

# ブロック三重対角連立一次方程式の並列解法

## Parallel Solution for Block Tridiagonal Linear Systems

成富 敬†  
Takashi NARITOMI†

阿曾 弘具‡  
Hiroতোমো ASO‡

山口大学経済学部†  
Faculty of Economics, Yamaguchi University†  
東北大学大学院工学研究科‡  
Graduate School of Engineering, Tohoku University‡

### あらまし

本稿では、大規模なブロック三重対角連立一次方程式の並列解法であるブロック bi-recurrence 法を提案し、その有効性を数値実験により検証している。ブロック bi-recurrence 法の持つ解法本来の並列度は2であるが、処理の粒度を細かくすることで、並列度を向上させることができる。また、異なる演算能力を持つ計算機を使って求解をおこなう場合、*balancer*と呼ばれるパラメータを操作することにより、計算負荷の均等化を図ることができる。

### Abstract

In this paper, we propose a new direct and parallel solver for block tridiagonal linear systems, which is named block bi-recurrence method. The method is suited for parallel and distributed computing because it has inherent parallelism of many levels and load balancing ability. The effectiveness of the block bi-recurrence method is shown by the numerical experiments.

## 1 はじめに

様々な自然現象を常微分方程式や偏微分方程式でモデル化し、コンピュータを用いて数値的に解く場合、最終的には方程式の離散化によって得られる三重対角連立一次方程式やブロック三重対角連立一次方程式を解く問題に帰着されることが多い。一次元問題の離散化により得られる三重対角連立一次方程式、二次元問題や三次元問題の離散化により得られるブロック三重対角連立一次方程式は、通常大規模であり、より高速な計算機や高性能な計算法が求められている。本稿では、ブロック三重対角連立一次方程式の新しい並列解法である、ブロック bi-recurrence 法を提案し、その有効性を数値実験により確認している。

ブロック三重対角連立一次方程式を解くための解法としては、LU分解法をブロック三重対角連立一次方程式に適用できるように拡張した直接法 [3] や、共役勾配法系の反復法が用いられている [1], [2]。本稿で提案しているブロック bi-recurrence 法は、直接法に属する並列解法であり、各ブロックごとのベクトル-ベクトル演算や行列-ベクトル演算をスカラ演算とみなせば、三重対角連立一次方程式の並列解法である bi-recurrence 法 [4] に帰着される。この解法が持つ本来の並列度は2であるが、ブロックごとの計算の際に、処理の粒度を細かくし並列度を上げることができる。さらに、演算能力の異なるプロセッサ間で負荷の分散化が可能である、といった特徴を持つ。

## 2 ブロック bi-recurrence 法

ブロック三重対角連立一次方程式  $\mathbf{Ax} = \mathbf{h}$  を考える。ここで  $\mathbf{A}$  は  $N \times N$  のブロック三重対角行列であり、各ブロック行列は対角優位 [2] とする。また、 $\mathbf{x}$ 、 $\mathbf{h}$  は  $N$  次の列ベクトルである。このとき  $\mathbf{Ax} = \mathbf{h}$  は具体的には、次のように表現される。

$$\begin{pmatrix} D_1 & E_1 & & & & 0 \\ C_2 & D_2 & E_2 & & & \\ & \dots & \dots & \dots & & \\ 0 & & & D_{p-1} & E_{p-1} & \\ & & & C_p & D_p & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \\ \vdots \\ X_{p-1} \\ X_p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} H_1 \\ H_2 \\ \vdots \\ H_{p-1} \\ H_p \end{pmatrix}. \quad (1)$$

ここで、 $D_1, \dots, D_p$  は  $q \times q$  の正則ブロック行列、 $C_2, \dots, C_p, E_1, \dots, E_{p-1}$  は  $q \times q$  のブロック行列であり  $N = pq$  である。また、 $X_1, \dots, X_p, H_1, \dots, H_p$  は  $q$  次の列ベクトルである。例えば、各ブロック行列は、二次元問題に対して有限差分法で離散化した場合、 $D_i, \dots, D_p$  は  $q \times q$  の三重対角行列であり、 $C_2, \dots, C_p, E_1, \dots, E_{p-1}$  は  $q \times q$  の対角行列である。

