KOBE HPC サマースクール 2018
講義資料　2018/8/7

兵庫県立大学シミュレーション学研究科
安田　修悟

連立一次方程式の解法1

- LU分解

行列Aを下三角行列L（対角成分は1）と上三角行列Uに分解する。

$$A = LU$$

Aが3X3行列の場合：

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ b_{21} & 1 & 0 \\ b_{31} & b_{32} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} \\ 0 & c_{22} & c_{23} \\ 0 & 0 & c_{33} \end{pmatrix}$$

連立一次方程式の解法1

連立一次方程式 $A\vec{x} = \vec{y}$

- LU分解を行う。$LU\vec{x} = \vec{y}$
- $\vec{z} = U\vec{x}$ と置くと、 $L\vec{z} = \vec{y}$ と書ける。

$$\begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ z_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} \\ 0 & c_{22} & c_{23} \\ 0 & 0 & c_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ b_{21} & 1 & 0 \\ b_{31} & b_{32} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ z_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix}$$

連立一次方程式の解法1

連立一次方程式 $A\vec{x} = \vec{y}$

$\boxed{\text{解法の手順}}$

1. $L\vec{z} = \vec{y}$ を解いて、$\vec{z}$ を求める。

2. $U\vec{x} = \vec{z}$ を解いて、元の方程式の解 $\vec{x}$ を求める。

連立一次方程式の解法1

1. $L\vec{z} = \vec{y}$ を解いて、$\vec{z}$ を求める。

$$
\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ b_{21} & 1 & 0 \\ b_{31} & b_{32} & 1 \end{pmatrix}
\begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ z_3 \end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix}
$$

(1) $z_1 = y_1$

(2) $z_2 = y_2 - b_{21}z_1$

(3) $z_3 = y_3 - b_{31}z_1 - b_{21}z_2$

z_1から順次，z_2, z_3と求められる。

連立一次方程式の解法1

2.　$U\vec{x} = \vec{z}$ を解いて、元の方程式の解 $\vec{x}$ を求める。

$$\begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} \\ 0 & c_{22} & c_{23} \\ 0 & 0 & c_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ z_3 \end{pmatrix}$$

(1)　$x_3 = z_3 / c_{33}$

(2)　$x_2 = (z_2 - c_{23}x_3) / c_{22}$

(3)　$x_1 = (z_1 - c_{12}x_2 - c_{13}x_3) / c_{11}$

x_3, x_2, x_1と順次，求められる。

※LU分解の方法については補足資料参照.

連立一次方程式の解法2

- ヤコビの反復法(Jacobi method)

$$A = D + U + L$$

D:diagonal matrix,
U:upper triangular matrix:
L: lower triangular matrix

$$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$$

$$\boldsymbol{x} = D^{-1}\left(\boldsymbol{b} - (U + L)\boldsymbol{x}\right)$$

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)} = D^{-1}\left(\boldsymbol{b} - (U + L)\boldsymbol{x}^{(k)}\right)$$

$$\boldsymbol{x}^{(k)} \to \boldsymbol{x}^{*}$$

- ヤコビの反復法の形式

$$A = D + U + L$$

D:diagonal matrix,
U:upper triangular matrix:
L: lower triangular matrix

$$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$$

$$\boldsymbol{x} = D^{-1}\left(\boldsymbol{b} - (U + L)\boldsymbol{x}\right)$$

$$x_i = c_0 x_0 + c_1 x_1 + \ldots. + c_{i-1} x_{i-1} + c_{i+1} x_{i+1} + \ldots. + c_N x_N$$

1. ***x*** の*i*成分について，成分*i*以外のベクトル要素の線形結合で表す.
2. *i=0,…,N*の*N+1*個の連立一次方程式を反復法で解く.

- ヤコビ反復法（３×３行列）

$$\begin{pmatrix} 5 & 2 & -1 \\ 1 & 3 & 1 \\ 1 & -1 & 5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 \\ -2 \\ 4 \end{pmatrix}$$

非対角成分を除いて右辺に移行

$$\begin{pmatrix} 5 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 \\ -2 \\ 4 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 2 & -1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{5} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{3} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{5} \end{pmatrix} \left[\begin{pmatrix} 5 \\ -2 \\ 4 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 2 & -1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \right]$$

- ヤコビの反復法(3×3行列)

$$\text{initial value } (x^{(0)}, y^{(0)}, z^{(0)}) = (x_0, y_0, z_0)$$

適当な初期値を使って
反復計算を実行.

$$\begin{pmatrix} x^{(k+1)} \\ y^{(k+1)} \\ z^{(k+1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{5} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{3} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{5} \end{pmatrix} \left[\begin{pmatrix} 5 \\ -2 \\ 4 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 2 & -1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x^{(k)} \\ y^{(k)} \\ z^{(k)} \end{pmatrix} \right]$$

$$\begin{pmatrix} x^{(k)} \\ y^{(k)} \\ z^{(k)} \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} x^* \\ y^* \\ z^* \end{pmatrix} \quad (k \to \infty)$$

解が収束するまで反復する.

