数　値　解　析　37−13
（１９９1.　7.　１７）

多点近似式における最少色分け問題のベクトル・並列化について

藤野 清次（計算流体力学研究所）
竹内 敏己（花王文理科学研究所）

概要

多点近似式における最小色分け問題のベクトル・並列化について考える。ここでは、ブロック型色分け、連続形色分けの２つの方法を取り上げる。ブロック型色分けに対しては並列計算の効率について考えた。連続形色分けについては、理論的な考察を主に考察した。すなわち、連続形色分けのとき、多点近似式をベクトル・並列化するために満足すべき必要十分条件を一般原理の形で導いた。そして、それを曲線座標系３次元１９点近似式に適用した。その結果、７色の連続型色分けをすればベクトル・並列化ができることがわかった。それ以外の多点近似式にもその原理を適用した。これらはベクトル長がオーダー $O(N/c)$,（Nは未知数の総数,cは色の数）になり、ベクトル・並列計算機向きアルゴリズムである。

VECTORIZATION/PARALLELIZATION OF THE LEAST COLORING PROBLEM FOR P.D.E. DISCRETIZED WITH MULTI-POINTS DIFFERENCE SCHEME

SEIJI FUJINO*, TOSHIKI TAKEUCHI**

*Institute of Computational Fluid Dynamics
1-22-3, Haramachi, Meguro-ku, Tokyo 152, Japan

**Institute of Mathematical Science of KAO Corporation
2-1-3, Bunka, Sumida-ku, Tokyo 131, Japan

ABSTRACT

In this contribution we consider about the least coloring problem for partial differential equations discretized with multi-points difference scheme. For solving this problem, We introduce a theorem which represents necessary and sufficient conditions for vectorization and parallelization. Owing to this theorem, we could show the minimum number of colors for various types of difference scheme. Moreover we verified on efficiency it on vector/parallel computers.

1　はじめに

ベクトル計算のみならず並列計算において、マルチ・カラー（多色塗り）技法は計算効率を向上させるための有効な方法の1つとしてよく知られている。この技法は、その原理がシンプルであることから、陽的な反復解法（たとえばSOR法など）では計算効率の向上が著しい。その代表的な解法にRed/Black法がある。これは、すべての格子点を赤・黒2色に色分けして計算をおこなう方法である。

しかしながら、Red/Balck法が適用できる範囲は限定される。たとえば、2次精度の中心差分で離散化したときに現れる直交座標系5,7点差分式に対してこの方法は有効である。しかし、現実には、より高い精度が要求されたり、複雑な形状の解析をするために座標変換が使われたりすることも多い。また、計算を安定化するために高次精度の風上差分が導入されたりする。このようなときRed/Black法は使用できない。何故なら、離散近似式の点数が増加するにつれて、周囲の点との間の再帰的関係が増え、2色の色分けではその関係を解除できないからである。

このマルチ・カラー技法は、考え方がわかり易くしかも使い易いことから、いままで多くの色分け方法が提案されてきた。それらは本質的には同じであり、効率的にもほとんど同等である。しかし、離散近似式の点数が増えたときに、'一体、何色使えば、互いに再帰的関係にならずに色分けできるか？'という問いに対して、従来は試行錯誤で色の数を決定するしか方法がなかった。並列計算が主流になりつつある現在、今後マルチ・カラー技法はもっと頻繁に用いられることが予想され、理論的な考察をおこなっておくことは意義があることだと思われる。

そこで、本報告では、古くから存在するこの最小色分け問題を、ベクトル・並列計算という立場から統一的にかつ理論的に議論することを試みた。その結果、格子点を連続形色分けをするときに、多点近似式のベクトル・並列化に関する一般原理を導き出すことができた。そして、その原理をよく使用されるいろいろなタイプの多点近似式にも適用し、ベクトル・並列化のための必要十分条件を具体的な形で求めた。また、数値実験でその有効性も確認した。

