ショートノート

並列計算機により3項方程式を解くための modified cyclic reduction algorithm†

平 岩 健 三††

本稿では，3項方程式を安全に解くための新しい並列解法を提案する．この解法は従来の cyclic reduction algorithm を，ある scaling 手法により改善したものである．しかし，その実行時間は cyclic reduction algorithm よりも少し遅いだけである．

また，この解法の中で発生する丸めの誤差が考察される．そして提案された解法は，cyclic reduction algorithm よりも安全であり，ガウス消去法よりも安定であることが，数値的に示される．

1. はじめに

最近，膨大な計算機時間を要する問題が計算機の処理対象となってきた．そのような問題の対処の一手段として並列計算機が注目されている[4),5)]．これはデータ並びの規則性に着目し，そのデータ群を1ベクトル演算で実行するもので次の2つに大別される．すなわちアレイ型(ILLIAC IV 型)とパイプライン型(CDC-STAR型) である．本論文では並列計算の性質を述べたあと，パイプライン型計算機を基盤にすえ，線型代数の中でしばしばあらわれる3項方程式の数値解法について考察する．

3項方程式の解法には，通常の計算機ではガウス消去法（以降 GE と略す）が良く用いられるが，これは漸化式になるために並列計算機上では効率向上を期待できない．そのために並列計算機上で3項方程式を効率よく解くための方法が提案されている．本論文では1970年に Buzbee らが2次元 Poisson 問題の直接解法として提案した cyclic reduction algorithm[1)]（以降 CRA と略す）を考察し，CRA が安全でない経験例を示す．それ故それを安全化するように改良した modified cyclic reduction algorithm（以降 MCRAと略す）を提案する．この解法は CRA より少し遅いが，CRA の変形である Buneman algorithm[1)] に較べるとかなり速い．なおシミュレーションに基づく並列解法の処理速度に関する論文は多いが，その実行例と丸め誤差に関する報告はほとんどないように思われる．ここでは具体的に数値例を与え，その結果として MCRA は CRA より安全であり，GE より安定であることを示す*.

2. アレイ型とパイプライン型との並列計算の相違

従来の計算機は1スカラ演算で1データを処理する．その演算時間をSとするとNデータの処理時間はSNである．一方アレイ型はプロセッサがN個あるとし，そのベクトル演算時間をV_aとするとNデータの処理時間はV_aである．$S \approx V_a$とするとアレイ型は従来の計算機に較べてN倍速くなり，Nよりも少ないデータを処理する演算時間もV_aである．それ故アレイ型における解法の速度を比較するとき，そのベクトル演算の回数 (Operation Counts) を基準にすることができる．又，パイプライン型のベクトル演算時間はデータ数Nの一次式V_pN+Cで表わされる．通常，$0<V_p<S<C$が成立する．これはNが小さいと，従来の計算機よりも遅く，Nが十分大きいと，粗くS/V_p倍速くなり，データ数に比例して時間がかかることを意味している．それ故パイプライン型における解法の速度を比較するとき，そのデータエレメント数 (Element Counts) Nを基準にすることができる．以降Nは十分大きいとし，Cを無規する．**表1**はここで述べた記号に従う．

---

† A Modified Cyclic Reduction Algorithm for Solving a Tridiagonal System of Linear Equations by Parallel Computer by KENZO HIRAIWA (Software Division, Fujitsu Ltd.).

†† 富士通(株)ソフトウェア事業部 LP 部

* この論文で実際に使用された並列計算機は FACOM 230-75 アレイプロセッサ[5)]である．

表1 各アルゴリズムの演算量の比較

Table 1 Comparison of computational complexity for each algorithm.