(x,y,z)が収束する場合には、その値は連立一次方程式の解を与える.

- ヤコビの反復法（３×３行列）
  - 収束判定の例

$$\begin{pmatrix} e_x \\ e_y \\ e_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 & 2 & -1 \\ 1 & 3 & 1 \\ 1 & -1 & 5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x^{(k)} \\ y^{(k)} \\ z^{(k)} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 5 \\ -2 \\ 4 \end{pmatrix}$$

$$\sqrt{e_x^2 + e_y^2 + e_z^2} \ll 1$$

元の方程式との残差を求めて
十分小さくなるまで反復する.

サンプルコード yabobi_3by3.c

連立一次方程式の解法

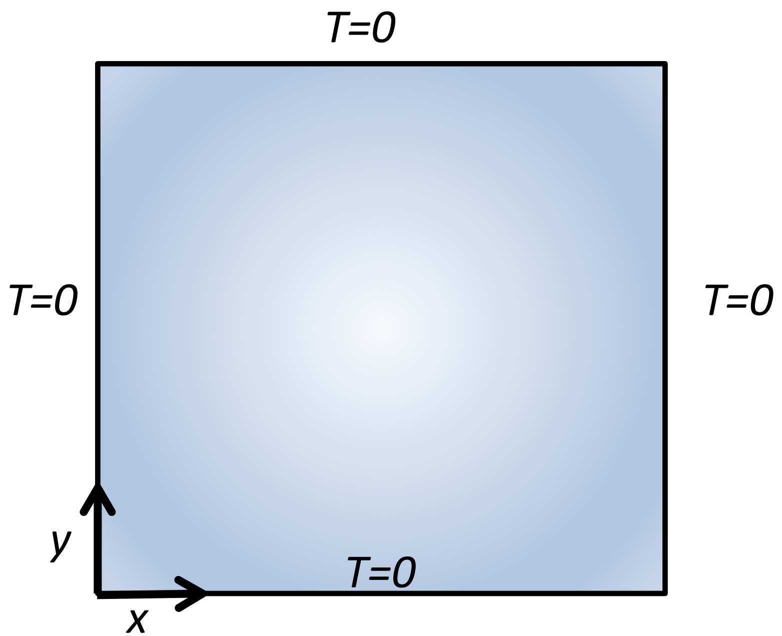
- サンプルコード
  次の連立一次方程式をヤコビ法とLU分解を使ってそれぞれ解くプログラムがyacobi_solver.c, lu_solver.cです.

$$\begin{pmatrix} 5 & 1 & 2 & 0 & -1 \\ 0 & 2 & -1 & 1 & 2 \\ 1 & 1 & 3 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 & 0 & 5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 \\ 0 \\ -2 \\ 0 \\ 4 \end{pmatrix}$$

ヤコビ法の応用

- 温度場を計算する。（ラプラス方程式）

$$\Delta T = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} = 10$$



- 温度場を計算する。（ラプラス方程式）

$$\Delta T = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} = 10$$

- 差分化する。

$$T\left(x_i, y_j\right) = T_{i,j}\ ,$$
$$x_i = y_i = \frac{i}{N} \quad (i = 0, \ldots, N),$$
$$\Delta h = 1/N$$

- 温度場を計算する。(ラプラス方程式)

$$\Delta T = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} = 10$$

- 差分化する。

$$T_{i,j} = 10\Delta h^2 + \frac{1}{4}\left(T_{i-1,j} + T_{i+1,j} + T_{i,j-1} + T_{i,j+1}\right)$$

$$(i,j = 1, \ldots, N-1)$$

$$T_{0,j} = T_{N,j} = 0, \quad (j = 0, \cdots, N)$$
$$T_{i,0} = 0, T_{i,N} = 1, \quad (i = 0, \cdots, N)$$

- $T_{i,j}$の線形連立方程式

$$\left.\begin{array}{l} T_{0,j} = T_{N,j} = 0, (j = 0, \ldots, N) \\ T_{i,0} = T_{i,N} = 0, (i = 0, \ldots, N) \end{array}\right\} \text{境界条件として固定}$$

ヤコビの反復法

$$T_{i,j}^{(k+1)} = 10\Delta h^2 + \frac{1}{4}\left(T_{i-1,j}^{(k)} + T_{i+1,j}^{(k)} + T_{i,j-1}^{(k)} + T_{i,j+1}^{(k)}\right)$$
$$(i, j = 1, \ldots, N-1)$$

サンプルコード laplace.c

演習4

- 熱伝達問題のコードで以下のことについて調べよ.
  - 温度分布の結果を可視化.
  - 水平参照と垂直参照の違い.
  - コンパイルオプション （SIMD命令）の影響を調べよ.

