

## 大規模な微分方程式に対する Waveform Relaxation 法の 並列計算機への実装

山田 進† 小澤 一文† 吉原 郁夫† 阿部 健一†

†東北大学大学院工学研究科 †東北大学大学院情報科学研究科

Waveform relaxation 法は大規模な微分方程式系を並列計算するのに適した反復解法である。この反復解法は方程式が stiff な場合や積分区間が大きい場合には多くの反復が必要であることが知られており、収束性を改善する工夫が提案されている。本研究では 2 階線形微分方程式  $y'' = Qy + g$  に対して、収束性を改善する方法について考察する。さらに、実際にその改善法を並列計算機に実装し数値計算の結果から、その解法の性能を評価する。

### Implementation of Waveform Relaxation Methods on Parallel Computer for Solving Large Systems of Differential Equations

Susumu Yamada† Kazufumi Ozawa† Ikuo Yoshihara† Ken-ichi Abe†

†Graduate School of Engineering, Tohoku University

†Graduate School of Information Sciences, Tohoku University

Waveform relaxation methods are one of the most suitable methods for solving large systems of ordinary differential equations. But, if an interval of the integration is long or the equation is stiff, the methods need many iterations. Therefore a large number of strategies which improve the convergence property have been proposed. In this paper, we propose the strategies for second order linear differential equations and discuss the parallelism and the convergence of the proposed strategies. Moreover, we examine the parallel efficiency of the proposed methods by the experiments on a parallel computer.

## 1 はじめに

Waveform relaxation (WR) 法は大規模な微分方程式の初期値問題

$$y' = f(t, y(t)), \quad y(t_0) = y_0, \quad t \in [t_0, t_1] \quad (1)$$

を並列計算機で数値的に計算するのに適している解法の 1 つである。WR 法の中でよく知られている解法に Picard 反復がある。この解法は方程式 (1) に対して

$$y^{[\nu+1]}(t) = y_0 + \int_{t_0}^t f(\xi, y^{[\nu]}(\xi)) d\xi, \quad \nu = 0, 1, 2, \dots \quad (2)$$

という反復を行なう方法であり、有限の積分区間に対しては超 1 次収束することが知られている [1]。

しかし、方程式が stiff である場合や積分区間が大きい場合には多くの反復が必要であり実用的な解法とは言えない。そこで、式 (1) が線形方程式  $y' = Qy + g$  のときには、係数行列  $Q$  を  $Q = N - M$  ( $M$  はブロック行列かつ安定) と分割して得られる splitting 法

$$y^{[\nu+1]'}(t) + My^{[\nu+1]}(t) = Ny^{[\nu]}(t) + g(t) \quad (3)$$

が提案されている [1]。この解法は Picard 反復に比べ収束性は優れているが、元の連立方程式系をいくつかの小さい連立系に分割しそれらを独立 (並列) に計算するため並列性は劣っている。そのため、ある程度の並列性を保ったまま収束性を向上させる解法として、分割した成分のいくつかを重複させて計算する overlapping 法が提案されてお

り、並列性や収束性についての議論がされている [2]。

上述の解法は 2 階線形微分方程式

$$y''(t) = Qy(t) + g(t), \quad y(t_0) = y_0, \quad y'(t_0) = y'_0 \quad (4)$$

に対しても同様に定義され収束性や並列性についての議論がされており、splitting 法は超 1 次収束することが示されている [6],[7],[8]。

そこで、本研究では 2 階線形方程式 (4) に対する splitting 法と overlapping 法の収束性を比較する。さらにこれらを実際に並列計算機に実装し、計算時間の比較を行なう。

## 2 Waveform Relaxation 法の並列性

ここでは、WR 法が実際に並列計算に適しているかを確かめるため、実際に並列計算を行ない、一般の反復法と比較する。ここで扱う方程式は戸田格子の振舞いを表す方程式

$$\begin{aligned} v_i'' &= \exp(v_{i-1}(x)) \\ &\quad - 2 \exp(v_i(x)) + \exp(v_{i+1}(x)) \\ i &= 0, \pm 1, \pm 2, \dots \end{aligned} \quad (5)$$

である。この方程式系は

$$\begin{aligned} v_i(x) &= \log(1 + \sinh^2 \tau \operatorname{sech}^2(i\tau - w(x + q))), \\ w &= \sinh \tau \end{aligned}$$

