

重み付き定常反復型前処理のためのパラメータ最適化手法 および超新星爆発計算における有効性

今倉 暁*, 櫻井 鉄也*, 住吉 光介†, 松古 英夫‡

*筑波大学, †沼津高専, ‡高エネルギー加速器研究機構

A parameter optimization technique
for a weighted stationary iterative-type preconditioner
and its efficiency on the supernova simulation

Akira Imakura*, Tetsuya Sakurai*, Kohsuke Sumiyoshi†
and Hideo Matsufuru‡

*University of Tsukuba, †Numazu College of Technology, ‡KEK

E-mail: imakura@ccs.tsukuba.ac.jp

1 はじめに

本論文では, 大規模疎行列を係数に持つ線形方程式

$$Ax = b, \quad A \in \mathbb{R}^{n \times n}, \quad x, b \in \mathbb{R}^n \quad (1)$$

に対する Krylov 部分空間法のための前処理に着目する. ここで, 係数行列 A は正則かつ実非対称行列であるとする.

線形方程式 (1) に対する解法は, 有限回の四則演算で解を直接計算する直接法と解に収束する近似解列を逐次的に生成する反復法に分けられる. 一般に, 係数行列 A が小規模・密行列である場合には, 精度や安定性を考慮し直接法が, また, 大規模・疎行列である場合には, 計算コストや記憶容量を考慮し反復法が用いられる. 特に近年では, 大規模線形方程式 (1) に対する優れた反復解法として, Krylov 部分空間法にその収束性を改善する前処理を伴った, 前処理付き Krylov 部分空間法が標準的に用いられている.

Krylov 部分空間法に対する前処理は, ILU(0) 前処理や近似逆行列前処理に代表される直接型前処理と定常反復法等に基づく可変的前処理や幾何的/代数的マルチグリッド前処理に代表される反復型前処理に大きく分けることができる. Krylov 部分空間法およびその前処理の詳細については [4] を参照されたい.

近年我々は, 反復型前処理の一つである Jacobi 反復前処理に着目し, その拡張法である重み付き Jacobi 型前処理を導入し, その性能を左右する重みパラメータの最適化手法を提案した [2, 3]. 本論文では, その一般化である重み付き定常反復型前処理に対する重みパラメータの最適化手法を提案し, 偏微分方程式を離散化して得られるモデル問題および超新星爆発計算 [5, 6] から生じる線形方程式に適用しその有効性を検証する.

本論文の構成は以下の通りである. 第 2 節において, Krylov 部分空間法の前処理の概略を記し, 重み付き定常反復型前処理を導入する. また第 3 節において, 重み付き定常反復型前処理のパラメータ最適化手法を提案する. 第 4 節において, 数値実験から提案法の有効性を検証し, 最後に第 5 節でまとめを行う.

2 重み付き定常反復型前処理の導入

Krylov 部分空間法に対する前処理は、与えられた線形方程式 (1) を

$$K_1^{-1}AK_2^{-1}\mathbf{y} = K_1^{-1}\mathbf{b}, \quad \mathbf{x} = K_2^{-1}\mathbf{y}$$

のように同値変形することで、Krylov 部分空間法の収束性改善を図る。ここで、 $K = K_1K_2$ または K^{-1} を前処理行列と呼び、一般に $K_1^{-1}AK_2^{-1} \approx I$ となるように設定される。

2.1 直接型前処理と反復型前処理

前処理付き Krylov 部分空間法では、通常、前処理後の係数行列 $K_1^{-1}AK_2^{-1}$ を陽的には生成しない。代わりに、Krylov 部分空間法の各反復において、係数行列 A の行列ベクトル積と共に、前処理行列 K に対する方程式

$$K\mathbf{v} = \mathbf{w} \tag{2}$$

を解く。

$K \approx A$ となるよう前処理行列 K または K^{-1} を陽的に生成し、前処理付き Krylov 部分空間法の各反復において方程式 (2) を解くことで $\mathbf{v} = K^{-1}\mathbf{w} \approx A^{-1}\mathbf{w}$ を得る前処理技法を直接型前処理と呼ぶ。ILU(0) 前処理や近似逆行列前処理に代表される直接型前処理は、多くの分野においてその有効性が示されており、古くから幅広く用いられている。しかしながら、前処理行列の生成に多くの計算コストおよび記憶容量を必要とするため、実際の大規模数値シミュレーションで使用する際に困難を生じる場合がある。

