テクニカルノート

ブロック5重対角行列群に対する Rotated Alternative LU 分解法について—ベクトル計算機のための新解法

伊藤祥司[†] 張 紹良[††] 名取 亮[††]

本論文では，ブロック5重対角行列群を係数行列とする連立一次方程式をベクトル計算機を用いて解くための，新しい解法（Rotated Alternative LU 分解法）を提案する．本解法は，流体解析など実際の問題で頻繁に現れるブロック5重対角行列群を係数行列とする大規模な複数の連立一次方程式に対して，対角方向の両端から LU 分解するアイデアに基づき，ベクトル長を2倍にするものである．数値実験により，従来の LU 分解法と本解法とを比較した．本解法を用いると，計算時間において 30%程度短縮でき，計算精度は従来と同程度であることが確認された．

Rotated Alternative LU Decomposition Method for Block Pentadiagonal Linear Systems on Vector Processor

SHOJI ITOH,[†] SHAO-LIANG ZHANG[††] and MAKOTO NATORI[††]

In this paper, we propose a new method “Rotated Alternative LU decomposition” for solving block pentadiagonal linear systems, that makes vector processing more efficient. This method makes the vector length twice for those systems which often appear on fluid dynamics analysis. That idea is based on an alternative decomposition. A few numerical experiment shows that this method is more efficient, 30% shorter on the calculating time and same order on the accuracy, than the original LU decomposition.

1. はじめに

3次元圧縮性流体を記述するナビエ・ストークス方程式を解く際，4次精度 AF 法（Approximate Factorization method）を用いると，空間3方向 (i,j,k) の差分情報を表すブロック5重対角行列群 $\hat{F}_{j,k}$ が現れる．このとき，物理方程式の求解は，その行列群 $\hat{F}_{j,k}$ を係数行列とする大規模な複数の連立一次方程式

$$\hat{F}_{j,k}\boldsymbol{x}_{j,k}=\boldsymbol{b}_{j,k} \tag{1}$$

を解くことに帰着される[1]．ここで，行列群 $\hat{F}_{j,k}$ の構造は式 (2) のとおりである．

式 (2) において，$A^i_{j,k}, B^i_{j,k}, C^i_{j,k}, D^i_{j,k}, E^i_{j,k}$ $(i=1\sim l;\ j=1\sim m;\ k=1\sim n)$ は，5×5 小行列である．式 (2) の第 i 行は，4次精度 AF 法を用いたときの差分情報を表す．

$$\hat{F}_{j,k}=\begin{bmatrix} C^1_{j,k} & D^1_{j,k} & E^1_{j,k} & & & & & \mathbf{0} \\ B^2_{j,k} & C^2_{j,k} & D^2_{j,k} & E^2_{j,k} & & & & \\ A^3_{j,k} & B^3_{j,k} & C^3_{j,k} & D^3_{j,k} & E^3_{j,k} & & & \\ & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & & \\ & & A^{l-2}_{j,k} & B^{l-2}_{j,k} & C^{l-2}_{j,k} & D^{l-2}_{j,k} & E^{l-2}_{j,k} \\ & & & A^{l-1}_{j,k} & B^{l-1}_{j,k} & C^{l-1}_{j,k} & D^{l-1}_{j,k} \\ \mathbf{0} & & & & A^{l}_{j,k} & B^{l}_{j,k} & C^{l}_{j,k} \end{bmatrix} \tag{2}$$

ベクトル計算機で解く場合，式 (1) のような複数の方程式を同時に解くには，反復法を用いると収束判定が難しいため，直接法である LU 分解法が用いられることが多い．このとき，行列群 $\hat{F}_{j,k}$ を LU 分解し，j または k 方向をベクトル化して複数の方程式を同時に解くことで計算の効率化を図ることができる[2]．しかし，計算機の性能を十分に発揮させる観点からは，従来の LU 分解法には改善の余地がある．

本論文では，従来の LU 分解法の計算過程に着目し，行列群 $\hat{F}_{j,k}$ に対し対角方向の両端から LU 分解を同時に行い，ベクトル計算機での計算効率を向上させる

† 筑波大学大学院修士課程理工学研究科
Master’s Program in Science and Engineering, University of Tsukuba
†† 筑波大学電子・情報工学系
Institute of Information Sciences and Electronics, University of Tsukuba