2　ブロック型色分けと連続形色分け

ここでは、図1 (a),(b) にブロック型色分けと連続形色分けの例を示す。図1は9点近似式に対する4色の色分けの例である。

G_3	G_4	W_3	W_4
G_1	G_2	W_1	W_2
R_3	R_4	B_3	B_4
R_1	R_2	B_1	B_2

G_5	W_5	R_6	B_6	G_6	W_6
R_4	B_4	G_4	W_4	R_5	B_5
G_2	W_2	R_3	B_3	G_3	W_3
R_1	B_1	G_1	W_1	R_2	B_2

図1　4色のブロック型色分けと連続形色分けの例

計算手順をSOR法で説明する。最初に、4色(Red,Blue,Green,White)の点R,B,G,Wの添え字1が付いた点の値を更新する。次に、添え字2,3,4の付いた点の値をこの順番で更新する。この手順を収束するまで繰り返す。ここで、SOR法の平均更新率という考えを導入する。これは、各更新段階の周囲の関係する点のうち、更新済みの点の数の平均値をとったものである。通常の5点近似式で

あればそれは一定値2である。また、9点近似式（周囲8点）であれば、平均更新率は一定で4である。図1のブロック型4色の色分けの例では、各更新の段階で、周囲8点のうち前の段階で更新済みの点の数は、それぞれ0,2,6,8である。これらの平均をとると、平均更新率は4になることがわかる。したがって、SOR法本来の収束率はこのブロック型色分けで低下することはない。

3 ベクトル・並列計算

曲線座標系の2次元9点近似式、3次元19点近似式で表されたポアソン方程式に対して、このブロック型色分けをしたSOR法の効率を調べてみることにする。使用した計算機は、日立S-820/80とCONVEX社C-240(4 CPU)である。最大計算速度はそれぞれ2Gflops, 50Mflops/1 CPU（単精度演算の場合）である。結果を表1, と表2(a),(b)に示す。解いた問題は、Dirichlet条件のポアソン方程式である。ベクトル計算機では、それぞれ4色、8色でベクトル化ができる。4 CPUの並列計算機では、16色、32色で並列計算できる。

表1　4色(9点近似式)のS-820上の計算速度

格子点数	4色	格子点数	4色	格子点数	4色	格子点数	4色
140^2=19600	1617	200^2 = 40000	1542	244^2=59536	1594	284^2 = 80656	1506

表2(a)　4 CPU用16色(4×4)SOR法の計算速度

格子点数	(a)1 CPU	(b)4 CPU	(b):(a)
100^2	23.6	85.6	3.63
140^2	23.8	87.3	3.67
172^2	23.4	87.2	3.73
200^2	23.9	88.7	3.71
224^2	23.9	88.7	3.71
平均Mflops	23.7	87.5	3.69

表2(b)　4 CPU用3次元32色(4 × 8)SOR法の計算速度

格子点数	(a)1 CPU	(b) CPU	(b):(a)
100^2	25.2	90.2	3.58
140^2	21.5	75.4	3.51
172^2	26.0	95.8	3.68
200^2	25.6	93.9	3.67
224^2	25.6	94.3	3.68
平均Mflops	24.8	89.9	3.63

ブロック型色分けは、この他にも数多く知られているが、多点近似式に関する理論的な考察が難しことから、ここではこれ以上深く立ち入らないことにする。

4　連続形色分けにおける一般原理の導出

3次元の格子点 (i,j,k), $(1 \le i \le N_x,\ 1 \le j \le N_y,\ 1 \le k \le N_z)$ と、その上で定義された変数 U_{ijk} について考える。また、変数 U_{ijk}に関する m 点近似式を次のように表すことにする。

$$U_{ijk} = f_{ijk} + \sum_{h=1}^{m-1} C_{ijk,h} U_{i(h),j(h),k(h)} \tag{1}$$

ここで $(i(h),j(h),k(h))$ は U_{ijk}の近似式に現れる近傍の格子点の番地を表し、一般には $i(h) = i+i^*, j(h) = j+j^*, k(h) = k+k^*$の形（$i^*, j^*, k^*$は定数）で表される。また、$i(0) = i,\ j(0) = j,\ k(0) = k$とし、また f_{ijk} は定数項、$C_{ijk,h}$ は定数とする。次に、格子点を次の式（2）によって番号付けをする。（いわゆる辞書式の順番付け）