これに対し、前処理付き Krylov 部分空間法の各反復において、

$$A\mathbf{v} = \mathbf{w} \tag{3}$$

を反復法を用いて近似的に解くことで $\mathbf{v} \approx A^{-1}\mathbf{w}$ を得る前処理技法を反復型前処理と呼ぶ。また、反復型前処理において方程式 (3) に適用される反復法を内部反復法と呼ぶ。反復型前処理は、前処理行列を生成しないため、前処理にかかる事前準備コストや記憶容量が不要であるなどの特徴から、多くの大規模数値シミュレーションで注目されている。

2.2 重み付き定常反復型前処理

反復型前処理における方程式 (3) の (近似的な) 求解に対しては様々な反復法の適用が考えられるが、特に Jacobi 法や Gauss-Seidel 法, SOR 法に代表される定常反復法が広く用いられており、その有効性が報告されている [1].

初期近似解を \mathbf{x}_0 とすると定常反復法の漸化式は、正則な行列 M および行列 $N := M - A$ を用い

$$\mathbf{x}_{k+1} = M^{-1}N\mathbf{x}_k + M^{-1}\mathbf{b}, \quad k = 0, 1, 2, \dots \tag{4}$$

のように表現され, その収束性は反復行列 $G := M^{-1}N$ のスペクトル半径 $\rho(G)$ を用い,

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \left(\max_{\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^n} \frac{\|\mathbf{e}_k\|_2}{\|\mathbf{e}_0\|_2} \right)^{1/k} = \rho(G),$$

のように見積もることができる. また, 定常反復法が任意の右辺項 \mathbf{b} および初期近似解 \mathbf{x}_0 に対して収束するための必要十分条件は

$$\rho(G) < 1 \quad (5)$$

である. 前処理付き Krylov 部分空間法の各反復で現れる方程式 (3) に対し, 数反復の定常反復法 (4) を適用する前処理を, 定常反復型前処理と呼ぶ.

本稿では, 定常反復型前処理の拡張法として, 実数パラメータ $\omega \in \mathbb{R}$ を用いた重み付き定常反復型解法

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_{k+1} &= \omega(M^{-1}N\mathbf{x}_k + M^{-1}\mathbf{b}) + (1 - \omega)\mathbf{x}_k \\ &= \mathbf{x}_k + \omega M^{-1}(\mathbf{b} - A\mathbf{x}_k) \end{aligned} \quad (6)$$

に基づく反復型前処理: 重み付き定常反復型前処理, を導入する.

重み付き定常反復型前処理は, $\omega = 1$ の時, 定常反復型前処理と数学的に同値であり, パラメータ ω を適切に設定することで, 優れた前処理となることが期待される.

3 重み付き定常反復型前処理のためのパラメータ最適化手法

反復型前処理の有効性は, 方程式 (3) の求解精度に依存する. このため, 内部反復解法として用いられる定常反復法には, 収束条件 (5) を満たし, 高い収束性を持つことが求められる. 本節では, 重み付き定常反復型解法の収束性解析を通し, その収束性を最大化する重み付き定常反復型前処理のためのパラメータ最適化手法を提案する.

3.1 重み付き定常反復型解法の収束性解析

重み付き定常反復型解法 (6) は, 行列 A を

$$A = M_\omega - N_\omega, \quad M_\omega = \frac{1}{\omega}M, \quad N_\omega = \frac{1}{\omega}M - A$$

と分離することで得られる定常反復法と解釈できる. このため, 通常の定常反復法と同様に, その収束性は反復行列

$$G_\omega := M_\omega^{-1}N_\omega = I - \omega M^{-1}A$$

のスペクトル半径 $\rho(G_\omega)$ により評価できる.

文献 [2, 3] で提案された重み付き Jacobi 法の最適パラメータ ω に関する定理の自然な拡張として, 重み付き定常反復型解法の反復行列 G_ω のスペクトル半径 $\rho(G_\omega)$ を最小化するパラメータ ω およびその収束条件に関し, 以下の定理が成り立つ.