N: order, M: scalar multiplication, A: scalar addition, D: scalar division, M_a: array vector multiplication, A_a: array vector addition, D_a: array vector division, M_p: coefficient of N for pipeline vector multiplication, A_p: coefficient of N for pipeline vector addition, D_p: coefficient of N for pipeline vector division. Subtraction and move operation are included in addition. Here $M_a \approx M$, $A_a \approx A$, $D_a \approx D$, $0<M_p<M$, $0<A_p<A$, $0<D_p<D$.

parallel computer / algorithm	array type (operation counts)	pipeline type (element counts)
Gaussian elimination	$(3M+3A+2D)N$	$(3M+3A+2D)N$
cyclic reduction algorithm	$(13M_a+6A_a+1D_a)\log_2 N$	$(13M_p+6A_p+1D_p)N$
modified cyclic reduction algorithm	$(11M_a+7A_a+1D_a)\log_2 N-6M_a-5A_a$	$(13.5M_p+7A_p+1.5D_p)N$
Buneman algorithm	$(15M_a+10A_a+2D_a)\log_2 N$	$(15M_p+10A_p+2D_p)N$

3. MCRA

解くべきN元の実係数3項方程式を

$$A\boldsymbol{x}=\boldsymbol{y} \tag{1}$$

$$A=\begin{bmatrix} d_1 & f_1 & & & & \\ e_2 & d_2 & f_2 & & & \\ & & \cdots & & & \\ & e_i & d_i & f_i & & \\ & & & \cdots & & \\ & & & e_{N-1} & d_{N-1} & f_{N-1} \\ & & & & e_N & d_N \end{bmatrix},$$

$$\boldsymbol{x}=\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_i \\ \vdots \\ x_{N-1} \\ x_N \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{y}=\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_i \\ \vdots \\ y_{N-1} \\ y_N \end{bmatrix}$$

とする．又，この3項方程式の第i行を (e,d,f,y) で表わすことがある．

3.1 GE

並列解法との差異を明確にするためにGEについて述べる．(1)はGEにより以下のように解かれる．

$$\begin{aligned} &w_1=f_1/d_1 \\ &w_i=f_i/(d_i-e_iw_{i-1}) \quad 2\le i\le N-1 \\ &g_1=y_1/d_1 \\ &g_i=(y_i-e_ig_{i-1})/(d_i-e_iw_{i-1}) \quad 2\le i\le N \\ &x_N=g_N \\ &x_i=g_i-w_ix_{i+1} \quad N-1\ge i\ge 1 \end{aligned} \tag{2}$$

なお演算量を表1に示す．

3.2 CRA

便宜上，元数は $N=2^m-1$ (m: 自然数) とする．CRA は，k を反復数とすると， $j=1,2,\cdots,2^{m-k}-1$ に関し，$2^{m-k+1}-1$ 元の3項方程式の $2^{k-1}\cdot(2j-1)$ 行と $2^{k-1}\cdot(2j+1)$ 行を用いて，$2^{k-1}\cdot 2j$ 行の e,f を消去し，$2^{m-k+1}-1$ 元を $2^{m-k}-1$ 元に縮小する．すなわち $2^{k-1}\cdot 2j$ 行は $(e,d,f,y)_{k-1}\to(e',0,d',0,f',y')_k$ となりこれは $(e',d',f',y')_k$ と書ける．この手続きを $k=1,2,\cdots,m-1$ 回繰返すと(1)は1元の方程式になる．これはGEの前進消去にあたる．この方程式はすぐ解かれ，最初に $x_{2^{m-1}}$ の解が求まる．後退代入は，その反復数を k' とすると，$j=1,2,\cdots,2^{k'}$ に関し，縮小された3項方程式について，$k'-1$ までに求まっている $x_{2^{m-k'-1}\cdot(2j-2)}$ と $x_{2^{m-k'-1}\cdot 2j}$ から未知数 $x_{2^{m-k'-1}\cdot(2j-1)}$ を求めることである（但し $x_0=x_{2^m}=0$ とする）．この手続きを $k'=1,2,\cdots,m-1$ 回繰返すとN個の解が求まる．今，$2^{k-1}\cdot(2j-1)$，$2^{k-1}\cdot 2j$，$2^{k-1}\cdot(2j+1)$ の各行を (e^-,d^-,f^-,y^-)，(e,d,f,y)，(e^+,d^+,f^+,y^+)とし，$x_{2^{m-k'-1}\cdot(2j-2)}$を$x^-$，$x_{2^{m-k'-1}\cdot 2j}$ を x^+，$x_{2^{m-k'-1}\cdot(2j-1)}$ をxとすると，前進消去は

$$\begin{aligned} &d'=(d^+e)f^-+(d^-f)e^+-(d^-d^+)d \\ &e'=(d^+e)e^- \\ &f'=(d^-f)f^+ \\ &y'=(d^+e)y^-+(d^-f)y^+-(d^-d^+)y. \end{aligned} \tag{3}$$