$$S(i,j,k) = i + N_x(j-1) + N_x N_y (k-1) \tag{2}$$

これにより、全ての格子点が1から $N(= N_x N_y N_z)$ まで連続的に番号付けがなされる。このとき、次の様な c 個のグループ（cは塗り分ける色の数に相当する）に分けることを考える。

$$A_1 = \{1, c+1, 2c+1,\ \ldots\}$$

$$A_2 = \{2, c+2, 2c+2,\ \ldots\}$$

$$\vdots$$

$$A_c = \{c,\ 2c,\ 3c,\ \ldots\}$$

この各グループに対応する番地の格子点に、それぞれのグループ固有の色を与えて類別することを、ここで改めて連続形色分けと定義する。このような色分けにより、ベクトル長 $O(N/c)$（ただし c は色の数）の演算が可能になる。このとき、次の命題が成り立つ。

［命題1］
「U_{ijk} に関する m 点近似式 (1) が、ベクトル・並列化が出来るための必要十分条件は、x 軸、y軸方向の格子点数 N_x, N_yと色の数 c が次の (3) 式を満足することである。

$$(i(h)-i) + N_x(j(h)-j) + N_x N_y (k(h)-k) \not\equiv 0 \pmod c \tag{3}$$

但し、$h = 1,2,\ldots,m-1$ である。2次元のとき、左辺の第3項は省ける。」

［証明］
まず、任意の二つの格子点 (i,j,k), $(i(h),j(h),k(h))$ との色の関係（同一色であるかどうか）が、格子点 (i,j,k) の位置によらないことを示す。

$i(h) = i+i^*,\ j(h) = j+j^*,\ k(h) = k+k^*$ と表したときに、

$$S(i(h),j(h),k(h)) - S(i,j,k)$$

$$= i + i^* + N_x(j+j^*-1) + N_x N_y (k+k^*-1) - (i + N_x(j-1) + N_x N_y(k-1))$$

$$= i^* + N_x j^* + N_x N_y k^*$$

7 ベクトル計算

式 (4) に示す、2階の微分項を含む微分方程式を考える。

$$U_{xx} + U_{yy} + U_{zz} + U_{xy} + U_{yz} + U_{zx} = f(x, y, z) \tag{4}$$

解析領域は3次元単位立方体 $[0,1] \times [0,1] \times [0,1]$ とし、右辺項 f は、$f(x,y,z) = e^{xyz}((xy)^2 + (yz)^2 + (zx)^2 + (x+y+z)(1+xyz))$ のように与える。このとき真の解は $U(x,y,z) = e^{xyz}$ である。左辺の各項を 2 次精度の中心差分で近似すると、離散方程式は 19 点近似式になる。SOR 法の収束判定条件は相対残差 L_2 ノルムで 4.0×10^{-4} 、反復計算の初期値は全て 0 、演算は倍精度でおこなった。結果を表 6 に示す。

表 6　7 色 SOR 法の計算速度 (単位:Mflops)

格子点数	VP-200	VP-2600	SX-2	S-820/80
44 × 33 × 34 (= 49368)	461	1430	1024	1542
58 × 54 × 32 (= 100224)	461	1434	1034	1567

8 まとめ

最小色分け問題のベクトル・並列化について考察した。連続形色分けをしたときの多点近似式のベクトル・並列化のための必要十分条件に関する一般原理を導出した。さらに、それを曲線座標系3次元1 9点近似式に適用することにより、7 色の連続形色分けをすればベクトル・並列化ができることを明らかにした。同様に、その他の代表的な多点近似式についても必要十分条件を明示した。これらは、ベクトル長がオーダー $O(N/c)$, (Nは未知数の総数、c は色の数) になり、ベクトル・並列計算機向きである。また、複数のベクトル計算機や並列計算機上でその計算効率も検証した。