定理 1 $A, M \in \mathbb{R}^{n \times n}$ を正則な行列であるとする。また, $C(\gamma, \rho)$ を複素平面上の中心 $\gamma \in \mathbb{R}$ 半径 $\rho \in \mathbb{R}$ の円内部の領域であるとし, (γ^*, ρ^*) を

$$(\gamma^*, \rho^*) := \arg \min_{\gamma, \rho \in \mathbb{R}} \left| \frac{\rho}{\gamma} \right| \quad \text{s.t.} \quad \lambda_i(M^{-1}A) \in C(\gamma, \rho), \quad i = 1, \dots, n,$$

と定義する。ただし, $\lambda_i(M^{-1}A)$ は行列 $M^{-1}A$ の固有値であるとする。

この時, $G_\omega := I - \omega M^{-1}A$ のスペクトル半径 $\rho(G_\omega)$ に関し, 次式が満たされる。

$$\arg \min_{\omega \in \mathbb{R}} \rho(G_\omega) = \frac{1}{\gamma^*}, \quad \min_{\omega \in \mathbb{R}} \rho(G_\omega) = \left| \frac{\rho^*}{\gamma^*} \right|.$$

定理 2 $\omega^* := 1/\gamma^*$ を対応するスペクトル半径を最小化する最適重みパラメータとする。この時, 最適重みパラメータ ω^* を用いた重み付き定常反復型解法が収束条件

$$\rho(G_{\omega^*}) = \left| \frac{\rho^*}{\gamma^*} \right| < 1$$

を満たすための必要十分条件は, $\lambda_i(M^{-1}A)$ が

$$\operatorname{Re}(\lambda_i(M^{-1}A)) > 0, \quad i = 1, 2, \dots, n$$

または

$$\operatorname{Re}(\lambda_i(M^{-1}A)) < 0, \quad i = 1, 2, \dots, n$$

を満たす事である。

3.2 パラメータ最適化手法

本節では, 定理1および2に基づき, 重み付き定常反復型解法の収束性を最大化する(反復行列 G_ω のスペクトル半径 $\rho(G_\omega)$ を最小化する), 重み付き定常反復型前処理のためのパラメータ ω の最適化手法を提案する。

最適な重みパラメータ ω^* および対応するスペクトル半径 $\rho(G_{\omega^*})$ は, 行列 $M^{-1}A$ の外部固有値の近似値を用いることで定理1および定理2に基づき効率的に近似できることが期待される。 $\tilde{\lambda}(M^{-1}A), i = 1, 2, \dots, l$ を l 個の近似外部固有値とする。この時, $\tilde{\gamma}, \tilde{\rho}$ を

$$(\tilde{\gamma}, \tilde{\rho}) := \arg \min_{\gamma, \rho \in \mathbb{R}} \left| \frac{\rho}{\gamma} \right| \quad \text{s.t.} \quad \tilde{\lambda}_i(M^{-1}A) \in C(\gamma, \rho), \quad i = 1, \dots, n,$$

と置くと, 最適パラメータおよび対応するスペクトル半径の近似値 $\tilde{\omega}, \tilde{\rho}(G_{\tilde{\omega}})$ は, 以下のよう計算することができる。

$$\tilde{\omega} := \frac{1}{\tilde{\gamma}}, \quad \tilde{\rho}(G_{\tilde{\omega}}) = \left| \frac{\tilde{\rho}}{\tilde{\gamma}} \right|.$$

本論文では近似固有値の計算法として Arnoldi 法を採用する。また, Arnoldi 法の反復ごとに $\tilde{\omega}, \tilde{\rho}(G_{\tilde{\omega}})$ を計算し, 計算された重みパラメータの相対誤差

$$e_l := \left| \frac{\omega_l - \omega_{l-1}}{\omega_l} \right|$$

が十分小さくなった場合に Arnoldi 法の反復を停止することで演算量の削減を図る。以上により, 提案するパラメータ最適化のアルゴリズムは Algorithm 1 のように示される。

Algorithm 1 A parameter optimization technique for the weighted stationary iterative-type preconditioner

/* INPUT */

Set a matrix M , and an initial vector v_1 , a stopping criterion ϵ and minimum/maximum numbers of iterations l_{\min}, l_{\max} for the Arnoldi method.

