.961	45.404	0.770	39.935
3	5476	256	50	5.0	66.846	63.500	1.270	41.282
4	6724	324	49	4.9	105.316	98.823	2.017	41.641

表 3.5: 計算結果 ($n = 15$)

重複幅	次元		反復回数		計算時間(秒)			計算速度 (Mflops)
	全体	最大	合計	平均	合計	WR 反復	平均	
0	5625	225	187	18.7	187.540	184.938	0.989	40.952
1	6889	289	85	8.5	139.335	134.508	1.582	42.224
2	8281	361	60	6.0	154.156	145.421	2.424	43.016
3	9801	441	59	5.9	224.579	208.515	3.534	44.023
4	11449	529	50	5.0	282.494	254.319	5.086	44.014

表 3.6: 計算結果 ($n = 20$)

重複幅	次元		反復回数		計算時間(秒)			計算速度 (Mflops)
	全体	最大	合計	平均	合計	WR 反復	平均	
0	10000	400	228	22.8	684.301	671.174	2.944	43.482
1	11664	484	99	9.9	444.996	424.069	4.284	43.750
2	13456	576	70	7.0	461.544	426.040	6.086	43.610
3	15376	676	60	6.0	547.128	490.471	8.175	44.722
4	17424	784	59	5.9	750.055	663.737	11.250	43.710

4 まとめ

本研究では、2階線形微分方程式 $y'' = Qy + g$ の初期値問題を計算する WR 法の収束性について考察し、実際に並列計算機を用いて並列性能を評価した。収束性に関しては、splitting 法について方程式がある条件を満たすように分割すれば、有限の積分区間で超一次収束することを示した。また、波動方程式を空間方向に離散化して得られる方程式を並列計算機 SR2201 で計算した結果から、方程式を分割する際に成分を重複させると収束性が向上すること、一方で重複数が多くなり過ぎると全体の計算時間は遅くなることが確認できた。このことから、重複方法や重複数を決定する際には反復回数の減少量だけを考慮するのではなく、重複による計算量の増加を考慮することが重要であることがわかった。さらに、前進・後退代入の計算量から計算速度を計算した結果、1次元、2次元どちらの問題でも方程式の次元が大きくなるにつれ計算速度 (Flops 値) が大きくなることが確認できた。これは、方程式の次元が小さいときは(通信時間も含めた)全体の計算時間に占める前進・後退代入の計算時間は比較的大きくないが、次元の増加に合わせ前進・後退代入の計算時間は次元の2乗で増加するため、次元が大きくなると前進・後退代入の計算時間が全体の計算時間の大部分を占めるようになるためと思われる。

これまでに非線形方程式に対する WR 法の収束性として waveform Newton 反復を用いると、並列計算できないが 2 次収束することが知られている [1],[12]。さらに、それを並列計算するために(成分の重複なしで)分割した場合には超 1 次収束することが示されている [8]。今後は、非線形方程式を重複して分割した場合についての収束性について考察していきたい。