9 謝辞

CONVEX 社 C-240 上の数値実験をおこなうにあたり、ご協力いただいた東京エレクトロン (株) 松永　豊氏に心より感謝致します。

10 参考文献

1. S. Fujino, T. Tamura, K. Kuwahara, "Application of the RAINBOW SOR technique to Fluid Flow Analysis in the 3D generalized curvilinear coordinate system", 6th International Conference on Numerical Fluid, Swansea, U.K., July 7-10, 1989

表3 (a)　19点近似式の格子点の添字式

h	i(h)	j(h)	k(h)	h	i(h)	j(h)	k(h)
0	i	j	k				
1	i	j	k+1	10	i−1	j	k
2	i−1	j	k+1	11	i−1	j−1	k
3	i+1	j	k+1	12	i	j−1	k
4	i	j−1	k+1	13	i+1	j−1	k
5	i	j+1	k+1	14	i	j−1	k−1
6	i−1	j+1	k	15	i	j+1	k−1
7	i	j+1	k	16	i−1	j	k−1
8	i+1	j+1	k	17	i+1	j	k−1
9	i+1	j	k	18	i	j	k−1

(b)25点近似式の追加添字式

h	i(h)	j(h)	k(h)
19	i−2	j	k
20	i	j−2	k
21	i	j	k−2
22	i+2	j	k
23	i	j+2	k
24	i	j	k+2

これらの値を、命題1の条件式(3)に代入すると、次の4つの条件式(a)～(d)が得られる。

(a) $N_x N_y \not\equiv \pm 1,\ 0 \pmod{c}$

(b) $N_x(N_y \pm 1) \not\equiv 0 \pmod{c}$

(c) $N_x \not\equiv \pm 1,\ 0 \pmod{c}$

(d) $\pm 1 \not\equiv 0 \pmod{c}$

条件(c),(d)から最初に $c \geq 4$ がいえる。

1. $c = 4$ のとき、条件(c)から $N_x \equiv 2$ 、条件(b)から $N_y \equiv 0, 2$ が言える。
2. $c = 5$ のとき、条件(c)から $N_x \equiv 2, 3$ 、条件(b)から $N_y \equiv 0, 2, 3$ が言える。
3. $c = 6$ のとき、条件(c)から $N_x \equiv 2, 3, 4$ 、条件(b)から $N_y \equiv 0, 2, 3, 4$ が言える。しかし、上記の c=4,5,6 のとき、いずれも条件(a)を満たさない。
4. $c = 7$ のとき、下記の組合せが可能である。

$\{N_x \equiv 2, N_y \equiv 2, 5\}$, $\{N_x \equiv 3, N_y \equiv 3, 4\}$, $\{N_x \equiv 4, N_y \equiv 3, 4\}$, $\{N_x \equiv 5, N_y \equiv 2, 5\}$ $(mod\ 7)$

逆に、このとき上の(a)から(d)の条件をすべて満足する。これらの4つの組合せは、標記の命題2のようにまとめられる。

Q.E.D

6　その他の多点近似式について

その他の多点近似式のうち、よく使われるものに命題1を適用した。結果を表4に示す。

表4　その他の多点近似式の最小色分け数とベクトル・並列化条件

多点近似式の類別	色の数	ベクトル・並列化条件
2次元5点近似（図2(a)）	2	$N_x \equiv 1(mod\quad 2)$
2次元9点近似（図2(b)）	4	$N_x \equiv 2(mod\quad 4)$
2次元13点近似（図2(c)）	5	$N_x \equiv 2$ または $N_x \equiv 3(mod\quad 5)$
2次元9点近似（図2(d)）	3	$N_x \equiv 1$ または $N_x \equiv 2(mod\quad 3)$
3次元25点近似（表3(b)）	7	19点近似式と同じ

また、表5(a)にベクトル計算機VP-2600上の連続形4色、5色SOR法の計算速度を示す。さらに、並列計算をAlliant FX-40(2 CPU)上で実行した。1 CPUに対する計算速度比率を表5(b)に示す。解いた問題は、同じくDirichlet条件のポアソン方程式である。