というソリトン解を持つ [5]。ここで、 $q$  は解の初期位相を表す任意定数である。この方程式系を 1 階の方程式系に変換し、1200 次元で近似した方程式

$$\begin{cases} y'_{2i-1} = \exp(y_{2i-2}) - 2 \exp(y_{2i}) + \exp(y_{2i+2}) & i = 2, 3, \dots, 599 \\ y'_{2i} = y_{2i-1}, & i = 1, 2, \dots, 600 \\ y'_1 = 1 - 2 \exp(y_2) + \exp(y_4), \\ y'_{1199} = \exp(y_{1198}) - 2 \exp(y_{1200}) + 1 \end{cases}$$

初期条件  $y_{2i-1}(0) = v'_i(0)$ ,  $y_{2i}(0) = v_i(0)$  を  $q = 200$ ,  $\tau = 0.1$ ,  $w = \sinh 0.1$  の条件のもとで、3 段階 4 次の Adams-Moulton 法

$$y_{n+3} = y_{n+2} + \frac{h}{24}(9f_{i+3} + 19f_{i+2} - 5f_{i+1} + f_i)$$

を用い、次の 2 つの反復法

- 従来の反復法...  $y_{n+3}^{[0]} = y_{n+2}$  とおき、成分を適当に分割してそれぞれを並列に計算 (一般の子測子・修正子法)
- WR 法... 方程式系を 12 分割し積分区間全体で並列反復

で計算する。また積分区間は  $[0, 1]$  とし、きざみ幅  $h$  は  $10^{-3}$  とし、反復停止条件を  $\max \|y^{[\nu]} - y^{[\nu-1]}\| < 10^{-7}$  とし並列計算機 Exemplar を用いて計算する。ここで用いる並列計算機 Exemplar ではループ並列化、タスク並列化、領域並列化の 3 通りの並列化 [4] を用いることができるが、本論文の数値実験では全てループ並列化を用いることとする。この時の結果を Table 1 に示す。

Table 1. 従来法と WR 法の並列計算の比較

プロセッサ数	1	2	4	12
従来法 (sec)	1.176	1.560	1.591	2.206
WR 法 (sec)	7.695	4.035	2.125	0.976

この結果から WR 法は逐次計算では従来法より遅いが、12 台のプロセッサを用いる並列計算では従来法より速くなっている。これは WR 法は反復回数は多いが並列計算時に必要となる同期の回数や通信の量が従来法と比べはるかに少ないためと思われる。このことから、WR 法は並列計算機で計算するのに適した解法であることがわかる。

## 3 Waveform Relaxation 法の収束性

### 3.1 Splitting 法

まず 2 階線形微分方程式の初期値問題 (4) について、Picard 反復

$$\begin{aligned} y^{[\nu+1]''}(t) &= Qy^{[\nu]}(t) + g(t), \\ y^{[\nu]}(t_0) &= y_0, \quad y^{[\nu]'}(t_0) = y'_0 \end{aligned} \quad (6)$$

での収束性について説明する。この反復は  $\varepsilon^{[\nu]}(t) = y^{[\nu]}(t) - y(t)$ ,  $\varepsilon_1 = \|Q\|$  とおき、 $\|\varepsilon^{[0]}(t)\| \leq K(t - t_0)$  を仮定すると

$$\|\varepsilon^{[\nu]}(t)\| \leq K \frac{c_1^\nu (t - t_0)^{2\nu+1}}{(2\nu + 1)!} \quad (7)$$

を満たす (詳しい計算過程は [7] を参照)。ここで  
 のノルム  $\|\cdot\|$  はユークリッドノルムとする。この  
 ことから  $y^{[\nu]}(t)$  が  $y(t)$  に超 1 次収束することがわ  
 かる。

また, splitting 法

$$\frac{d^2}{dt^2} y^{[\nu+1]}(t) + M y^{[\nu+1]}(t) = N y^{[\nu]}(t) + g(t) \quad (8)$$

に関しても, 上と同様に  $\varepsilon^{[\nu]}(t) = y^{[\nu]}(t) - y(t)$ ,  $c_2 = \|N\|$  とおき,  $\|\varepsilon^{[0]}(t)\| \leq K(t - t_0)$  を仮定すると

$$\|\varepsilon^{[\nu]}(t)\| \leq K \frac{c_2^\nu (t - t_0)^{2\nu+1}}{(2\nu + 1)!} \quad (9)$$