解法を提案する．また，従来の LU 分解法との性能比較実験の結果により，新解法の優れた計算効率を示す．

2. 従来の LU 分解法

従来の LU 分解法では，$\hat{F}_{j,k}$ は式 (3) のように分解される．ここで，I は単位行列を表す．ベクトル計算機を用いる場合，ベクトル長（同時に LU 分解できる要素数）は，j 方向をベクトル化するならば m，k 方向をベクトル化するならば n である．式 (3) の上波線付き小行列は，分解により更新された小行列を表す．

$$\hat{F}_{j,k} = \hat{L}_{j,k}\hat{U}_{j,k} =$$
$$\begin{bmatrix} C^1_{j,k} & & & & & & \\ B^2_{j,k} & \tilde{C}^2_{j,k} & & & & \mathbf{0} & \\ A^3_{j,k} & \tilde{B}^3_{j,k} & \tilde{C}^3_{j,k} & & & & \\ & \cdots & \cdots & \cdots & & & \\ & & A^{l-2}_{j,k} & \tilde{B}^{l-2}_{j,k} & \tilde{C}^{l-2}_{j,k} & & \\ & \mathbf{0} & & A^{l-1}_{j,k} & \tilde{B}^{l-1}_{j,k} & \tilde{C}^{l-1}_{j,k} & \\ & & & & A^{l}_{j,k} & \tilde{B}^{l}_{j,k} & \tilde{C}^{l}_{j,k} \end{bmatrix}$$
$$\times \begin{bmatrix} I & \tilde{D}^1_{j,k} & \tilde{E}^1_{j,k} & & & & \\ & I & \tilde{D}^2_{j,k} & \tilde{E}^2_{j,k} & & \mathbf{0} & \\ & & I & \tilde{D}^3_{j,k} & \tilde{E}^3_{j,k} & & \\ & & & \cdots & \cdots & \cdots & \\ & & & & I & \tilde{D}^{l-2}_{j,k} & \tilde{E}^{l-2}_{j,k} \\ & \mathbf{0} & & & & I & \tilde{D}^{l-1}_{j,k} \\ & & & & & & I \end{bmatrix} \quad (3)$$

すなわち，このようなブロック 5 重対角行列群を上下ブロック 3 重対角行列群の積の形に分解し，前進消去・後退代入を行い解を求める[2)]．

do 1 i=1,l

do 1 k=1,n

do 1 j=1,m

$\tilde{B}^i_{j,k} = B^i_{j,k} - A^i_{j,k} \times \tilde{D}^{i-2}_{j,k}$

$\tilde{C}^i_{j,k} = C^i_{j,k} - A^i_{j,k} \times \tilde{E}^{i-2}_{j,k} - \tilde{B}^i_{j,k} \times \tilde{D}^{i-1}_{j,k}$

$\tilde{D}^i_{j,k} = (\tilde{C}^i_{j,k})^{-1} \times (D^i_{j,k} - \tilde{B}^i_{j,k} \times \tilde{E}^{i-1}_{j,k})$

$\tilde{E}^i_{j,k} = (\tilde{C}^i_{j,k})^{-1} \times E^i_{j,k}$

$\tilde{b}^i_{j,k} = (\tilde{C}^i_{j,k})^{-1} \times (b^i_{j,k} - A^i_{j,k} \times \tilde{b}^{i-2}_{j,k} - B^i_{j,k} \times \tilde{b}^{i-1}_{j,k})$

1 continue

プログラム 1　従来の LU 分解法

Program1 Original LU decomposition.

前進消去のプログラミングを略記したのがプログラム 1☆である．ここでは，j 方向をベクトル化している．

☆ 実際のプログラミングでは，$i = 1, 2, (l-1), l$ に対しては場合分けが生じる．

3. Rotated Alternative LU 分解法

一方で，行列群の対角方向の両端から中心の要素まで同時に分解し，そこで折り返して後退代入することができる[3)]．このとき，$\hat{F}_{j,k}$ は式 (4) のように分解できる．ここでは，l が奇数のときの分解を表している．l が偶数のときは，$i = 1 \sim \frac{l}{2}$，$i = (\frac{l}{2}+1) \sim l$ で分解される．式 (3) と同様，上波線付き小行列は，分解により更新された小行列を表す．基本的な原理は，i の偶奇によらないため，以下，i が奇数の場合について説明する．