又，後退代入は

$$x=(y-ex^--fx^+)/d \tag{4}$$

となる．(3)，(4)は，jに関してベクトル演算可能であるので，GE に較べて，CRA は並列計算機向きである．又，Nは任意元数への拡張も可能である．

3.3 CRA の反復法的性質

CRA は有限回の演算で終了することから直接法ではあるが，(1)で示される係数行列Aを優対角とすると数値のふるまいは反復法的である．実際各反復で非対角要素が対角要素に較べて小さくなる比率は悪くても始めは1次であり，途中より2次となる．このこと

はこの解法が反復法的であることを示している[1].

3.4 CRAの問題点

CRA は 3.3節で述べたように反復法的であることから数値が急激に変化することが多く，すぐに有効桁からはみ出してしまう．実際，著者が経験した，ある応用問題を，オーダ的に見ると，$(e, d, f)=(10^{-5}, 10^{-4}, 10^{-5})$ が1回目の反復で $(10^{-14}, 10^{-12}, 10^{-14})$，2回目で $(10^{-40}, 10^{-36}, 10^{-40})$，3回目で $(10^{-116}, 10^{-108}, 10^{-116})$ となり，すぐに underflow した．このような現象はCRAではむしろ普通であろう．

3.5 MCRA

MCRAは，上述したようにCRAがすぐにoverflowや underflow を起すので，これを避けるため，各反復で対角要素を1にするような一種の scaling を行うように改良した解法である．さらに scaling による速度の低下ができるだけ，少なくなるように工夫されている．CRA を改良したものとして，定数項の極端な変動をおさえた Buneman algorithm[1] があるが MCRA は速度の点でこれにまさっている（各々の演算量について表1を参照）．MCRA の手続きを以下に示す．初期設定は

$$t^{\pm}=1/d^{\pm},\quad e^{\pm}=t^{\pm}\cdot e^{\pm},\quad f^{\pm}=t^{\pm}\cdot f^{\pm},\\ y^{\pm}=t^{\pm}\cdot y^{\pm} \tag{5}$$

そのとき前進消去では

$$\begin{aligned} &t=ef^{-}+fe^{+}-d,\quad t'=1/t\\ &e'=(et')e^{-}\\ &f'=(ft')f^{+}\\ &y'=(et')y^{-}+(ft')y^{+}-yt'\\ &d'=1. \end{aligned} \tag{6}$$

後退代入では

$$x=y-ex^{-}-fx^{+} \tag{7}$$

となる．MCRA は3.3節の意味で，反復法的であり，反復数が増えるとき，優対角とすると，対角要素は1，副対角要素は 0 に収束する．実際，3.4 節の問題では，オーダが1回目 $(10^{-2}, 10^{0}, 10^{-2})$，2回目 $(10^{-4}, 10^{0}, 10^{-4})$，3回目 $(10^{-8}, 10^{0}, 10^{-8})$ となり，CRA より安全である．

4. 数値実験と考察

ここでは(8)の3項方程式をとり上げる．この例はバネの変形を有限要素法で解くときのモデル問題に摂動を加えたもので，元数が多くなると GE では解きにくい問題である[3]．

$$\begin{bmatrix} 1.98 & -0.99 & & & & & \\ -0.99 & 1.98 & -0.99 & & & \text{O} & \\ & \cdots\cdots & & & & & \\ & & -0.99 & 1.98 & -0.99 & & \\ & & & \cdots\cdots & & & \\ & \text{O} & & & -0.99 & 1.98 & -0.99 \\ & & & & & -0.99 & 0.99 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_i \\ \vdots \\ x_{N-1} \\ x_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 0.99 \end{bmatrix} \tag{8}$$