ベクトル化

- SIMD（Single Instruction Multiple Data）
  - 1命令で複数要素の演算を行う.

```
for(i=0;i<n;i++){
    C[i]=A[i]+B[i];
}
```

- [SSE]: float4要素を一度に計算
- [AVX]: float8要素
- [AVX-512]: float 16要素
  (研究科の計算機は未対応）

	A[0]	**A[1]**	**A[2]**	**A[3]**
+	**B[0]**	**B[1]**	**B[2]**	**B[3]**
	C[0]	**C[1]**	**C[2]**	**C[3]**

コンパイラーによるベクトル化

- ループの自動ベクトル化（-xまたは-axオプション）
  - 最適化レポート（-qopt-reportオプション）でベクトル化状況を確認

  icc -xhost laplace.c -qopt-report

  - -xhost: コンパイルを行うホスト・プロセッサーで利用可能な最上位の命令セット向けのコードを生成.
  - laplace.optrptにベクトル化状況を報告.

LU分解の方法

$$A = LU$$

Aが3X3行列の場合:

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ b_{21} & 1 & 0 \\ b_{31} & b_{32} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} \\ 0 & c_{22} & c_{23} \\ 0 & 0 & c_{33} \end{pmatrix}$$

具体的に書くと、

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} \\ b_{21}c_{11} & b_{21}c_{12} + c_{22} & b_{21}c_{13} + c_{23} \\ b_{31}c_{11} & b_{31}c_{12} + b_{32}c_{22} & b_{31}c_{13} + b_{32}c_{23} + c_{33} \end{pmatrix}$$

LU分解の方法

1. 行列*A*を次のように*A'*に変換する。

L, U成分での表現は？

$$A' = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ \boxed{a_{21}/a_{11}} & \boxed{a_{22} - a'_{21}a_{12}} & \boxed{a_{23} - a'_{21}a_{13}} \\ \boxed{a_{31}/a_{11}} & \boxed{a_{32} - a'_{31}a_{12}} & \boxed{a_{33} - a'_{31}a_{13}} \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} \\ b_{21} & c_{22} & c_{23} \\ b_{31} & b_{32}c_{22} & b_{32}c_{23} + c_{33} \end{pmatrix}$$

2. 行列*A'*をさらに次のように*A''*変換するとL，Uの全ての要素が決定する。

$$A'' = \begin{pmatrix} a'_{11} & a'_{12} & a'_{13} \\ a'_{21} & a'_{22} & a'_{23} \\ a'_{31} & \boxed{a'_{32}/a'_{22}} & \boxed{a'_{33} - a''_{32}a'_{23}} \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} \\ b_{21} & c_{22} & c_{23} \\ b_{31} & b_{32} & c_{33} \end{pmatrix}$$

LU分解のコード

$$\begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1N} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{N1} & \cdots & a_{NN} \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & \cdots & c_{1N} \\ b_{21} & c_{22} & & c_{2N} \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ b_{N1} & \cdots & b_{NN-1} & c_{NN} \end{pmatrix}$$

行列AをLU分解の要素行列に変換するプログラム。

```
for(k=0;k<N-1;k++){
  w=1/a[k][k];
  for(i=k+1;i<N;i++){
    a[i][k] *= w;
    for(j=k+1;j<N;j++){
      a[i][j] -= a[i][k]*a[k][j];
    }
  }
}
```

サンプルコード lu_decomp.c

※ *U*行列の対角成分c_{ii}にゼロや小さな値が出てくる場合には、更に、行や列の入れ替えを伴う複雑な手順を考える必要がある。

LU分解のあと

1. $L\vec{z} = \vec{y}$ を解いて、$\vec{z}$ を求める。

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ b_{21} & 1 & 0 \\ b_{31} & b_{32} & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ z_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix}$$

(1) $z_1 = y_1$

(2) $z_2 = y_2 - b_{21} z_1$

(3) $z_3 = y_3 - b_{31} z_1 - b_{21} z_2$

$\vec{y} \Rightarrow \vec{z}$ に変換

```
for(i=0;i<N;i++)
    for(j=0;j<i;j++) y[i]-=a[i][j]*y[j];
```

z_1から順次，z_2, z_3と求められる。

LU分解のあと

2. $U\vec{x} = \vec{z}$ を解いて、元の方程式の解 $\vec{x}$ を求める。

$$
\begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} \\ 0 & c_{22} & c_{23} \\ 0 & 0 & c_{33} \end{pmatrix}
\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ z_3 \end{pmatrix}
$$

$\vec{z}(\vec{y}) \Rightarrow \vec{x}$ に変換

(1) $x_3 = z_3 / c_{33}$

(2) $x_2 = (z_2 - c_{23}x_3) / c_{22}$

(3) $x_1 = (z_1 - c_{12}x_2 - c_{13}x_3) / c_{11}$

```
for(i=N-1;i>=0;i--){
        for(j=N-1;j>i;j--) y[i]-=a[i][j]*y[j];
        y[i]/=a[i][i];
}
```

x_3，x_2, x_1と順次，求められる。

自習

- 熱伝達問題をLU分解を使って解く。
  - ヤコビ法の結果との比較（誤差や計算時間など）