/* OPTIMIZATION */

for $l = 1, 2, \dots, l_{\max}$ do:

Operate the l th iteration of the Arnoldi method, and get the l approximate eigenvalues $\tilde{\lambda}_i(M^{-1}A), i = 1, 2, \dots, l$.

Compute (approximately) the pair of $\tilde{\gamma}_l, \tilde{\rho}_l$ from the computed extreme eigenvalues.

Compute $\omega_l = 1/\tilde{\gamma}_l, \tilde{\rho}(G_{\tilde{\omega}}) = |\tilde{\rho}_l/\tilde{\gamma}_l|$ and $e_l = |(\omega_l - \omega_{l-1})/\omega_l|$.

if $l \geq l_{\min}$ and $e_l \leq \epsilon$ then exit.

end for

/* OUTPUT */

$\tilde{\omega} = 1/\tilde{\gamma}_l$ and $\tilde{\rho}(G_{\tilde{\omega}}) = |\tilde{\rho}_l/\tilde{\gamma}_l|$.

4 数値実験・結果

本節では、偏微分方程式を離散化して得られるモデル問題および超新星爆発計算 [5, 6] から生じる線形方程式に対し、第 3 節で提案した重み付き定常反復型前処理のためのパラメータ最適化手法 (Algorithm 1) を適用し、その有効性を検証する。

4.1 数値実験 I

モデル問題として、Dirichlet 境界条件を課した単位正方領域 $[x, y] \in [0, 1] \times [0, 1]$ 上の偏微分方程式

$$-(Au_x)_x - (Au_y)_y + \alpha \exp(2(x^2 + y^2))u_x = F(x, y) \quad (7)$$

を、 x, y 方向にそれぞれ 51 等分し、5 点中心差分法で離散化して得られる 2500 次元の実非対称線形方程式 (非零要素数: 12398, 平均非零要素数: 5) を考える。ここで、関数 $A(x, y), F(x, y)$ は Fig. 1 に示のように与えられるものとし、 $\alpha = 5.0, 10.0$ と設定した。

上記の線形方程式に対し、代表的な定常反復法である Jacobi 法, Gauss-Seidel 法および提案手法により重みパラメータを最適化した重み付き Jacobi 法, 重み付き Gauss-Seidel 法を適用し、収束性を比較する。また、それらの反復法を BiCGSTAB 法 [7] の前処理として用い、前処理としての有効性について検証する。

各反復法の初期近似解を $\mathbf{x}_0 = [0, 0, \dots, 0]^T$ とする。前処理として用いる際の内部反復における各定常反復法の反復回数を 10 とする。また、前処理付き BiCGSTAB 法の収束判定条件は $\|\mathbf{r}_k\|_2 / \|\mathbf{b}\|_2 \leq 10^{-12}$, 最大反復回数は 1000 とし、右前処理を用いた。パラメータ最適化手法における Arnoldi 反復の初期ベクトルは $\mathbf{v}_1 = [1, 1, \dots, 1]^T$, 最小/最大反復回数は $l_{\min} = 10, l_{\max} = 20$, 反復の停止条件は $e_l \leq 10^{-2}$ とする。

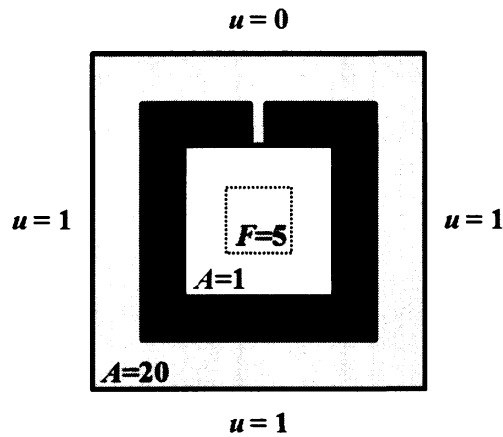


Fig. 1: The functions $A(x, y)$ and $F(x, y)$ and the boundary condition of the PDE (7).

数値実験は, OS: CentOS 5.4 (64bit); CPU: Intel Xeon X5550 (2.67GHz); メモリ: 48GB の計算機において FORTRAN 77 で実装し, 全て倍精度演算で行った. また, コンパイラは GNU Fortran 4.1.2 を用い, コンパイラの最適化オプションは “-O3” を使用した.

