五重対角連立一次方程式の並列解法

成富 敬

Abstract

This paper proposes a new computational algorithm for solving pentadiagonal systems of linear equtions. The algorithm has essential parallelism suitable for parallel processing systems. A numerical example is also given to illustrate the proposed algoritm.

1 はじめに

要素間に関係性のあるシステムをモデル化する際，最終的に次式で表わされる連立一次方程式の求解に帰着される場合がある．

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{h}. \tag{1}$$

ここで $\boldsymbol{A}$ は N 行 N 列の対角優位な五重対角正方行列，$\boldsymbol{x}$ と $\boldsymbol{h}$ は N 次元の列ベクトルであり，$\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_N)^T$，$\boldsymbol{h} = (h_1, h_2, \ldots, h_N)^T$ とする．

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} d_1 & e_1 & f_1 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ c_2 & d_2 & e_2 & f_2 & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ b_3 & c_3 & d_3 & e_3 & f_3 & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & b_4 & c_4 & d_4 & e_4 & f_4 & 0 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 & b_{N-3} & c_{N-3} & d_{N-3} & e_{N-3} & f_{N-3} & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 & b_{N-2} & c_{N-2} & d_{N-2} & e_{N-2} & f_{N-2} \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 & b_{N-1} & c_{N-1} & d_{N-1} & e_{N-1} \\ 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & b_N & c_N & d_N \end{pmatrix}. \tag{2}$$

ここで，$1 \le i \le m$，$m+1 \le k \le N$．$b_1 = b_2 = c_1 = 0$，$e_N = f_N = f_{N-1} = 0$ である．

対象問題のより詳細な分析のためには，考慮する要素数を増やす必要があり，大規模連立一次方程式を解くことになる．このような大規模問題に対しては，ベクトル型スーパコンピュータや並列分散型コンピュータなど新たな計算機アーキテクチャが研究開発され，あわせて計算機アーキテクチャに適した計算方法が研究されてきた．今では，一般的なパーソナルコンピュータが複数の CPU コアを持つまでになっており，計算機環境の面ではある程度の水準に達している．しかしながら，複数の CPU を効率よく利用するには並列アーキテクチャに適した並列アルゴリズムが必要である．このようなアルゴリズムの開発はここ数十年続けられてきたが，新しい解法の開発は不可欠である．

ところで，これまで大規模な三重対角連立一次方程式や五重対角連立一次方程式を解く方法として，ガウスの消去法や LU 分解に基づく方法をはじめ，様々な解法が提案されている [2, 3, 4, 6, 8].

本稿では，五重対角連立一次方程式の求解法として，Thomas 法 [1, 5] の系統に位置づけることのできる手法を提案している．この解法は解法自体が自然な並列性を有しており，並列計算機に適した解法である．

2　並列解法

2.1　解法の導出

$N=2m$ とし，式 (2) を考慮し，式 (1) を次のように表す．

$$b_i x_{i-2} + c_i x_{i-1} + d_i x_i + e_i x_{i+1} + f_i x_{i+2} = h_i, \tag{3a}$$

$$b_k x_{k-2} + c_k x_{k-1} + d_k x_k + e_k x_{k+1} + f_k x_{k+2} = h_k. \tag{3b}$$

いま，

$$x_i = \gamma_i x_{i+2} + \alpha_i x_{i+1} + \beta_i, \tag{4a}$$

$$x_k = \gamma_k x_{k-2} + \alpha_k x_{k-1} + \beta_k, \tag{4b}$$

とする．このとき，

$$x_{i-1} = \gamma_{i-1} x_{i+1} + \alpha_{i-1} x_i + \beta_{i-1}, \tag{5a}$$

$$x_{k+1} = \gamma_{k+1} x_{k-1} + \alpha_{k+1} x_k + \beta_{k+1}. \tag{5b}$$

また，

$$x_{i-2} = \gamma_{i-2} x_i + \alpha_{i-2} x_{i-1} + \beta_{i-2}, \tag{6a}$$

$$x_{k+2} = \gamma_{k+2} x_k + \alpha_{k+2} x_{k+1} + \beta_{k+2}. \tag{6b}$$

式 (5a) と式 (6a) を式 (3a) の左辺第2項と第1項にそれぞれ代入して整理し，式 (4a) と比較する．同様に，式 (5b) と式 (6b) を式 (3b) の左辺第4項と第5項にそれぞれ代入して整理し，式 (4b) と比較する．これにより，γ_i，γ_k，α_i，α_k，β_i，β_k についての以下の漸化式がえられる．

$$\gamma_i = -\frac{f_i}{d_i + c_i \alpha_{i-1} + b_i(\gamma_{i-2} + \alpha_{i-1}\alpha_{i-2})}, \tag{7a}$$

$$\gamma_k = -\frac{b_k}{d_k + e_k \alpha_{k+1} + f_k(\gamma_{k+2} + \alpha_{k+1}\alpha_{k+2})}, \tag{7b}$$

