計算機アーキテクチャ 117－14
（1996. 3. 5）

VPP500におけるブロック三重対角行列の直接解法の並列化

住 吉 光 介† 戎 崎 俊 一†

大規模ブロック三重対角行列の直接解法をベクトル並列型スーパーコンピュータVPP500上で巡回縮約法を用いて高速に行う並列コードを開発した。この並列コードを実際に理化学研究所のVPP500/28において実行してその速度を測定し、高い実効速度を得るために最適な行列サイズについて調べた。VPP500の28PEを用いた場合に最大計算速度は約30Gflopsに達した。

Parallelization of the direct solution of block-tridiagonal matrix on VPP500

KOHSUKE SUMIYOSHI† and TOSHIKAZU EBISUZAKI†

We develop the parallel code on VPP500 to solve large block-tridiagonal matrix system adopting the cyclic reduction method as a parallel algorithm. We measure the speed of the parallel code on VPP500/28 at RIKEN in order to explore the ability to solve large system. We examine the optimum condition of the size of matrix to get a high efficiency and find that our code solves problems with a high speed up to 30Gflops and a high parallel efficiency by taking advantage of both vectorization and parallelization.

1. はじめに

数値シミュレーションを行ううえで線型方程式を解く必要が生ずる場合は多く、行列の性質を活かした様々な手法を用いて高速化をはかる事になる。ある種の微分方程式系の離散化を行った場合に行列がブロック三重対角型になっている場合がある。楕円型偏微分方程式の差分近似から導かれる方程式系がその一例であるが[2]、天体物理学分野における輻射輸送方程式を解く際にもブロック三重対角行列がしばしばあらわれる[4]。現実的な輻射輸送問題においてはブロック行列が密でサイズも大きくブロック行列のならびも大きい場合が多く、大規模な計算能力を要するため既存のスーパーコンピュータを使った場合でも問題の規模が限られてしまう場合が多かった。

最近になってベクトル並列型スーパーコンピュータが国内においても利用可能な状況になり、より大きな規模の問題を高速に解くことが可能になってきた。こうしたベクトル並列型計算機を用いるうえでは、そのアーキテクチャーに向いたアルゴリズムを採用し、ベクトル・並列化両方の利点を活かしてピーク性能を最大限引き出しうるコードを開発し、実装する事が重要になっている。理化学研究所では富士通のVPP500/28が稼働しており、我々はこのVPP500上でベクトル・並列化により大規模ブロック三重対角行列を高速に解くコードを開発し、線型方程式直接解法の高速化を試みた。

天体物理学における輻射輸送問題においてはブロック三重対角行列を解くアルゴリズムとしてFeautrier法[4]といわれる数値計算法がよく知られているが、この方法は全体を逐次的に解いていく手法であるので並列化がそのままでは容易でない。我々は並列化のアルゴリズムとして巡回縮約法[2]を採用した。この方法は通常の三重対角行列の直接解法のベクトル化手法として用いられている方法を拡張したもので、Andersonらが Cray-2においてその実効性能を確かめている例がある[3]。Cray-2の様な共有メモリ型ベクトル並列計算機と異なるVPP500の様な分散メモリ型ベクトル並列計算機に対して、この方法を実装して素性能を測定するのは我々の知るかぎりまだ例がない。我々はVPP500/28上で巡回縮約法による並列コードを開発しその素性能を測定して、行列サイズやプロセッサー数に対する依存性を調べる事により、扱う事ができる最大の問題規模や高性能を発揮するために最適な行列サイズの条件について調べた。

2. 輻射輸送問題

ここではブロック三重対角行列が現れる例として輻射輸送問題について簡単に紹介する。開発した並列コードはこの場合だけでなく一般の問題に使えるようになって

† 理化学研究所計算科学研究室
Computational Science Laboratory, The Institute of Physical and Chemical Research