[実験結果]

重みパラメータの最適化結果を Table 1 に, また, 各定常反復法の収束履歴を Fig. 2 にそれぞれ示す. ここで, Table 1 における TRE は真の最適パラメータ ω^* に対する相対誤差 $e_l^* := |(\omega_l - \omega^*)/\omega^*|$ のログスケールを意味する.

Table 1 $\rho(G_{\omega=1})$ に示されるように, $\alpha = 5.0, 10.0$ のどちらのモデル問題に対しても, Jacobi 法, Gauss-Seidel 法の反復行列のスペクトル半径は 1 より大きく, 収束条件 (5) を満たさない. その結果として Jacobi 法, Gauss-Seidel 法の残差ノルムは (反復初期には減少傾向を示すものの) 発散する結果が得られた; Fig. 2 参照.

提案手法は 15 反復程度で停止条件 $e_l \leq 10^{-2}$ を満たしており, この時, $\alpha = 5.0$ の Jacobi 法を除き, 真の相対誤差 (TRE) においても $e_l^* \approx 10^{-2}$ 程度の近似値 $\tilde{\omega}$ を得ることができている. また, 最適化された重みパラメータを用いることにより, 重み付き Jacobi 法, 重み付き Gauss-Seidel 法は収束条件 (5) を満たし; Table 1 $\tilde{\rho}(G_{\tilde{\omega}})$ 参照, Fig. 2 に示されるように残差ノルムは単調に減少する結果が得られた.

次に, 定常反復型前処理付き BiCGSTAB 法の収束履歴を Fig. 3 に示す. 収束条件 (5) を満たさなかった Jacobi 法, Gauss-Seidel 法を BiCGSTAB 法の前処理として用いた場合, その収束性は前処理無しの BiCGSTAB 法より悪化し, どちらの問題に対しても解を得ることができなかった. 特に, Jacobi 反復前処理付き BiCGSTAB 法はどちらも問題に対してもブレイクダウンを起こした.

一方で, 提案手法により重みパラメータを最適化した重み付き Jacobi 法, 重み付き Gauss-Seidel 法を前処理として用いた場合, それら収束性は前処理無しの BiCGSTAB 法に比べて大きく改善し, 高速に解を得ることができた.

Table 1: The numerical results for the optimization technique. ($\rho(G_{\omega=1})$): the spectral radius of the Jacobi and Gauss-Seidel method, TRE: the log-scale of True Relative Error.)

α	Method	$\rho(G_{\omega=1})$	Optimization			Exact values		TRE
			Iter.	$\tilde{\omega}$	$\tilde{\rho}(G_{\tilde{\omega}})$	ω^*	$\rho(G_{\omega^*})$	
5.0	Jacobi	1.8334	16	0.4193	0.9985	0.3500	0.9979	-0.70
	Gauss-Seidel	3.3613	11	0.4447	0.9983	0.4423	0.9956	-2.27
10.0	Jacobi	3.7962	12	0.1274	0.9979	0.1000	0.9994	-2.93
	Gauss-Seidel	14.4113	13	0.0988	0.9997	0.1279	0.9984	-2.43

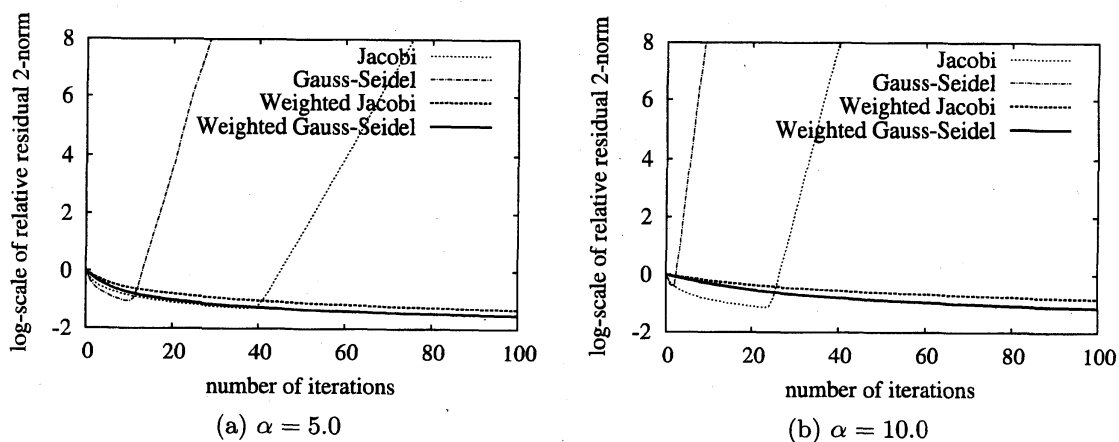


Fig. 2: Relative residual 2-norm histories of the Jacobi, the Gauss-Seidel, the weighted Jacobi and the weighted Gauss-Seidel.