と評価でき, splitting 法も超 1 次収束することが  
 わかる [7]。

このことから,  $\|N\|$  を小さくなるように分割す  
 れば収束は速くなることが予想される。

### 3.2 Overlapping 法

ここでは, 簡単のため方程式の次元を  $2n$ 、重  
 複する成分数を  $\mu$  とし, 2 つに分割する場合を考  
 える。つまり, 成分の集合を  $S = \{1, 2, \dots, 2n\}$   
 とし, これを  $S_1 = \{1, \dots, n + \mu\}$  および  $S_2 =$   
 $\{n + 1 - \mu, \dots, 2n\}$  の 2 つに分割した場合の収束  
 性を考える。ここで  $2n$  次対角行列  $P_l, I_l$  を

$$P_l(i, i) = 0, \quad i \notin S_l, \quad P_l(i, i) = 1, \quad i \in S_l$$

$$I_l(i, i) = 0, \quad i \notin T_l, \quad I_l(i, i) = 1, \quad i \in T_l$$

と定義する。ただし  $T_1 = \{1, \dots, n\}$ ,  $T_2 = \{n + 1, \dots, 2n\}$  とする。このとき  $M_l, N_l$  を  $P_l Q = N_l - M_l$  ( $l = 1, 2$ ) を満足する行列とし,  $y_1^{[\nu+1]}, y_2^{[\nu+1]}$  をそれぞれ  $S_1, S_2$  に対する  $\nu + 1$  回目の反復の値とすると, overlapping 法は

$$\frac{d^2}{dt^2} y_l^{[\nu+1]}(t) + M_l y_l^{[\nu+1]}(t) = N_l y^{[\nu]}(t) + g(t) \quad (10)$$

$l = 1, 2$

$$y^{[\nu+1]} = I_1 y_1^{[\nu+1]} + I_2 y_2^{[\nu+1]}$$

と表せる。

このとき,  $S_1, S_2$  に対応する  $y^{[\nu+1]}$  の成分をそれぞれ  $v^{[\nu+1]}, w^{[\nu+1]}$ 、また  $g$  の成分を  $g_1, g_2$  と表し,  $2n + 2\mu$  次ベクトル  $z(t), v(t)$  をそれぞれ

$$z(t) = \begin{pmatrix} v(t) \\ w(t) \end{pmatrix} \in \mathbf{R}^{2n+2\mu}$$

$$\tilde{g}(t) = \begin{pmatrix} g_1(t) \\ g_2(t) \end{pmatrix} \in \mathbf{R}^{2n+2\mu}$$

とおき,  $\tilde{M}, \tilde{N}$  を適当に決めると (詳しい決め方は [9] を参照), 式 (4) および式 (10) はそれぞれ

$$\frac{d^2}{dt^2} z(t) + \tilde{M} z(t) = \tilde{N} z(t) + \tilde{g}(t)$$

$$\frac{d^2}{dt^2} z^{[\nu+1]}(t) + \tilde{M} z^{[\nu+1]}(t) = \tilde{N} z^{[\nu]}(t) + \tilde{g}(t)$$

と表せる。この 2 つの式を Laplace 変換し, ま  
 とめると

$$\hat{z}^{[\nu+1]}(s) - \hat{z}(s) = K(\hat{z}^{[\nu]}(s) - \hat{z}(s)) \quad (11)$$

を得る。ただし  $K$  は  $K = (s^2 I + \tilde{M})^{-1} \tilde{N}$ ,  $I$  は  $(2n + 2\mu) \times (2n + 2\mu)$  単位行列である。この結果から  $\rho(K)$  の値が小さくなればなるほど overlapping 法の収束性がよくなることが予想できる。

## 4 並列計算機への実装

### 4.1 1 次元の波動方程式

#### 4.1.1 Splitting 法

ここでは波動方程式の初期値・境界値問題

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (0 \leq x \leq 1) \quad (12)$$

$$u(x, 0) = \sin \pi x, \quad u(0, t) = u(1, t) = 0$$

$$\frac{d}{dt} u(x, 0) = 0$$

を空間方向に 512 分割し, 空間方向の微分を 3 点  
 差分で近似した

$$y''(t) = Q y(t), \quad y(t) = (u_1, \dots, u_{512})^T \quad (13)$$

について, 反復回数と収束の関係を調べる。こ  
 こで  $x_i = i/513$ ,  $u_i = u(x_i, t)$  であり, 行列  $Q$  は

$$Q = \frac{1}{(\Delta x)^2} \begin{pmatrix} -2 & 1 & & & \\ 1 & -2 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & 1 & -2 & 1 \\ & & & 1 & -2 \end{pmatrix} \in \mathbf{R}^{512 \times 512}$$