$$\alpha_i = -\frac{e_i + \gamma_{i-1}(c_i + b_i \alpha_{i-2})}{d_i + c_i \alpha_{i-1} + b_i(\gamma_{i-2} + \alpha_{i-1}\alpha_{i-2})}, \tag{8a}$$

$$\alpha_k = -\frac{c_k + \gamma_{k+1}(e_k + f_k \alpha_{k+2})}{d_k + e_k \alpha_{k+1} + f_k(\gamma_{k+2} + \alpha_{k+1}\alpha_{k+2})}, \tag{8b}$$

$$\beta_i = \frac{h_i - c_i\beta_{i-1} - b_i(\alpha_{i-2}\beta_{i-1} + \beta_{i-2})}{d_i + c_i\alpha_{i-1} + b_i(\gamma_{i-2} + \alpha_{i-1}\alpha_{i-2})}, \tag{9a}$$

$$\beta_k = \frac{h_k - e_k\beta_{k+1} - f_k(\alpha_{k+2}\beta_{k+1} + \beta_{k+2})}{d_k + e_k\alpha_{k+1} + f_k(\gamma_{k+2} + \alpha_{k+1}\alpha_{k+2})}. \tag{9b}$$

なお，$\gamma_1 = -f_1/d_1$，$\gamma_2 = -f_2/(d_2 + c_2\alpha_1)$，$\gamma_N = -b_N/d_N$，$\gamma_{N-1} = -b_{N-1}/(d_{N-1} + e_{N-1}\alpha_N)$，$\alpha_1 = -e_1/d_1$，$\alpha_2 = -(e_2+\gamma_1 c_2)/(d_2+c_2\alpha_1)$，$\alpha_N = -c_N/d_N$，$\alpha_{N-1} = -(c_{N-1}+\gamma_N e_{N-1})/(d_{N-1}+e_{N-1}\alpha_N)$，$\beta_1 = h_1/d_1$，$\beta_2 = (h_2 - c_2\beta_1)/(d_2+c_2\alpha_1)$，$\beta_N = h_N/d_N$，$\beta_{N-1} = (h_{N-1} - e_{N-1}\beta_N)/(d_{N-1}+e_{N-1}\alpha_N)$.

ところで，式 (4a) と式 (4b) においてそれぞれ $x = m$，$x = m + 1$ とおくと；

$$x_m = \gamma_m x_{m+2} + \alpha_m x_{m+1} + \beta_m, \tag{10a}$$

$$x_{m+1} = \gamma_{m+1} x_{m-1} + \alpha_{m+1} x_m + \beta_{m+1}. \tag{10b}$$

また，式 (4a) と式 (4b) においてそれぞれ $x = m - 1$，$x = m + 2$ とおくと；

$$x_{m-1} = \gamma_{m-1} x_{m+1} + \alpha_{m-1} x_m + \beta_{m-1}, \tag{11a}$$

$$x_{m+2} = \gamma_{m+2} x_m + \alpha_{m+2} x_{m+1} + \beta_{m+2}. \tag{11b}$$

ここで，式 (11b) を式 (10a) の右辺第 1 項に，また，式 (11a) を式 (10b) の右辺第 1 項に代入して整理すると次式が得られる．

$$(\gamma_m\gamma_{m+2} - 1)x_m + (\gamma_m\alpha_{m+2} + \alpha_m)x_{m+1} + \gamma_m\beta_{m+2} + \beta_m = 0, \tag{12a}$$

$$(\gamma_{m+1}\alpha_{m-1} + \alpha_{m+1})x_m + (\gamma_{m+1}\gamma_{m-1} - 1)x_{m+1} + \gamma_{m+1}\beta_{m-1} + \beta_{m+1} = 0. \tag{12b}$$

式 (12a) と式 (12b) を x_m と x_{m+1} について解くと，以下のとおり x_m と x_{m+1} が求まる．

$$x_m = \frac{(\gamma_{m+1}\beta_{m-1} + \beta_{m+1})(\gamma_m\alpha_{m+2} + \alpha_m) - (\gamma_m\beta_{m+2} + \beta_m)(\gamma_{m+1}\gamma_{m-1} - 1)}{(\gamma_m\gamma_{m+2} - 1)(\gamma_{m+1}\gamma_{m-1} - 1) - (\gamma_m\alpha_{m+2} + \alpha_m)(\gamma_{m+1}\alpha_{m-1} + \alpha_{m+1})}, \tag{13a}$$

$$x_{m+1} = \frac{(\gamma_m\beta_{m+2} + \beta_m)(\gamma_{m+1}\alpha_{m-1} + \alpha_{m+1}) - (\gamma_{m+1}\beta_{m-1} + \beta_{m+1})(\gamma_m\gamma_{m+2} - 1)}{(\gamma_m\gamma_{m+2} - 1)(\gamma_{m+1}\gamma_{m-1} - 1) - (\gamma_m\alpha_{m+2} + \alpha_m)(\gamma_{m+1}\alpha_{m-1} + \alpha_{m+1})}. \tag{13b}$$

したがって，式 (4a) において $i = m-1, m-2, \ldots, 1$ とし，式 (4b) において $k = m+1, m+2, \ldots, N$ とすることにより各 x_i と各 x_k を求めることができ，解 $\boldsymbol{x}$ のすべての要素が得られる．