4.2 数値実験 II

超新星爆発における3次元ニュートリノ輻射輸送シミュレーション [5,6] では、空間3次元 r, θ, ϕ およびニュートリノのエネルギー ϵ , 伝搬方向 θ_ν, ϕ_ν の計6次元空間を考える。ニュートリノ分布 $f_\nu(r, \theta, \phi; \epsilon, \theta_\nu, \phi_\nu; t)$ は Boltzmann 方程式

$$\frac{1}{c} \frac{\partial f_\nu}{\partial t} + \frac{\partial f_\nu}{\partial s} = \left[\frac{1}{c} \frac{\partial f_\nu}{\partial t} \right]_{\text{collision}}$$

により記述され、3次元球座標系を用いて表現し、さらに保存形に直した

$$\begin{aligned} \frac{1}{c} \frac{\partial f_\nu}{\partial t} + \frac{\mu_\nu}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 f_\nu) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \mu_\nu} [(1 - \mu_\nu^2) f_\nu] + \frac{\sqrt{1 - \mu_\nu^2} \cos \phi_\nu}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta f_\nu) \\ - \frac{\sqrt{1 - \mu_\nu^2} \cos \theta}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi_\nu} (\sin \phi_\nu f_\nu) + \frac{\sqrt{1 - \mu_\nu^2} \sin \phi_\nu}{r \sin \theta} \frac{\partial f_\nu}{\partial \phi} = \left[\frac{1}{c} \frac{\delta f_\nu}{\delta t} \right]_{\text{collision}} \end{aligned}$$

を差分法により解くことで計算される。ここで、 $\mu_\nu = \cos \theta_\nu$ である。

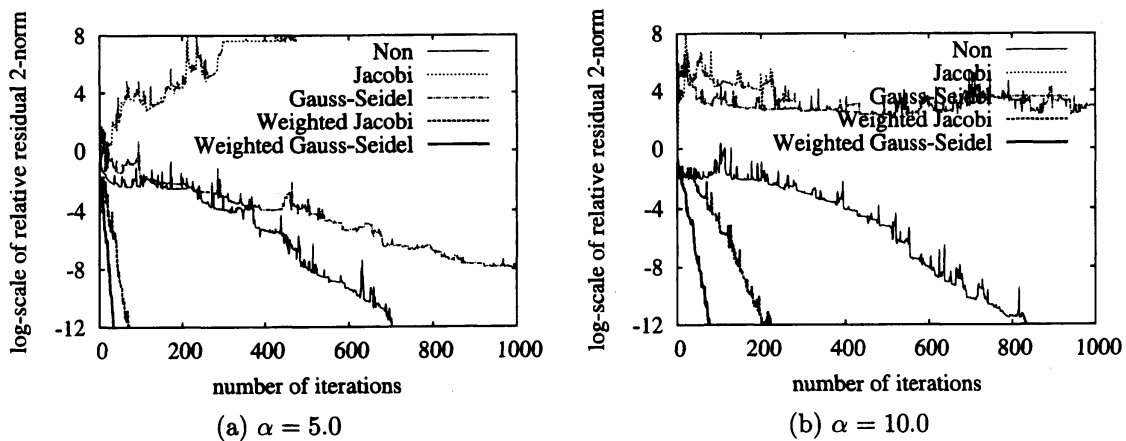


Fig. 3: Relative residual 2-norm histories of the non-preconditioned BiCGSTAB method and the preconditioned BiCGSTAB method with the Jacobi, the Gauss-Seidel, the weighted Jacobi and the weighted Gauss-Seidel preconditioner.