である。ただし,  $\Delta x = 1/513$  である。

次に, 行列  $Q (= N - M)$  の分割について  
 考える。一般には  $M, N$  の決め方は任意である



対して分割するブロックで $\mu$ 個重複する場合を考える。この時の結果を Table 3 に示す。

この結果から重複度を増やせば収束に必要な反復数は減るが、各ブロックの計算量が増えるため、増やし過ぎるとかえって遅くなることがわかる。

Table 3(a). Overlapping 法の計算結果 ( $d = 64$ )

$\mu$	iter	CPU-time(sec)		$S_p$	$P$	$E$
		serial	parallel			
0	14	161.994	21.902	7.396	8	0.925
1	6	78.298	11.883	6.589	8	0.824
2	5	74.842	10.923	6.852	8	0.856
3	4	64.225	9.952	6.453	8	0.807
4	4	69.790	10.597	6.586	8	0.823
5	4	76.571	11.890	6.440	8	0.805
10	3	80.582	12.213	6.598	8	0.825
20	3	124.914	19.045	6.559	8	0.820
30	3	174.056	26.401	6.593	8	0.824

Table 3(b). Overlapping 法の計算結果 ( $d = 256$ )

$\mu$	iter	CPU-time(sec)		$S_p$	$P$	$E$
		serial	parallel			
0	14	1135.326	576.299	1.970	2	0.985
1	6	506.951	255.469	1.984	2	0.992
2	5	430.146	217.065	1.982	2	0.991
3	4	332.200	169.689	1.958	2	0.979
4	4	334.649	175.746	1.904	2	0.952
5	4	347.049	176.003	1.972	2	0.986
10	3	262.207	135.078	1.941	2	0.971
50	3	331.916	173.223	1.916	2	0.958
100	3	435.606	224.413	1.941	2	0.971

$d$ ...dimension of subsystems of iterations  $\mu$ ...the number of overlapped elements

iter...the number of iterations

$S_p = \text{CPU-time(serial)}/\text{CPU-time(parallel)}$

$P$ ...the number of processors

$E = S_p/P$

## 4.2 2次元の波動方程式

ここでは2次元の波動方程式

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \quad (0 \leq x \leq 1, 0 \leq y \leq 1) \quad (14)$$

$$u(x, y, 0) = \sin \pi x + \sin \pi y, \quad \frac{\partial u}{\partial t}(x, y, 0) = 0$$

$$u(0, y, t) = u(1, y, t) = u(x, 0, t) = u(x, 1, t) = 0$$

を  $x, y$  空間方向に16分割し、それぞれの微分を3点差分で近似して得られる連立微分方程式

$$z''(t) = Qz(t) \quad (15)$$

を次の2つの方法で分割する。

### • 分割法 1

16 × 16 の空間を1 × 16 の空間に16分割する (Fig. 1(a) 参照)。つまり、ベクトル  $z(t)$  を

$$z(t) = (z_1, z_2, \dots, z_{16})^T, \quad z_i = (u_{i1}, u_{i2}, \dots, u_{i16})^T$$

とおき、 $z_1, z_2, \dots, z_{16}$  をそれぞれ独立 (並列) に計算する。ただし、 $u_{ij}$  は  $u(\frac{i}{17}, \frac{j}{17})$  の近似解である。また、成分の重複に関しては重複度を  $\mu$  とすると、

$$z_1 = (u_{11}, \dots, u_{1n}, u_{21}, \dots, u_{1\mu})^T$$

$$z_k = (u_{k-1 \ n-\mu+1}, \dots, u_{k-1 \ n}, u_{k1}, \dots, u_{kn},$$

$$u_{k+1 \ 1}, \dots, u_{k+1 \ \mu})^T, \quad k = 2, \dots, 15$$

$$z_{16} = (u_{15 \ n-\mu+1}, \dots, u_{15 \ n}, u_{16 \ 1}, \dots, u_{16n})^T$$

となる。

### • 分割法 2

16 × 16 の空間を4 × 4 の空間に16分割する (Fig. 1(b) 参照)。つまり、ベクトル  $z(t)$  を

$$z(t) = (z_{11}, z_{12}, \dots, z_{44})^T$$

とおき  $z_{11}, z_{12}, \dots, z_{44}$  をそれぞれ独立 (並列) に計算する。ただし、 $z_{ij}$  は近似解  $u_{kl}$  ( $4i-3 \leq k \leq 4i, 4j-3 \leq l \leq 4j$ ) を適当に並べた16次ベクトルである。