謝辞

本報告書を取りまとめるにあたり、Waveform Relaxation 法について議論して頂いた秋田県立大学システム科学技術学部小澤一文教授に謝意を表します。

参考文献

- [1] K. Burrage, *Parallel and Sequential Methods for Ordinary Differential Equations*, Oxford University Press, New York, 1995.
- [2] K. Burrage, Z. Jackiewicz, S.P. Nørsett and A. Renaut, Preconditioning Waveform Relaxation Iterations for Differential Systems, *BIT* **36**(1996), 54-76.
- [3] E. Hairer, S. P. Nørsett and G. Wanner, *Solving Ordinary Differential Equations I (Nonstiff Problems, 2nd Ed.)*, Springer-Verlag, Berlin, 1993.
- [4] B. Leimkuhler, Estimating Waveform Relaxation Convergence, *SIAM J. Sci. Comput.* **14**(1993), 872-889.
- [5] E. Lelarasmee, A. Ruehli and A. Sangiovanni-Vincentelli, The waveform relaxation method for time domain analysis of large scale integrated circuits, *IEEE Trans on CAD of IC and Syst.* **1**(1982), 131-145.
- [6] U. Miekkala and O. Nevalinna, Iterative Solution of Systems of Linear Differential Equations, *Acta Numerica* (1996), 259-307.
- [7] Message Passing Interface Forum, MPI: A message-passing interface standard, The international Journal of Supercomputing Applications and High Performance Computing, Vol.8, No.3/4, 1994.
- [8] K. Ozawa and S. Yamada, Waveform relaxation for second order differential equations $y'' = f(x, y)$, *Proc. of 4th International Euro-Par Conference*, Southampton, UK, September 1998, Lecture Notes in Computer Science, Springer, **1470**(1998), 780-787.
- [9] B. Pohl, On the convergence of the discretized multisplitting waveform relaxation algorithm, *Appl. Numer. Math.*, **11** (1993), 251-258.
- [10] A. Sand and K. Burrage, A Jacobi Waveform Relaxation Method for ODEs, *SIAM J. Sci. Comput.*, **20**(1998), 534-552.
- [11] P. J. van der Houwen, B. P. Sommeijer and Nguyen Huu Cong, Stability of collocation-based Runge-Kutta-Nyström methods, *BIT* **31**(1991), 469-481.
- [12] J. K. White and A. Sangiovanni-Vincentelli, *Relaxation Techniques for the Simulation of VLSI Circuits*, Kluwer Academic Publishers, Boston, Dordrecht, Lancaster, 1987.
- [13] J. K. White, A. Sangiovanni-Vincentelli, F. Odeh and A. Ruehli, Waveform relaxation: Theory and practice, *Trans. Soc. Computer Simulation*, **2** (1985), 95-133.
- [14] S. Yamada, K. Ozawa, I. Yoshihara and K. Abe, Waveform Relaxation Methods for Second Order Linear Differential Equation on Parallel Computers, *Iterative Methods in Scientific Computation IV*, Kincaid D., et al.(ed.), IMACS, 1999, 139-151.
- [15] 山田進, 小澤一文, Waveform Relaxation 法の収束性の考察および並列計算機への実装, 日本応用数理学会 1999 年度年会 講演予稿集, 1999, 64-65.

付録 A 行列の平方根と行列三角関数

ここでは、行列の平方根と行列三角関数について説明する。本研究で扱う係数行列 M は正定値対称行列なので、あるユニタリ行列 P で

$$M = P \operatorname{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n) P^{-1}.$$

と対角化できる。また、 M は正定値行列なのですべての固有値は正 ($\lambda_i > 0, i = 1, 2, \dots, n$) である。このとき、行列の平方根を

$$\sqrt{M} = P \operatorname{diag}(\sqrt{\lambda_1}, \sqrt{\lambda_2}, \dots, \sqrt{\lambda_n}) P^{-1}$$

で定義する。

次に行列 A の三角関数は

$$\cos At = \sum_{i=0}^{\infty} (-1)^i \frac{(At)^{2i}}{(2i)!}, \quad \sin At = \sum_{i=0}^{\infty} (-1)^i \frac{(At)^{2i+1}}{(2i+1)!},$$

と定義する。ただし、 $A^0 = I$ (単位行列) とする。

このとき

$$(\sqrt{M} t)^k = P \operatorname{diag}((\sqrt{\lambda_1} t)^k, (\sqrt{\lambda_2} t)^k, \dots, (\sqrt{\lambda_n} t)^k) P^{-1}$$