式 (1) を解くブロック bi-recurrence 法は、次の三つのステージから構成される。以下、 $A_i, A_k$  は  $q \times q$  の正方行列、 $\Gamma_i, \Gamma_k$  は  $q$  次の列ベクトル、 $I$  は  $q \times q$  の単位行列、また  $m (1 < m < p)$  は balancer と呼ばれる整数である。

**Block Attractive Stage:**  $A_1 = -D_1^{-1}E_1$ ,  $\Gamma_1 = D_1^{-1}H_1$ ,  $A_p = -D_p^{-1}C_p$ ,  $\Gamma_p = D_p^{-1}H_p$  を計算し、さらに各  $i, k$  について、 $A_i, \Gamma_i, A_k, \Gamma_k$  を計算する:

$$\begin{cases} A_i = -(D_i + C_i A_{i-1})^{-1} E_i, \\ \Gamma_i = (D_i + C_i A_{i-1})^{-1} (H_i - C_i \Gamma_{i-1}), & (2a) \\ i = 2, 3, \dots, m, \end{cases}$$

$$\begin{cases} A_k = -(D_k + E_k A_{k+1})^{-1} C_k, \\ \Gamma_k = (D_k + E_k A_{k+1})^{-1} (H_k - E_k \Gamma_{k+1}), & (2b) \\ k = p-1, p-2, \dots, m+1. \end{cases}$$

**Block Interactive Stage:**  $X_m, X_{m+1}$  を計算する:

$$X_m = (I - A_m A_{m+1})^{-1} (\Gamma_m + A_m \Gamma_{m+1}), \quad (3a)$$

$$X_{m+1} = (I - A_{m+1} A_m)^{-1} (\Gamma_{m+1} + A_{m+1} \Gamma_m). \quad (3b)$$

**Block Repulsive Stage:** 各  $i(i = m-1, m-2, \dots, 1)$ , 各  $k(k = m+2, m+3, \dots, p)$  について, それぞれ  $X_i, X_k$  を計算する:

$$X_i = A_i X_{i+1} + \Gamma_i, \quad (4a)$$

$$X_k = A_k X_{k-1} + \Gamma_k. \quad (4b)$$

ブロック bi-recurrence 法は, 式 (1) における  $q \times q$  のブロック行列や  $q$  次の列ベクトルをスカラとみなすと bi-recurrence 法 [4] に帰着される. また, bi-recurrence 法におけるスカラ演算はブロック bi-recurrence 法では, ベクトル-ベクトル演算あるいは行列-ベクトル演算に置き換わっている.

### 3 ブロック bi-recurrence 法に関するいくつかの性質

#### 3.1 準備

ブロック bi-recurrence 法に関するいくつかの性質について述べる前に, 証明に必要な式の導出過程について説明する.

式 (1) の求解は次のふたつの式を解くことと等価である:

$$C_i X_{i-1} + D_i X_i + E_i X_{i+1} = H_i, \quad (5a)$$

$$C_k X_{k-1} + D_k X_k + E_k X_{k+1} = H_k. \quad (5b)$$

ここで,  $C_1 = E_p = O$ ,  $1 < m < p$ ,  $i = 1, 2, \dots, m$ ,  $k = p, p-1, \dots, m+1$ .

いま, 式 (5a), 式 (5b) の解をそれぞれ次のように書く:

$$X_i = A_i X_{i+1} + \Gamma_i, \quad (6a)$$

$$X_k = A_k X_{k-1} + \Gamma_k. \quad (6b)$$

ここで,  $A_i, A_k$  は  $q \times q$  の行列であり,  $\Gamma_i, \Gamma_k$  は  $q$  次の列ベクトルである.