表5(a) 連続形4色と5色のＳＯＲ法の計算速度 (on VP-2600)
(b) 連続形4,5色SOR法の1CPUに対する効率比 (on FX-40)

格子点数	4色	5色
100^2	1519	1479
300^2	1574	1504
500^2	1618	1448
平均Mflops	1570	1477

(a)

格子点数	4色	5色
100^2	1.85	1.84
200^2	1.87	1.82
300^2	1.87	1.85

(b)

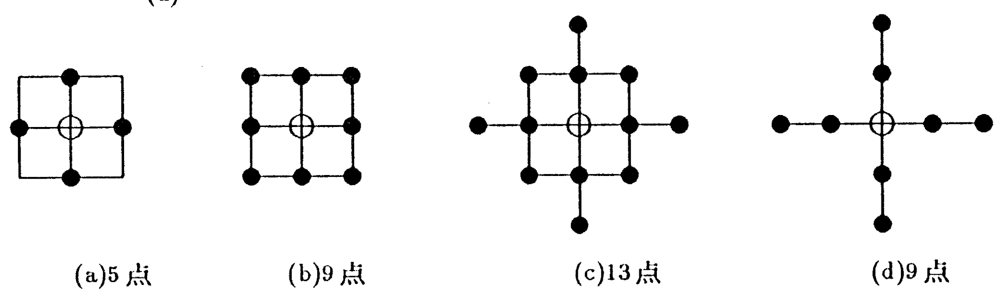

図2　その他の多点近似式の格子配置図

これらの格子配置をとる近似式は、たとえば、ポアソン方程式を、

(a) は、2次精度の中心差分近似するとき、

(b) は、4次精度の中心差分近似、あるいは(a)を曲線座標系へ座標変換したとき、

(c) は、同じく(d)を曲線座標系へ座標変換したとき

(d) は、3次精度の風上差分近似するとき、

などに現れる。

7　ベクトル計算

式(4)に示す、2階の微分項を含む微分方程式を考える。

$$U_{xx}+U_{yy}+U_{zz}+U_{xy}+U_{yz}+U_{zx}=f(x,y,z) \tag{4}$$

解析領域は3次元単位立方体 $[0,1]\times[0,1]\times[0,1]$ とし、右辺項 f は、$f(x,y,z)=e^{xyz}((xy)^2+(yz)^2+(zx)^2+(x+y+z)(1+xyz))$ のように与える。このとき真の解は $U(x,y,z)=e^{xyz}$ である。左辺の各項を2次精度の中心差分で近似すると、離散方程式は19点近似式になる。SOR法の収束判定条件は相対残差 L_2 ノルムで 4.0×10^{-4}、反復計算の初期値は全て0、演算は倍精度でおこなった。結果を表6に示す。

表6　7色SOR法の計算速度（単位:Mflops）

格子点数	VP-200	VP-2600	SX-2	S-820/80
44 × 33 × 34 (= 49368)	461	1430	1024	1542
58 × 54 × 32 (= 100224)	461	1434	1034	1567

8　まとめ

最小色分け問題のベクトル・並列化について考察した。連続形色分けをしたときの多点近似式のベクトル・並列化のための必要十分条件に関する一般原理を導出した。さらに、それを曲線座標系3次元19点近似式に適用することにより、7色の連続形色分けをすればベクトル・並列化ができることを明らかにした。同様に、その他の代表的な多点近似式についても必要十分条件を明示した。これらは、ベクトル長がオーダー $O(N/c)$,（Nは未知数の総数、cは色の数）になり、ベクトル・並列計算機向きである。また、複数のベクトル計算機や並列計算機上でその計算効率も検証した。

9　謝辞

CONVEX社 C-240上の数値実験をおこなうにあたり、ご協力いただいた東京エレクトロン（株）松永　豊氏に心より感謝致します。

10　参考文献

1. S. Fujino, T. Tamura, K. Kuwahara, "Application of the RAINBOW SOR technique to Fluid Flow Analysis in the 3D generalized curvilinear coordinate system", 6th International Conference on Numerical Fluid, Swansea, U.K., July 7-10, 1989