であることを考慮すると、以上の定義から $\cos \sqrt{M} t$ および $\sin \sqrt{M} t$ はそれぞれ

$$\begin{aligned} \cos \sqrt{M} t &= P \operatorname{diag}(\cos \sqrt{\lambda_1} t, \cos \sqrt{\lambda_2} t, \dots, \cos \sqrt{\lambda_n} t) P^{-1}, \\ \sin \sqrt{M} t &= P \operatorname{diag}(\sin \sqrt{\lambda_1} t, \sin \sqrt{\lambda_2} t, \dots, \sin \sqrt{\lambda_n} t) P^{-1} \end{aligned}$$

で与えられる。

国際単位系(SI)と換算表

表1 SI基本単位および補助単位

量	名称	記号
長さ	メートル	m
質量	キログラム	kg
時間	秒	s
電流	アンペア	A
熱力学温度	ケルビン	K
物質量	モル	mol
光强度	カンデラ	cd
平面角	ラジアン	rad
立体角	ステラジアン	sr

表3 固有の名称をもつSI組立単位

量	名称	記号	他のSI単位による表現
周波数	ヘルツ	Hz	s ⁻¹
力	ニュートン	N	m·kg/s ²
圧力、応力	パスカル	Pa	N/m ²
エネルギー、仕事、熱量	ジュール	J	N·m
功率、放射束	ワット	W	J/s
電気量、電荷	クーロン	C	A·s
電位、電圧、起電力	ボルト	V	W/A
静電容量	ファラード	F	C/V
電気抵抗	オーム	Ω	V/A
コンダクタンス	ジーメンス	S	A/V
磁束	ウェーバ	Wb	V·s
磁束密度	テスラ	T	Wb/m ²
インダクタンス	ヘンリー	H	Wb/A
セルシウス温度	セルシウス度	°C	
光束度	ルーメン	lm	cd·sr
照度	ルクス	lx	lm/m ²
放射能	ベクレル	Bq	s ⁻¹
吸収線量	グレイ	Gy	J/kg
線量当量	シーベルト	Sv	J/kg

表2 SIと併用される単位

名称	記号
分、時、日	min, h, d
度、分、秒	°, ′, ″
リットル	l, L
トントン	t
電子ボルト	eV
原子質量単位	u

$$1 \text{ eV} = 1.60218 \times 10^{-19} \text{ J}$$

$$1 \text{ u} = 1.66054 \times 10^{-27} \text{ kg}$$

表4 SIと共に暫定的に維持される単位

名称	記号
オングストローム	Å
バーン	b
バル	bar
ガル	Gal
キュリ	Ci
レンントゲン	R
ラド	rad
レム	rem

$$1 \text{ Å} = 0.1 \text{ nm} = 10^{-10} \text{ m}$$

$$1 \text{ b} = 100 \text{ fm}^2 = 10^{-28} \text{ m}^2$$

$$1 \text{ bar} = 0.1 \text{ MPa} = 10^5 \text{ Pa}$$

$$1 \text{ Gal} = 1 \text{ cm/s}^2 = 10^{-2} \text{ m/s}^2$$

$$1 \text{ Ci} = 3.7 \times 10^{10} \text{ Bq}$$

$$1 \text{ R} = 2.58 \times 10^{-4} \text{ C/kg}$$

$$1 \text{ rad} = 1 \text{ cGy} = 10^{-2} \text{ Gy}$$

$$1 \text{ rem} = 1 \text{ cSv} = 10^{-2} \text{ Sv}$$

表5 SI接頭語

倍数	接頭語	記号
10 ¹⁸	エクサ	E
10 ¹⁵	ペタ	P
10 ¹²	テラ	T
10 ⁹	ギガ	G
10 ⁶	メガ	M
10 ³	キロ	k
10 ²	ヘクト	h
10 ¹	デカ	da
10 ⁻¹	デシ	d
10 ⁻²	センチ	c
10 ⁻³	ミリ	m
10 ⁻⁶	マイクロ	μ
10 ⁻⁹	ナノ	n
10 ⁻¹²	ピコ	p
10 ⁻¹⁵	フェムト	f
10 ⁻¹⁸	アト	a