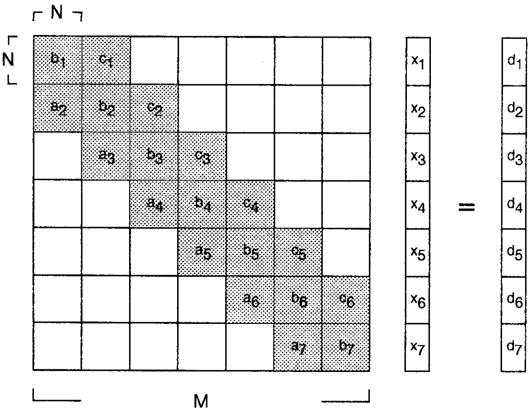

図1　ブロック三重対角行列

Fig. 1　block-tridiagonal matrix

PE1	$b_1x_1 + c_1x_2 = d_1$	(1)
	$a_2x_1 + b_2x_2 + c_2x_3 = d_2$	(2)
PE2	$a_3x_2 + b_3x_3 + c_3x_4 = d_3$	(3)
	$a_4x_3 + b_4x_4 + c_4x_5 = d_4$	(4)
PE3	$a_5x_4 + b_5x_5 + c_5x_6 = d_5$	(5)
	$a_6x_5 + b_6x_6 + c_6x_7 = d_6$	(6)
PE4	$a_7x_6 + b_7x_7 = d_7$	(7)

図2　4プロセッサー上の線形方程式系

Fig. 2　A set of linear equations on four processors

いる。

天体物理学において重要な基礎方程式の一つとして輻射輸送方程式がある[1]。星の表面など光（輻射）と物質の衝突が必ずしも頻繁でなく局所的にも平衡状態に達していない様な場合には輻射の輸送問題を解く事が必要になる。特に天体観測においては星の表面からの光を測定するので線スペクトルの形成等を明らかにする上で輻射輸送問題を解くことが重要である。また超新星爆発機構の解明にはニュートリノ粒子による同様の輸送問題を厳密に解く事が必要であるといわれている。一般の形の輻射輸送方程式は（但し簡単の為、一次元の平面形状を考える）次の様な形をしている。

$$[\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t} + \mu\frac{\partial}{\partial z}]I = \eta - \chi I \qquad (1)$$

I は輻射の強さ、η と χI はそれぞれ輻射の放出、吸収を表す項である。これらは一般に空間座標 z、時間 t、光の進む方向の角度 $\mu = cos\,\theta$、光の振動数（エネルギー）ν の関数である。η と χ は物質の温度や光と物質の相互作用により決まる量で、一般に輻射の強さ I の時間発展を z, μ, ν について解く問題になっている。実際には計算が大変なので時間発展を落として静的な問題にしたり、振動数依存性を落として簡単化を行って取り扱っている場合が多い。（そうした場合でもブロック三重対角行列の問題に帰着する場合が多い。）

ここでは時間発展も含めて数値的に（陰解法で）解く事を考えると、まず求めるべき輻射の強さ I の z による微分は差分により I の z に関する添え字に関して三重対角の構造として表される。次に光の放出量 η は光の散乱にも依存するため一般的には輻射の強さ I の μ, ν に関する積分量を含んでいるため、その部分は座標 z の各点で I の μ, ν に関して離散化した添え字により密行列とベクトルの積の形で表される。これらを合わせて結局輻射輸送方程式は離散化した形として**図1**の様なブロック三重対角行列の線型方程式を解くことに帰着する。

ここで空間座標に対してメッシュ M、光の進む角度 μ と振動数 ν に対して合わせてメッシュ N を与えると $N \times N$ の密行列が M 個三重対角に並んでいるブロック三重対角行列を扱うことになり、必要なメモリサイズは $O(N^2M)$、計算量は $O(N^3M)$ でそれぞれ増加することになる。このため実際には計算機の能力によってメッシュサイズが制限されて本来理論計算に必要なだけの十分なメッシュが取れない場合が多かった。我々が共同研究を行っている方々の問題例ではこれまで静的な問題で $N = 200, M = 40$ 程度で、時間発展を追うため多数回 iteration を行う問題で $N = 53, M = 84$ 程度が使われていたが、数値的研究をさらに進めるためにはメッシュサイズはまだ不十分という状況であった。

3. 巡回縮約法

こうした輻射輸送問題の分野では Feautrier 法[4] と呼ばれる方法が標準的に用いられてきていた。この方法は効率もよく安定な方法ではあるが三重対角部を逐次的に解いていくためそのままでは並列化を行うことが難しい。ここで採用する巡回縮約法は三重対角行列を解く手法を拡張したもので、密であるブロック行列を解く部分はベクトル化向きの解法アルゴリズムを採用し、ブロックが三重対角に並んでいる部分は巡回縮約法により並列化するというものである[3]。