$$\hat{F}_{j,k} = \hat{P}_{j,k}\hat{Q}_{j,k} =$$
$$\begin{bmatrix} C^1_{j,k} & & & & & & & \\ B^2_{j,k} & \tilde{C}^2_{j,k} & & & & & \mathbf{0} & \\ A^3_{j,k} & \tilde{B}^3_{j,k} & \tilde{C}^3_{j,k} & & & & & \\ & \cdots & \cdots & \cdots & & & & \\ & & A^{\frac{l+1}{2}}_{j,k} & \tilde{B}^{\frac{l+1}{2}}_{j,k} & \tilde{C}^{\frac{l+1}{2}}_{j,k} & \tilde{D}^{\frac{l+1}{2}}_{j,k} & E^{\frac{l+1}{2}}_{j,k} & \\ & & & & \cdots & \cdots & \cdots & \\ & & & & & \tilde{C}^{l-2}_{j,k} & \tilde{D}^{l-2}_{j,k} & E^{l-2}_{j,k} \\ & \mathbf{0} & & & & & \tilde{C}^{l-1}_{j,k} & D^{l-1}_{j,k} \\ & & & & & & & C^{l}_{j,k} \end{bmatrix}$$
$$\times \begin{bmatrix} I & \tilde{D}^1_{j,k} & \tilde{E}^1_{j,k} & & & & \\ & I & \tilde{D}^2_{j,k} & \tilde{E}^2_{j,k} & & \mathbf{0} & \\ & & I & \tilde{D}^3_{j,k} & \tilde{E}^3_{j,k} & & \\ & & & \cdots & \cdots & \cdots & \\ & 0 & 0 & I & 0 & 0 & \\ & \cdots & \cdots & \cdots & & & \\ & & \tilde{A}^{l-2}_{j,k} & \tilde{B}^{l-2}_{j,k} & I & & \\ & \mathbf{0} & & \tilde{A}^{l-1}_{j,k} & \tilde{B}^{l-1}_{j,k} & I & \\ & & & & \tilde{A}^{l}_{j,k} & \tilde{B}^{l}_{j,k} & I \end{bmatrix} \quad (4)$$

この分解法では，分解過程から名付けられた，"Alternative decomposition（双方向分解）[3)]，別名：Twisted factorization（ツイスト分解）[4)]" が行われる．双方向分解は，単一の連立方程式に対して CG 法など反復解法の前処理の並列化に使用されている[3),4)]．

本研究では，この分解法を複数の連立一次方程式を解くための直接法に応用し，ベクトル計算機の計算効率を改善するようなアルゴリズムへとさらに改良した．

一般に，ベクトル計算機を用いて問題を解く場合，ベクトル長を十分に長くすると計算機性能を引き出すことができる[5)]．計算機性能が飽和するに至らない程度のベクトル長においては，その長さを 2 倍にすることで計算効率の向上が期待できる．そこで本研究では，このベクトル計算機の一般的なアーキテクチャ特性を

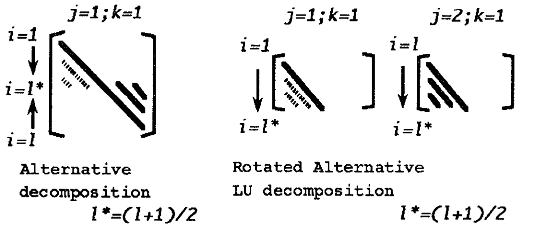


図1 双方向分解（左）と Rotated ALU 分解（右）のイメージ
Fig. 1 Images of Alternative decomposition (left) and Rotated ALU decomposition (right).

念頭に，式 (4) の双方向分解の $\hat{P}_{j,k}\hat{Q}_{j,k}$ に対して，中央から上下に二分割し，下半分の要素を 180 度回転してベクトル化方向の要素へ組み込むことでベクトル長を倍増させた．本研究では，この解法を Rotated Alternative LU 分解法（以下，Rotated ALU 分解法と略記）と呼ぶことにする．詳細は以下のとおりである．

図1 は，$\hat{P}_{1,1}$ に対する双方向分解（左）と Rotated ALU 分解（右）をイメージで表現したものである．図中の実線，点線は左右の図で各々対応しており，矢印は LU 分解の順序を表している．Rotated ALU 分解では，$\hat{P}_{1,1}$ を上下に分割し☆，下半分要素を図 1 のとおり 180 度回転して $j=1$，$j=2$ とする．$\hat{Q}_{1,1}$ についても同様である．