(注)

- 表1～5は「国際単位系」第5版、国際度量衡局1985年刊行による。ただし、1eVおよび1uの値はCODATAの1986年推奨値によった。
- 表4には海里、ノット、アール、ヘクタールも含まれているが日常の単位なのでここでは省略した。
- barは、JISでは流体の圧力を表す場合に限り表2のカテゴリーに分類されている。
- EC関係理事会指令ではbar、barnおよび「血圧の単位」mmHgを表2のカテゴリーに入れている。

換算表

力	N(=10 ⁵ dyn)	kgf	lbf
	1	0.101972	0.224809
9.80665		1	2.20462
4.44822		0.453592	1

$$\text{粘度 } 1 \text{ Pa}\cdot\text{s} (\text{N}\cdot\text{s}/\text{m}^2) = 10 \text{ P} (\text{ポアズ}) (\text{g}/(\text{cm}\cdot\text{s}))$$

$$\text{動粘度 } 1 \text{ m}^2/\text{s} = 10^4 \text{ St} (\text{ストークス}) (\text{cm}^2/\text{s})$$

圧	MPa(=10 bar)	kgf/cm ²	atm	mmHg(Torr)	lbf/in ² (psi)
力	1	10.1972	9.86923	7.50062 × 10 ³	145.038
	0.0980665	1	0.967841	735.559	14.2233
	0.101325	1.03323	1	760	14.6959
	1.33322 × 10 ⁻⁴	1.35951 × 10 ⁻³	1.31579 × 10 ⁻³	1	1.93368 × 10 ⁻²
	6.89476 × 10 ⁻³	7.03070 × 10 ⁻²	6.80460 × 10 ⁻²	51.7149	1

エネルギー・仕事・熱量	J(=10 ⁷ erg)	kgf·m	kW·h	cal(計量法)	Btu	ft · lbf	eV	1 cal = 4.18605 J (計量法)
	1	0.101972	2.77778 × 10 ⁻⁷	0.238889	9.47813 × 10 ⁻⁴	0.737562	6.24150 × 10 ¹⁸	= 4.184 J (熱化学)
9.80665		1	2.72407 × 10 ⁻⁶	2.34270	9.29487 × 10 ⁻³	7.23301	6.12082 × 10 ¹⁹	= 4.1855 J (15 °C)
3.6 × 10 ⁶	3.67098 × 10 ⁵	1	8.59999 × 10 ⁴	3412.13	2.65522 × 10 ⁶	2.24694 × 10 ²⁵		= 4.1868 J (国際蒸気表)
4.18605	0.426858	1.16279 × 10 ⁻⁶	1	3.96759 × 10 ⁻³	3.08747	2.61272 × 10 ¹⁹	仕事率 1 PS (仏馬力)	
1055.06	107.586	2.93072 × 10 ⁻⁴	252.042	1	778.172	6.58515 × 10 ²¹	= 75 kgf·m/s	
1.35582	0.138255	3.76616 × 10 ⁻⁷	0.323890	1.28506 × 10 ⁻³	1	8.46233 × 10 ¹⁸	= 735.499 W	
1.60218 × 10 ⁻¹⁹	1.63377 × 10 ⁻²⁰	4.45050 × 10 ⁻²⁶	3.82743 × 10 ⁻²⁰	1.51857 × 10 ⁻²²	1.18171 × 10 ⁻¹⁹	1		

放射能	Bq	Ci	吸収線量	Gy	rad
1	2.70270 × 10 ⁻¹¹	1	1	100	
3.7 × 10 ¹⁰		1	0.01	1	

照 射 線 量	C/kg	R
1	3876	
2.58 × 10 ⁻⁴	1	

線 量 當 量	Sv	rem
1	100	
0.01	1	

(86年12月26日現在)

2) 波形緩和法 Waveform Relaxation 法

R100
古紙配合率100%
白色度70%再生紙を使用しています