図2は $M = 7$ の場合の方程式系の例で a_i, b_i, c_i は $N \times N$ の行列で x_i, d_i は長さ N のベクトルである。巡回縮約法では各ステップで方程式系の組を半分ずつ減らしていき全体を解きあげる。例えば上の例では7組の方程式系のうちまず奇数番号の方程式系を奇数番号の x_i について解き、それらを偶数番号の方程式系に代入して奇数番号の x_i を消去すると、再び元のブロック三重対角型をした3組の方程式系が残される。この手順を繰り返し、最後に1組の方程式が残されるまで行う。残された最後の方程式を解きそれに対する x_i（図2の場合では x_4）を求めたら、これまでの消去計算中に得られている x_i を求める式を使って後退代入計算を行いすべての x_i を求める。

この方法の手順の中で最も計算に時間がかかるのは消去計算の部分であるが、各ステップ内の式変形によ

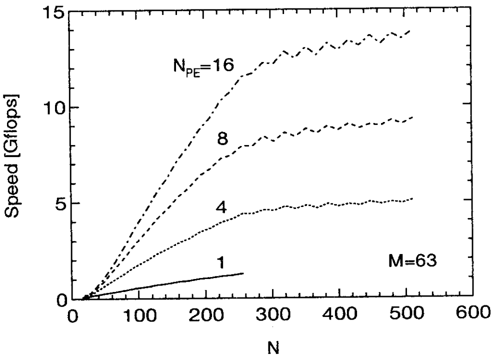

図3 並列コードの計算速度の N 依存性
Fig. 3 The speed of the parallel code as a function of N.

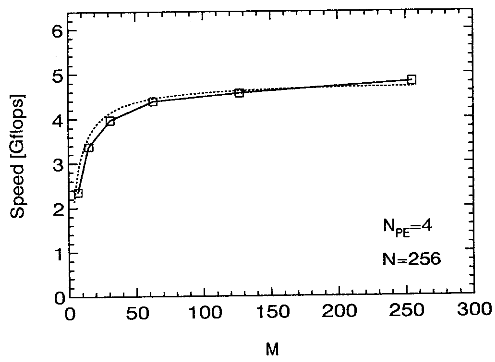

図4 並列コードの計算速度の M 依存性
Fig. 4 The speed of the parallel code as a function of M.

る消去計算は各々のプロセッサーで独立に行う事ができる。後退代入も同様に各ステップで独立に行う事ができるので、これらの部分を並列化する。図2は4プロセッサー上に方程式系（行列・ベクトル）を割り振った例である。各ステップ内の各プロセッサーで行う計算は $N \times N$ の密行列に対するもので例えばLU分解やそれを用いた逆行列と行列の積などが代表的である。これらはベクトル化向きのアルゴリズムを採用してコーディングすれば効率よく行うことができる。図2では $N_{PE} = 4, M = 7$ の場合を考えたが後述の通り実際には N_{PE} に対して M が十分大きい場合を考え、式の数が非常に多い段階から上述の手順を用いて方程式系を半分ずつ減らして解いていくことになる。全体の手順の中でデータ転送が必要になる部分があるが、転送データ量が $O(N^2)$ で増えるのに対して、演算量は $O(N^3)$ で増えるので十分大きな N の場合には問題にならず、実際に測定した例でも転送にかかる時間は演算にかかる時間に比べて非常に短くなっていた。

4. 結　　果

我々は巡回縮約法を採用した並列コードをVPP500上で開発した。使用したプログラミング言語は富士通のVPP-FORTRAN77である。輻射輸送等の実際の問題への適用前の性能評価のため、理化学研究所VPP500/28上での実行に要する時間を測定して実行速度を求めた。ちなみにVPP500/28のピーク性能は単体（$N_{PE} = 1$）で1.6Gflops、最大（$N_{PE} = 28$）で44.8Gflopsである。その際ブロック三重対角行列のブロック行列のサイズ N、ブロック行列の数（連立方程式の数）M、プロセッサー数 N_{PE} の依存性について調べることによりコードの実行効率についても考察を行った。