この方程式の解の真値は $x_i=i$，$1\leq i\leq N$ であり，$N=16383$ までを GE* と MCRA で解くことにする．その結果として図1に GE と MCRA の速度比較を，図2に GE と MCRA の数値解の誤差を示す．ここに誤差は max (abs ((計算値－真値)/真値)) で判定されている．

この例では，各々の前進消去の計算過程で，GE は(2)の w_i が理論的には1に近づくのに，実際はある大きさになると1に近づけないため，$N=2^{14}-1$ 元では無意味な計算となってしまう[3]．一方MCRAは3.5節で述べたように対角要素は1，副対角要素は0に近づくため，このようなことはなく $2^{14}-1$ 元でも，かなりの精度で求まっている．又 MCRA の精度は GE より常に良い．その理由の1つは，MCRA の演算順序がトーナメント算法であるためにGE に較べて丸め誤差の累積が多くないことが挙げられそうである．図

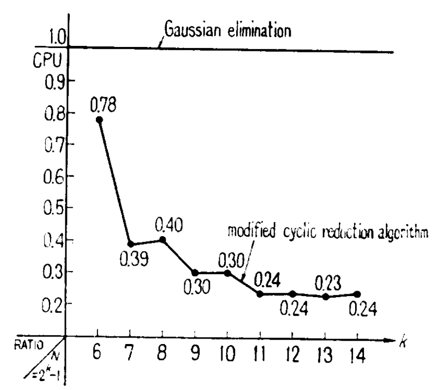

図1 ガウス消去法と moified cyclic reduction algorithm との速度比較

Fig. 1 Comparison of speed for Gaussian elimination vs. modified cyclic reduction algorithm.

* F 230-75 CPU 上の TRIDGS サブルーチンを使用する．$N=16383=2^{14}-1$.

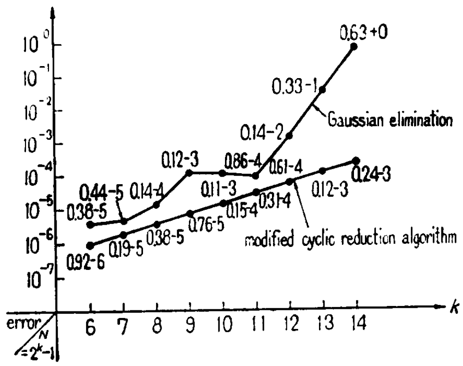

図 2 ガウス消去法と modified cyclic reduction algorithm との最大相対誤差比較

Fig. 2 Comparison of max relative error for Gaussian elimination vs. modified cyclic reduction algorithm.

2はこれらのことを示していると思われる．又 CRA は3.4節で述べた理由により数値実験をしていない．

5. むすび

本論文では cyclic reduction algorithm が安全でない数値例を示し，そしてあまり遅くならない安全な scaling 手法に基づく modified cyclic reduction algorithm (MCRA) を提案した．又数値例を実際に解き，MCRA は N が大きくなると並列計算機の特性により，ガウス消去法 (GE) よりも速くなること (図 1) を示し，精度も良い (図 2) という結果を得，その考察を与えた．安定性の問題はさらに検討を要するが，数値実験から，MCRA は GE で解くことが困難な問題も，かなり安定に解けると予想される．

最後に，論文作成時に種々お世話になった富士通(株)山下真一郎氏，杉本南海夫氏，(株)富士通研究所鈴木千里氏に深謝いたします．

参考文献

1) Stone, H. S.: Parallel Tridiagonal Equation Solvers, ACM transaction on mathematical software, Vol. 1, No. 4, pp. 289–307 (1975).
2) Lambiotte, J. J. and Viogt, R. G.: The solution of Tridiagonal Linear Systems on the CDC-STAR computer, ACM transaction on mathematical software, Vol. 1, No. 4, pp. 308–329 (1975).
3) 戸川隼人：計算機のための誤差解析の基礎，サイエンス社，pp. 46–50 (1974).
4) 加藤満左夫，苗村憲司：並列処理計算機（超高速化へのアーキテクチャ），オーム社 (1976).
5) FACOM 230-75 アレイプロセッサハードウェア解説書，富士通 (1975).

(昭和53年3月15日受付)
(昭和53年7月31日採録)