文献 [5, 6] では、時間差分は陰解法を採用しており、各次元に対する離散格子点数を $N_r, N_\theta, N_\phi, N_\epsilon, N_{\theta_\nu}, N_{\phi_\nu}$ とすると、各時間ステップにおいて、 $n = N_r \times N_\theta \times N_\phi \times N_\epsilon \times N_{\theta_\nu} \times N_{\phi_\nu}$ 次の線形方程式を求解する必要がある。

超新星爆発計算では、星中心の鉄コアの重力崩壊を初期条件として、コアバウンスを経て、衝撃波が停滞・復活するまでの長時間発展(約1秒)を追うことが必要であり、陰解法の時間ステップは典型的には $\Delta t \approx 10^{-5}$ 秒程度が要求される。しかしながら、 Δt を大きくすると得られる線形方程式が悪条件となり求解が困難になることが知られている。

本論文では、 $(N_r, N_\theta, N_\phi, N_\epsilon, N_{\theta_\nu}, N_{\phi_\nu}) = (200, 9, 9, 14, 6, 12)$ とし、時間ステップを $\Delta t = 2.30 \times 10^{-7}$ 秒から $\Delta t = 1.95 \times 10^{-5}$ 秒まで増加させながら時間発展を行った。この時得られる約1600万次元の線形方程式(非零要素数: 約12.8億, 平均非零要素数: 約80)に対して、対角スケール前処理, Jacobi 反復前処理および提案手法によりパラメータを最適化した重み付き定常反復型前処理付き BiCGSTAB 法を適用し、収束性を比較する。

提案手法では、行列 M として、3種類の対角行列 $D := \text{diag}\{d_1, d_2, \dots, d_n\}$:

$$D_1 : d_i = a_{ii}, \quad D_2 : d_i = \sum_{j=1}^n |a_{ij}|, \quad D_3 : d_i = \sqrt{\sum_{j=1}^n a_{ij}^2}$$

を用いた重み付き定常反復型解法 (6) に対して、パラメータ最適化手法 (Algorithm 1) を適用する。この時、行列 M 毎に計算された $\tilde{\rho}(G_\omega)$ が最小となるパラメータ ω および行列 M のペアを採用することで、パラメータ最適化に併せて行列 M の選択を行った。

内部反復における Jacobi 反復前処理および重み付き定常反復型前処理の反復回数は10とする。提案法における Arnoldi 法の最小/最大反復回数は $l_{\min} = 10, l_{\max} = 20$, 初期ベクトルは $\mathbf{v}_1 = [1, 1, \dots, 1]^T$, 反復の停止条件は $e_i \leq 10^{-2}$ とする。また、前処理付き BiCGSTAB 法の収束判定条件は $\|\mathbf{r}_k\|_2 / \|\mathbf{b}\|_2 \leq 10^{-8}$ とし、最大反復回数は200とする。

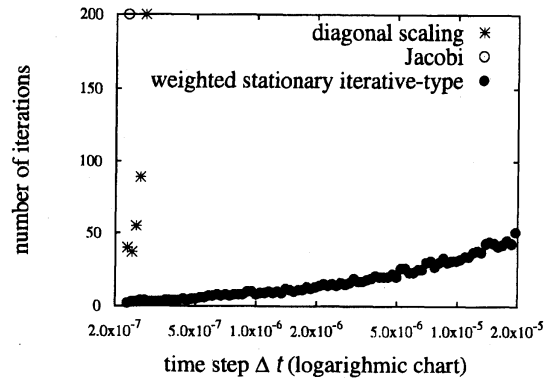


Fig. 4: Number of iterations of the preconditioned BiCGSTAB method with the diagonal scaling, Jacobi and the weighted stationary iterative-type preconditioner for each time step Δt .

数値実験は、高エネルギー加速器研究機構 (KEK) の SR16000/M1 の 1 ノード (プロセッサ: Power7 3.83GHz, ノード当たりコア数: 32, ノード当たりの理論演算性能: 980.48GFlops, ノード当たりの主記憶容量: 256GB) を利用した。

[実験結果]

各時間ステップに対する前処理付き BiCGSTAB 法の反復回数を Fig. 4 に示す。ただし, Fig. 4 中で反復回数が 200 と表示されているものは最大反復回数に達した段階で, 要求精度 $\|r_k\|_2/\|b\|_2 \leq 10^{-8}$ を満たす近似解が得られなかったことを意味する。