式 (6a), 式 (6b) より,

$$X_{i-1} = A_{i-1} X_i + \Gamma_{i-1}, \quad (7a)$$

$$X_{k+1} = A_{k+1} X_k + \Gamma_{k+1}. \quad (7b)$$

式 (7a) の  $X_{i-1}$  を式 (5a) の  $X_{i-1}$  に代入し, 式 (7b) の  $X_{k+1}$  を式 (5b) の  $X_{k+1}$  の代入する. 得られる二

式を整理して式 (6a), 式 (6b) と比較すると,  $A_i, \Gamma_i, A_k, \Gamma_k$  に対する次の再帰方程式が得られる.

$$\begin{cases} A_i = -(D_i + C_i A_{i-1})^{-1} E_i, \\ \Gamma_i = (D_i + C_i A_{i-1})^{-1} (H_i - C_i \Gamma_{i-1}), \end{cases} \quad (8a)$$

$$\begin{cases} A_k = -(D_k + E_k A_{k+1})^{-1} C_k, \\ \Gamma_k = (D_k + E_k A_{k+1})^{-1} (H_k - E_k \Gamma_{k+1}), \end{cases} \quad (8b)$$

ここで,  $A_1 = -D_1^{-1} E_1$ ,  $\Gamma_1 = D_1^{-1} H_1$ ,  $A_p = -D_p^{-1} C_p$ ,  $\Gamma_p = D_p^{-1} H_p$ .

いっぽう, 式 (6a) において  $i = m$  とし, 式 (6b) において  $i = m+1$  とすると,

$$X_m = A_m X_{m+1} + \Gamma_m, \quad (9a)$$

$$X_{m+1} = A_{m+1} X_m + \Gamma_{m+1}. \quad (9b)$$

したがって,  $X_m, X_{m+1}$  は,

$$X_m = (I - A_m A_{m+1})^{-1} (\Gamma_m + A_m \Gamma_{m+1}), \quad (10a)$$

$$X_{m+1} = (I - A_{m+1} A_m)^{-1} (\Gamma_{m+1} + A_{m+1} \Gamma_m). \quad (10b)$$

この解法では,  $X_m, X_{m+1}$  が最初に得られ, 残りの  $X_i$ ,  $i = m-1, m-2, \dots, 1$ ,  $X_k$ ,  $k = m+2, m+3, \dots, p$ , はそれぞれ式 (6a), (6b) から順次, 独立に得られる.

#### 3.2 逆行列の存在

ブロック bi-recurrence 法では, 式 (2a) における  $D_i + C_i A_{i-1}$ , 式 (2b) における  $D_k + E_k A_{k+1}$ , 式 (3a) における  $I - A_m A_{m+1}$ , そして式 (3b) における  $I - A_{m+1} A_m$  のそれぞれに対し逆行列が存在すること, すなわち正則であることを証明する必要がある. ただし,  $D_k + E_k A_{k+1}$ ,  $I - A_{m+1} A_m$  に対する証明は,  $D_i + C_i A_{i-1}$ ,  $I - A_m A_{m+1}$  に対する証明と同様であり, ここでは省略する.

いま, 係数行列  $A$  をブロック対角優位 [2] で  $D_i, \dots, D_p$  は正則であるとする. すなわち,

$$\begin{aligned} \|D_1^{-1}\| \|E_1\| &< 1, \\ \|D_i^{-1}\| (\|C_i\| + \|E_i\|) &< 1, \\ \|D_p^{-1}\| \|C_p\| &< 1. \end{aligned} \quad (11)$$

ここで,  $2 \leq i \leq n-1$ , また  $\|\cdot\|$  はノルムをあらわす.

**Lemma 1.**  $1 \leq i \leq m$  に対して,  $\|A_i\| < 1$ , かつ,  $D_i + C_i A_{i-1}$  は正則である.

*Proof.*  $D_i$  に対する条件より  $D_i$  の正則性は明らか. また式 (11) の条件より,

$$\|A_i\| = \|-D_i^{-1} E_i\| < \|D_i^{-1}\| \|E_i\| < 1, \quad (12)$$

となり,  $\|A_i\| < 1$ .