図3はブロック三重対角行列のサイズの内 $M = 63$ を固定し N を変えた場合に線型方程式解法に要する（後退代入計算も含んでいる）時間から求めた計算スピードである。N_{PE} を $1, 4, 8, 16$ と変えた場合を示してある。$N_{PE} = 1$ の場合、$N = 256$ に対してその速度は1.2Gflopsに達する。理化学研究所のVPP500/28では1プロセッサー上の利用可能メモリサイズが200MBであるため、$N_{PE} = 1, M = 63$ では $N = 256$ が最大規模である。自明な事ではあるが N が大きいほどベクトル化のメリットが大きい事が現れている。次に並列化についてであるが N_{PE} を増やしていった時にそのスピードはほぼ比例して延びており、並列化がうまく働いている事が読み取れる。$M = 63$ の場合ではこれ以上 N_{PE} を増やしてもスピードはほぼ頭打ちであった。これは N_{PE} が M に近づくと計算の後半で遊んでいるプロセッサーが多くなり並列効率が悪くなるためである。

高い並列効率を達成するためには $M \gg N_{PE}$ となるように M を選んでやればよい。**図4**は $N_{PE} = 4$ の場合に $N = 256$ を固定し M を変えた場合である。破線は理論曲線で、$N_{PE} = 1$ で $N = 256$ の場合のスピードをもとにアルゴリズムから計算される並列効率を掛け合わせて評価したものである。M が小さい場合には4プロセッサーを用いたとしても計算スピードは遅く1プロセッサーを用いた場合の2倍程度にしかなっていない。それに対して M が十分大きい場合には並列効率が高く十分に速い計算スピードに達している。

総合するとベクトル化による性能を得るためには N をなるべく大きく、並列化による性能を得るためには N_{PE} に対して M をなるべく大きくすることが実行効率を高くするための条件である。一方でこの条件はプロセッサー上で利用可能なメモリサイズにより決まる N, M の上限との兼ね合いとなる。理化学研究所のVPP500/28の場合、最大で200MBが28nodeで合計5.6GBが利用可能である。この場合実際に扱える最大規模で最大性能をだしうる行列サイズは例えば $N_{PE} = 28$ に対して $N = 512, M = 511$ で、我々のコードはこの問題を約30Gflopsの速度で経過時間約30秒で解くことができる。時間発展を追う問題で多数回iterationを行う場合には一回の解法にかかる時間

として1秒程度が目安となる。この時間で解ける問題として最適な規模としては例えば$N_{PE} = 16$に対して$N = 200, M = 127$で約12Gflopsの速度であった。輻射輸送問題ではN, M共に大きい場合が多いのでベクトル・並列化に向き、これまでよりも規模の大きい問題をVPP500の性能を十分に活かして計算ができると考えられる。

5. まとめ

巡回縮約法を用いて大規模ブロック三重対角行列を高速に解く並列コードをVPP500上で開発し、理化学研究所VPP500/28上で実際に実行してその素性能について調べた。その結果、最大規模の場合において30Gflopsに達する計算速度で問題を解くことができることがわかった。また高いベクトル、並列効率を得るために必要と思われる最適な条件について調べた。我々のコードは本来の目的としている輻射輸送問題を扱うのに適しており、これまでより大幅に規模の大きな問題を扱える事がわかった。現在実際の天体物理の輻射輸送問題への適用の準備中である。

謝辞 本稿における計算はすべて理化学研究所のVPP500/28を用いて行われた。並列コード開発・チューニングにあたって様々な協力をいただいた村瀬丈夫氏をはじめとする富士通の技術者の方々と、計算機利用の際の便宜を図ってくださった理化学研究所電子計算機室の方々にこの場をかりてお礼を申し上げます。また実際の問題への適用に関して議論していただいたり助言をいただいた長野高専の西村治助手と高エネルギー物理学研究所の鈴木英之助手に感謝いたします。

参考文献

1) 佐藤文隆, 原哲也: 宇宙物理学, 朝倉書店 (1983).
2) 島崎眞昭: スーパーコンピュータとプログラミング, 共立出版 (1989).
3) Anderson, D. V., Fry, A. R., Gruber, R. and Roy, A.: Computers in Physics, Vol. 3, No. 2, pp. 33-41 (1989).
4) Mihalas, D. and Mihalas, B. W.: *Foundations of Radiation Hydrodynamics*, Oxford University Press, Oxford (1984).