行列群 $\hat{P}_{j,k}$（ここで，$j=1\sim m$; $k=1\sim n$）に対する Rotated ALU 分解では，上半分要素だけを並べて $j=1\sim m$ を形成し，下半分要素を 180 度回転して $j=(m+1)\sim 2m$ を形成し，j 方向をベクトル化する．これを $k=1\sim n$ について行う．行列群 $\hat{Q}_{j,k}$ についても同様である．

プログラム 1 と同様に前進消去の様子を次に示す．

do 2 i=1,$\frac{l+1}{2}$
do 2 k=1,n
do 2 j=1,2m

$$\tilde{B}^i_{j,k} = B^i_{j,k} - A^i_{j,k} \times \tilde{D}^{i-2}_{j,k}$$
$$\tilde{C}^i_{j,k} = C^i_{j,k} - A^i_{j,k} \times \tilde{E}^{i-2}_{j,k} - \tilde{B}^i_{j,k} \times \tilde{D}^{i-1}_{j,k}$$
$$\tilde{D}^i_{j,k} = (\tilde{C}^i_{j,k})^{-1} \times (D^i_{j,k} - \tilde{B}^i_{j,k} \times \tilde{E}^{i-1}_{j,k})$$
$$\tilde{E}^i_{j,k} = (\tilde{C}^i_{j,k})^{-1} \times E^i_{j,k}$$
$$\tilde{b}^i_{j,k} = (\tilde{C}^i_{j,k})^{-1} \times (b^i_{j,k} - A^i_{j,k} \times \tilde{b}^{i-2}_{j,k} - B^i_{j,k} \times \tilde{b}^{i-1}_{j,k})$$

2 continue

プログラム 2 Rotated ALU 分解法
Program2 Rotated ALU decomposition

☆ プログラミングでは，テクニックとして，l の偶奇や LU 分解でのデータ参照に応じて二分割後の i にダミー領域を設ける．

表1 実験モデル
Table 1 Examination models.

m	40	60	80	120	160	240	300	480
n	60	40	30	20	15	10	8	5

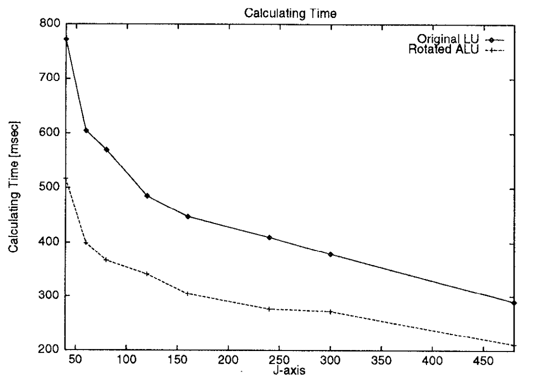


図2 従来の LU 分解法と Rotated ALU 分解法との計算時間の比較
Fig. 2 Comparison of calculating time between Original LU decomposition and Rotated ALU decomposition.

4. 数値実験

ここでは，従来の LU 分解法と Rotated ALU 分解法とを比較した結果を示す．実験では，流体問題で扱うサイズに基づいた，様々なベクトル長に対する計算時間を測定した．

4.1 実験内容

係数行列 $\hat{F}_{j,k}$ を構成する小行列は，Frank 行列を基に LU 分解できるよう作成した．真の解 $\boldsymbol{x}_{j,k}$ は，乱数を用いて作成した．右辺項 $\boldsymbol{b}_{j,k}$ は，$\hat{F}_{j,k}$，$\boldsymbol{x}_{j,k}$ と式 (1) を用いて作成した．また，様々なベクトル長に対しても，全要素数 $(l \times m \times n)$ は一定となるようにした．LU 分解する i 方向の要素数は固定し（$l=63$），それ以外の方向は $m \times n = 2400$（一定）となるように m，n を変化させた（**表1**）．本実験では，j 方向をベクトル化した．

時間計測は，従来の LU 分解と Rotated ALU 分解による計算部分に対して実施した．計算機は，富士通 VPP500 の 1PE を用いた．

4.2 実験結果

計算時間を，**図2** に示す．横軸は，j 方向の要素数を表し，縦軸は，計算時間 [msec] を表しており，表 1 のサイズにおける計算時間をプロットした．この時間を基に計算時間比をグラフにしたのが，**図3** である．