ここで, ある  $i$  について,  $\|A_i\| < 1$  かつ,  $D_i + C_i A_{i-1}$  が正則である, と仮定する. このとき, もし  $D_{i+1} + C_{i+1} A_i$  が正則でないとする, とある非零ベクトル  $v$  について,  $(D_{i+1} + C_{i+1} A_i)v = o$  が成り立つ. そこで, 正則な行列  $D_{i+1}^{-1}$  を左からかけると,

$$(I + D_{i+1}^{-1} C_{i+1} A_i)v = o. \quad (13)$$

したがって,

$$\begin{aligned} \|v\| &= \|-D_{i+1}^{-1} C_{i+1} A_i v\| \\ &= \|D_{i+1}^{-1} C_{i+1} A_i v\| \\ &\leq \|D_{i+1}^{-1} C_{i+1} A_i\| \|v\|, \end{aligned} \quad (14)$$

となり, 次式が成立する.

$$\|D_{i+1}^{-1} C_{i+1} A_i\| \geq 1. \quad (15)$$

いっぽう,  $D_{i+1}$  の優位性に対する条件より  $\|D_{i+1}^{-1} C_{i+1}\| < 1$ , また帰納法の仮定より  $\|A_i\| < 1$ . したがって,  $\|D_{i+1}^{-1} C_{i+1} A_i\| < 1$  となり, 矛盾が導かれた. したがって,  $D_{i+1} + C_{i+1} A_i$  は正則であることが証明された.

ところで,

$$\begin{aligned} \|A_{i+1}\| &= \|(D_{i+1} + C_{i+1} A_i)^{-1} E_{i+1}\| \\ &= \|(D_{i+1} + C_{i+1} A_i)^{-1} E_{i+1}\| \\ &\leq \|(D_{i+1} + C_{i+1} A_i)^{-1}\| \|E_{i+1}\| \\ &= \frac{\|E_{i+1}\|}{\|D_{i+1} + C_{i+1} A_i\|} \\ &\leq \frac{\|E_{i+1}\|}{\|D_{i+1}\| - \|C_{i+1} A_i\|} \\ &\leq \frac{\|E_{i+1}\|}{\|D_{i+1}\| - \|C_{i+1}\| \|A_i\|} \\ &< \frac{\|E_{i+1}\|}{\|D_{i+1}\| - \|C_{i+1}\|} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &\leq \frac{\|E_{i+1}\|}{\|E_{i+1}\|} \\ &= 1. \end{aligned} \quad (16)$$

ここで,  $\|D_{i+1}\| - \|C_{i+1}\| \geq \|E_{i+1}\|$  (式 (11) より) を用いた. また, もし  $\|E_{i+1}\| = 0$  ならば, 明らかに  $\|A_{i+1}\| = 0 < 1$  であるので,  $\|E_{i+1}\| \neq 0$  と仮定した.

□

**Lemma 2.**  $I - A_m A_{m+1}$  は正則である.

*Proof.* 非零ベクトル  $v$  について,

$$\begin{aligned} \|(I - A_m A_{m+1})v\| &= \|v - A_m A_{m+1} v\| \\ &\geq \|v\| - \|A_m A_{m+1} v\| \\ &\geq \|v\| - \|A_m A_{m+1}\| \|v\| \\ &= (1 - \|A_m A_{m+1}\|) \|v\| \\ &\geq (1 - \|A_m\| \|A_{m+1}\|) \|v\| \\ &> 0. \end{aligned} \quad (17)$$

すなわち, 非零ベクトル  $v$  に対し, 行列-ベクトル積  $(I - A_m A_{m+1})v$  も非零ベクトルである. ところで,  $(I - A_m A_{m+1})v = o$  が  $v \neq o$  の解を持つのは,  $I - A_m A_{m+1}$  が非正則のときであり, したがって,  $I - A_m A_{m+1}$  は正則である. □

同様に,  $\|A_k\| < 1$  であり,  $D_k + E_k A_{k+1}$  と  $I - A_{m+1} A_m$  とが正則であることがいえる.