Fig. 4 に示されるように, Jacobi 反復前処理付き BiCGSTAB 法は $\Delta t = 2.3 \times 10^{-5}$ 秒, また, 対角スケーリング前処理付き BiCGSTAB 法は $\Delta t = 2.8 \times 10^{-7}$ 秒において最大反復回数に達し, これ以上 Δt を大きくすることはできなかった。一方で提案手法により重みパラメータを最適化した重み付き定常反復型前処理付き BiCGSTAB 法は, 従来の前処理に比べて極めて少ない反復回数で収束し, 実用上想定される $\Delta t \approx 10^{-5}$ 秒においても, 50 反復程度で要求精度 $\|r_k\|_2/\|b\|_2 \leq 10^{-8}$ を満たす近似解を得ることができた。

前処理付き BiCGSTAB 法の 1 反復当たりの計算時間は, 対角スケーリング前処理付き BiCGSTAB 法: 0.24[sec.]; 重み付き定常反復型前処理付き BiCGSTAB 法: 1.75[sec.] である。また, 提案手法における対角行列の選択および重みパラメータの最適化にかかる合計計算時間は Arnoldi 法の反復回数によりばらつきがあるものの, 4.0 ~ 7.0[sec.] 程度であり, 実用上想定される $\Delta t \approx 10^{-5}$ 秒における 50 反復程度の前処理付き BiCGSTAB 法の計算時間と比べて十分小さいと言える。

以上より, 重みパラメータを最適化した重み付き定常反復型前処理を用いることで, 従来の対角スケーリング前処理に比べ, 反復当たりの計算時間では 7.3 倍程度増大するものの, 同程度の反復回数で時間ステップ Δt を 100 倍程度大きくとることができた。結果としてシミュレーション全体では少なくとも 10 倍以上の高速化を実現できた。

5 まとめ

本論文では、大規模実非対称線形方程式 (1) に対する重み付き定常反復型前処理に対する重みパラメータの最適化手法を提案した。また、偏微分方程式を離散化して得られるモデル問題および超新星爆発計算に対する数値実験から、従来の定常反復型前処理が機能しない大規模実問題に対して、提案するパラメータ最適化手法を用いる事によって、重み付き定常反復型前処理が有効に働くことが確認された。

今後の課題としては、パラメータ最適化にかかる演算量の削減が挙げられる。また、提案手法を非エルミート線形方程式へ拡張し、より広範囲の実問題へ適用しその有効性を検証することも今後の課題として挙げられる。

謝辞

本研究はH P C I 戦略プログラム 分野5「物質と宇宙の起源と構造」、JST/CREST, KAKENHI(Nos. 20105004, 20105005, 21246018, 22540296, 23105702) の援助を受けた。

参考文献

- [1] K. Abe and S.-L. Zhang, A variable preconditioning using the SOR method for GCR-like methods, *Int. J. Numer. Anal. Mod.*, 2(2005), 147–161.
- [2] A. Imakura, T. Sakurai, K. Sumiyoshi and H. Matsufuru, An auto-tuning technique of the weighed Jacobi-type Iteration used for preconditioners of Krylov subspace methods, in: *IEEE 6th International Symposium on Embedded Multicore SoCs (MCSoc-12)*, (2012), 183–190.
- [3] A. Imakura, T. Sakurai, K. Sumiyoshi and H. Matsufuru, A parameter optimization technique for a weighted Jacobi-type preconditioner, *JSIAM Letters*, 4(2012), 41–44.
- [4] Y. Saad, *Iterative methods for sparse linear systems*. 2nd edition, SIAM, Philadelphia, PA, 2003.
- [5] 住吉光介, 輻射流体シミュレーション (2) 非等方性の強い輻射場における輸送計算: 超新星爆発におけるニュートリノ輻射輸送の例, *プラズマ・核融合学会誌*, 88(2012), 610–617.
- [6] K. Sumiyoshi and S. Yamada, Neutrino transfer in three dimensions for core-collapse supernovae. I. static configurations, *Astrophys. J. Suppl.*, 199(2012), 17.
- [7] H. A. van der Vorst, Bi-CGSTAB: a fast and smoothly converging variant of Bi-CG for the solution of nonsymmetric linear systems, *SIAM J. Sci. Stat. Comput.* 13(1992), 631–644.