これらから，従来の LU 分解法に比べて Rotated

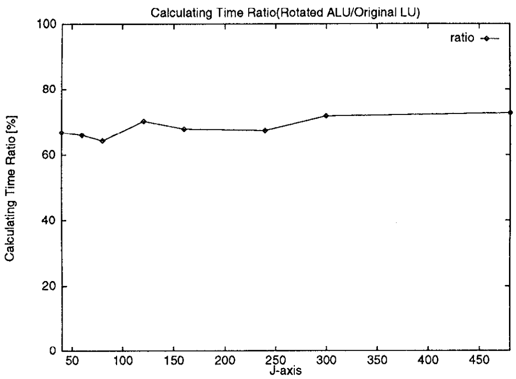


図3 従来の LU 分解法と Rotated ALU 分解法との計算時間比
Fig. 3 Ratio of calculating time between Original LU decomposition and Rotated ALU decomposition.

ALU 分解法では，最高30%程度まで計算時間が短縮したことが分かる．

解の精度に関して，単精度で計算を行ったところ，表1のすべてのモデルに対して，両アルゴリズムの誤差のオーダーは式(5)に示すとおりであり，このテスト問題において同等の精度であることが分かった．

$$\frac{\Sigma|\, x_{j,k} - \bar{x}_{j,k}\,|^2}{\Sigma|\, x_{j,k}\,|^2} \sim O(10^{-6}) \qquad (5)$$

$x_{j,k}$：真の解
$x_{j,k}$：数値解

5. まとめ

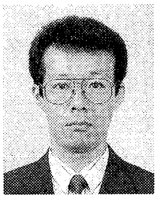
ブロック5重対角行列群を係数行列とする大規模な複数のシステムに対して，Rotated ALU 分解法は，従来の LU 分解法に比べると，ベクトル計算機の性能をさらに引き出すアルゴリズムであり，計算精度も保持しているといえる．

流体の問題に限らず他の問題についても，同様の行列群に対してベクトル計算機で解く場合は，Rotated ALU 分解法を用いることを提案する．

参考文献

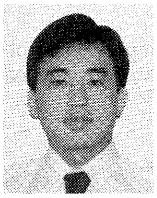
1) 標 宣男，鈴木正昭，石黒美佐子，寺坂晴夫：数値流体力学，朝倉書店 (1994).
2) Pulliam, T.H.: Euler and Thin layer Navier-Stokes Codes: ARC2D, ARC3D, *Notes for computational fluid dynamics user's workshop*, pp.15.1–15.84 (1984).
3) Van der Vorst, H.A.: Analysis of a parallel solution method for tridiagonal linear systems, *Parallel Computing*, Vol.5, pp.303–311 (1987).
4) Van der Vorst, H.A.: Large tridiagonal and block tridiagonal linear systems on vector and parallel computers, *Parallel Computing*, Vol.5, pp.45–54 (1987).
5) Dongarra, J.J., Duff, I.S., Sorensen, D.C. and Van der Vorst, H.A.: *Solving Linear Systems on Vector and Shared Memory Computers*, SIAM (1991). 小国 力 (訳)：コンピュータによる連立一次方程式の解法—ベクトル計算機と並列計算機，丸善 (1993).

(平成9年5月22日受付)
(平成9年9月10日採録)



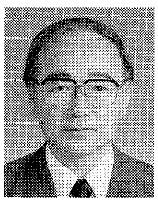
伊藤 祥司（学生会員）

1966年生．1990年3月筑波大学第1学群自然学類卒業．同年4月富士通（株）入社．HPC 分野の業務に従事．1996年4月筑波大学大学院理工学研究科入学．現在に至る．大規模行列計算に対するハイパフォーマンスコンピューティングに興味を持つ．日本応用数理学会会員．



張 紹良

1962年生．1983年7月中国吉林大学数学系卒業．1990年3月筑波大学大学院工学研究科博士課程修了，工学博士．(株) 計算流体研究所研究員，名古屋大学工学部助手を経て，1995年11月筑波大学電子・情報工学系講師．現在に至る．大規模行列計算における反復解法の開発および並列計算のアルゴリズムの研究に従事．日本応用数理学会会員．



名取 亮（正会員）

1941年生．1969年東京大学大学院工学系研究科博士課程修了，工学博士．同年東京大学大型計算機センター助手．1974年電気通信大学電気通信学部助教授．1980年筑波大学電子・情報工学系助教授．1987年同教授．現在に至る．専攻分野，数値解析，応用数学．日本応用数理学会，日本数学会，日本物理学会各会員．