Lemma 1., Lemma 2. より, 次の定理が得られる.

**Theorem 1.** ブロック bi-recurrence 法は,  $A$  がブロック対角優位で,  $D_i (1 \leq i \leq p)$  が正則であれば解が求まる. □

### 3.3 並列計算性

ブロック bi-recurrence 法の持つ本来の並列度は 2 であるが, 解法に含まれる演算はベクトル-ベクトル, 行列-ベクトル, 行列-行列などであり, 並列度の高い計算が可能である. もちろん, どのような並列度を選ぶかは計算粒度との兼ね合いもあり, 理論的考察や実験的評価が必要である.

### 3.4 負荷分散性

ブロック bi-recurrence 法では、負荷の分散が可能である。すなわち、並列計算の際、balancerである  $m(1 < m < p)$ , を適当な値に設定することにより、負荷の大きい計算機には少しの処理を割り当て、負荷の小さい計算機には多くの処理を割り当てることができる。同じ演算能力を持つふたつのプロセッサによる並列計算では、balancer の値を  $\lfloor p/2 \rfloor$  (ここで  $\lfloor \cdot \rfloor$  はフロア関数) に設定すれば、ふたつのプロセッサの負荷を均等にできる。

また、あるプロセッサ (PE1) の演算能力がもうひとつのプロセッサ (PE2) の演算能力の半分するとき、balancer の値を  $\lfloor 2p/3 \rfloor$  に設定し、PE1 には PE2 の半分の処理量を与えることで、ふたつのプロセッサの負荷を均等にすることができる。

## 4 数値実験

ブロック bi-recurrence 法の有効性を確認するために、マルチプロセッサ型のワークステーションをもちいて数値実験をおこなった。テスト問題では、式 (1) において、 $C_i = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} \\ 0 & c_{22} \end{pmatrix}$ ,  $D_i = \begin{pmatrix} d_{11} & d_{12} \\ d_{21} & d_{22} \end{pmatrix}$ ,  $E_i = \begin{pmatrix} e_{11} & 0 \\ e_{21} & e_{22} \end{pmatrix}$  とおいた。また、方程式の求解はブロック LU 分解法とブロック bi-recurrence 法とを用いて、1) 1 個のプロセッサを使って、ブロック LU 分解法で解く、2) 1 個のプロセッサを使って、ブロック bi-recurrence 法で解く、3) 2 個のプロセッサを使って、ブロック bi-recurrence 法で解く、の三種類についておこなった。また、問題のサイズは  $N = 1000$  から  $N = 45000$  まで、刻み幅 2000 であり、balancer の値は  $\lfloor p/2 \rfloor$  とおいた。

数値実験の結果を図 1 に示す。図 1 において、横軸はブロック三重対角連立一次方程式のサイズをあらわし、縦軸は求解に要する時間をあらわす。また、図中、実線は 1 個のプロセッサを使ってブロック LU 分解法 (BLU) で解いた結果;[BLU(1PE)], 点線は 1 個のプロセッサを使ってブロック bi-recurrence 法で解いた結果;[BB(1PE)], 破線は 2 個のプロセッサを使ってブロック bi-recurrence 法で解いた結果