重複に関しては重複度  $\mu$  のとき、 $z_{ij}$  は  $u_{kl}$  ( $4i-3-\mu \leq l \leq 4i+\mu, 4j-3-\mu \leq l \leq 4j+\mu$ ) を適当に並べたベクトルとする。ただし、 $k$  または  $l$  が 0 以下または 16 より大きい場合にはその成分は除くことにする。

以上の2つの分割法を用いて方程式 (15) を分割し積分区間  $[0, 1]$ 、きざみ幅  $h = 10^{-3}$ 、反復停止条件  $\max \|y^{[v]} - y^{[v-1]}\| < 10^{-7}$  で計算する。また用いる解法は前述の RKN 法である。このときの反復回数を Table 4 に示す。

Table 4 (a). 収束に必要な反復回数 (分割法 1)

重複度 ( $\mu$ )	0-6	7	8	9-11	12-14	15
反復回数	38	37	31	29	28	27

Table 4 (b). 収束に必要な反復回数 (分割法 2)

重複度 ( $\mu$ )	0	1	2	3
反復回数	34	14	11	10

この結果から、空間的位置を考慮しない解法（分割法1）より、考慮した解法（分割法2）の収束性が優れていることがわかる。

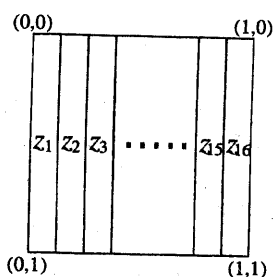


Figure 1(a). 2次空間の分割法（分割法1）

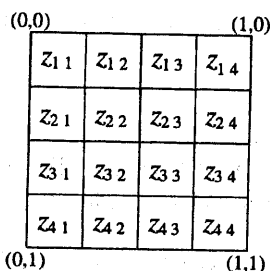


Figure 1(b). 2次空間の分割法（分割法2）

## 5 おわりに

本研究では、並列計算機向きの解法であるWR法を2階の線形方程式  $y'' = Qy + g$  を中心に収束性、並列性および並列計算機への実装方法について考察した。並列性に関しては、WR法は一般の反復法と比べて並列計算に適していることを数値実験から示した。また、収束性に関しては、これを改善する解法であるsplitting法、overlapping法について議論した。最後に、波動方程式を空間方向に離散化して得られる方程式に対する並列計算機への実装の方法を説明し、実際に並列計算を行なった。

今後はさらに大規模で現実的な問題をさらに多くのプロセッサを用いて計算する予定である。

## 参考文献

[1] K. Burrage: Parallel and Sequential Methods for Ordinary Differential Equations, Oxford University Press, New York, 1995.

- [2] K. Burrage, Z. Jackiewicz, S.P. Nørsett and A. Renaut: Preconditioning Waveform Relaxation Iterations for Differential Systems, BIT 36(1996), 54-76.
- [3] P. J. van der Houwen, B. P. Sommeijer and Nguyen Huu Cong: Stability of collocation-based Runge-Kutta-Nyström methods, BIT 31(1991), 469-481.
- [4] 西浦秀之, 小澤一文: Exemplar X クラスの使い方, 東北大学大型計算機センター広報 SENAC, 31(1998), 19-38.
- [5] 渡辺慎介: ソリトン物理入門, 培風館, 1985.
- [6] S. Yamada and K. Ozawa: Convergence of splitting waveform relaxation (WR) iteration for  $y'' = Qy + g$ , SciCADE97, at Grado Italy, 1997, 99-100.
- [7] 山田 進, 小澤 一文: 2階の微分方程式  $y'' = f(t, y)$  に対する Waveform Relaxation の並列計算機への実装, 情報処理学会研究報告, 97-HPC-69, 1997, 37-42.
- [8] S. Yamada: Parallelism and stepsize control of parallel numerical methods for solving initial value problems, 博士論文(東北大学), 1998.
- [9] 山田 進, 小澤 一文: 2階線形微分方程式に対する Overlapping Waveform Relaxation の収束性, 第27回数値解析シンポジウム講演予稿集, 1998, 93-96.