;[PBB(2PE)] をあらわす。

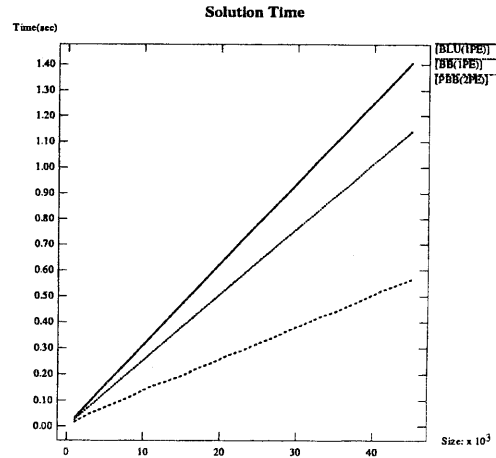


図 1: 求解時間の比較

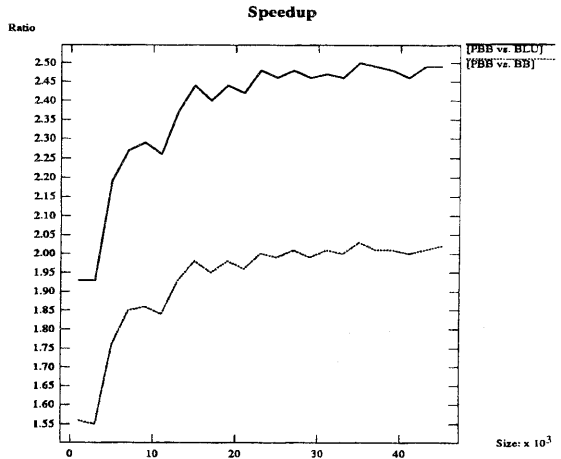


図 2: スピードアップ比

いっぽう、図 2 はスピードアップ比をあらわす。図 2 において、横軸は問題のサイズをあらわし、縦軸はスピードアップ比をあらわす。図中、実線は 2 個のプロセッサを使ってブロック bi-recurrence 法 (PBB) で解いた場合と、1 個のプロセッサを使ってブロック LU 分解法 (BLU) で解いた場合との比較である。また、点線はブロック bi-recurrence 法で 2 個のプ

プロセッサを使った場合と1個のプロセッサを使った場合との比較である。

図より、2個のプロセッサによる並列計算をおこなったブロック bi-recurrence 法 (PBB) がもっとも高速に解を求めることができ、1個のプロセッサを使ったブロック bi-recurrence 法 (BB) に対するスピードアップ比は、問題が大次元になるにつれて2に近づくことがわかる。また、1個のプロセッサを使った場合、ブロック bi-recurrence 法 (BB) はブロック LU 分解法 (BLU) より高速に解を求められることがわかる。

## 5 まとめ

本稿では、ブロック三重対角連立一次方程式の新しい直接解法である、ブロック bi-recurrence 法を提案し、その有効性を数値実験により確認した。

ブロック bi-recurrence 法はいろいろな構造の係数行列をもつ連立一次方程式の求解に適用でき、様々なレベルでの並列計算が可能である。どのレベルでの並列計算をおこなうかは問題の規模や計算の特性によって決まると考えられ、具体的な検討は今後の課題である。

ブロック bi-recurrence 法のもつもうひとつの利点は負荷の分散が可能なことである。すなわち、並列計算の際、balancer:  $m$  を適当な値に設定することにより、負荷の大きい計算機には少しの処理を割り当て、負荷の小さい計算機には多くの処理を割り当てることができる。実際の  $Ax = h$  の求解では、右辺の  $h$  を変えて何度も解く必要がある。そこで、計算機の負荷を監視し、将来の負荷を何らかの方法によって予測することで、動的な負荷の均等割り当てが可能になるものと思われる。このような、負荷分散可能性は同種のコンピュータで構成される計算機環境 (homogeneous computing environment) だけではなく、異種のコンピュータで構成される計算機環境 (heterogeneous computing environment) においても有効である。このようなブロック block bi-recurrence 法の様々な応用は、今後の課題である。

## 参考文献

- [1] 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)
- [2] Varah, J.M.: On the Solution of Block-Tridiagonal Systems Arising from Certain Finite-Difference-Equations. *Mathematics of Computations* **26** (1972) 859-868
- [3] Lakshmivarahan, S. and Dhall, S.K.: *Analysis and Design of Parallel Algorithms: Arithmetic and Matrix Problems*. McGraw-Hill (1990)
- [4] Naritomi, T. and Aso, H.: A Highly Parallel Systolic Tridiagonal Solver. *IEICE Trans. Inf & Syst.* vol.E-79-D no.9 (1996) 1241-1247