2.2　求解アルゴリズム

本解法のアルゴリズムは次のとおりである．

ステップ 1　式 (7a)，式 (8a)，式 (9a) において $i = 1, 2, \ldots, m$ とし，各 γ_i，α_i，β_i を求める．また，式

(7b)，式 (8b)，式 (9b) において，$i = N, N-1, \ldots, m+1$ とし，各 γ_k，α_k，β_k を求める．

ステップ 2 式 (13a) と式 (13b) により，x_m と x_{m+1} を求める．

ステップ 3 式 (4a) において $i = m-1, m-2, \ldots, 1$ とし，$x_{m-1}, x_{m-2}, \ldots, x_1$ を順次求める．また，式 (4b) において $k = m+2, m+3, \ldots, N$ とし，$x_{m+2}, x_{m+3}, \ldots, x_N$ を順次求める．

並列性については，ステップ 1 では，各 (γ_i，α_i，β_i) と各 (γ_k，α_k，β_k) とを独立に計算できる．また，ステップ 3 では，各 x_i と各 x_k を独立に計算できる．

なお，本アルゴリズムの計算量は，分母の共通する部分が再計算を要しないことなどを考慮すると，ステップ 1 では $19N-52$，ステップ 2 では 23，ステップ 3 では $4N-8$ であり，全計算量は $23N-37$ となる．

3　数値計算例

数値計算例を示す．いま，次の五重対角係数行列$\boldsymbol{A}$を考える．

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 4 & -1 & -1 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ -1 & 4 & -1 & -1 & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ -1 & -1 & 4 & -1 & -1 & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & -1 & -1 & 4 & -1 & -1 & 0 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 & -1 & -1 & 4 & -1 & -1 & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 & -1 & -1 & 4 & -1 & -1 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 & -1 & -1 & 4 & -1 \\ 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & -1 & -1 & 4 \end{pmatrix}.$$

ここで，解 $\boldsymbol{x} = (1,1,1,\ldots,1,1,1)^T$ とすると，$\boldsymbol{h} = (2,1,0,\ldots,0,1,2)^T$ である．このとき，ステップ 1 の γ_i，α_i，β_i，及び γ_k，α_k，β_k は以下のとおりである．

			γ_i	α_i	β_i	
	$i = 1$	: (	0.250000	0.250000	0.500000	)
↓	$i = 2$	: (	0.266667	0.333333	0.400000	)
↓	$i = 3$	: (	0.300000	0.400000	0.300000	)
↓	$i = 4$	: (	0.312500	0.437500	0.250000	)
↓	$i = 5$	: (	0.323887	0.465587	0.210526	)
↓	$i = 6$	: (	0.331321	0.485580	0.183099	)
↑	$k = 7$	: (	0.331321	0.485580	0.183099	)
↑	$k = 8$	: (	0.323887	0.465587	0.210526	)
↑	$k = 9$	: (	0.312500	0.437500	0.250000	)
↑	$k = 10$	: (	0.300000	0.400000	0.300000	)
↑	$k = 11$	: (	0.266667	0.333333	0.400000	)
	$k = 12$	: (	0.250000	0.250000	0.500000	)
			γ_k	α_k	β_k	

4　まとめ

五重対角連立一次方程式の解法を提案した．五重対角連立一次方程式に対するガウスの消去法の計算量は，$19N$ であるが並列計算には適していない．また，分割統治法 [2] や TW 分解に基づく解法 [4] と比較すると，これらの解法はプロセッサ数を P とすると，それぞれ $45N/P$，$49N/P$ であり，計算量の面では提案手法が優れている．

本解法の自然な並列度は 2 であるが，文献 [7] で述べている分割統治の考え方を導入することにより並列度を高めることが可能となると考えられる．また，実際に並列計算をおこなう際のデータ転送に要する通信時間や解法の安定性の検証なども今後の課題である．

参考文献

[1] Ames, W.F., Numerical methods for partial differential equations(2nd ed.), Academic Press, 1977.

[2] Bondeli, S., Divide and conquer: a parallel algorithm for the solution of a tridiagonal linear system of equations, Parallel Computing, vol.17, no.4-5, pp.419-434, 1991.

[3] Hockney, R.W., A fast direct solution of Poisson's equation using Fourier analysis, J. ACM, Vol.12, No.1, pp.95-113, 1965.

[4] Ivanov, I. G. and Walshaw, C., A parallel method for solving pentadiagonal systems of linear equations, University of Greenwich Report, http://staffweb.cms.gre.ac.uk/ c.walshaw/papers/fulltext/IvanovTR3698.ps, 2004.

[5] Naritomi, T. and Aso, H., A highly parallel systolic tridiagonal solver, IEICE Trans. Inf. & Syst., Vol.E79-D, No.9, pp.1241-1247, 1996.

[6] Naritomi, T., Bi-Reduction: A Parallel Algorithm for Tridiagonal Linear Systems, INFORMATION, Vol.3, No.4, pp.479-484, 2000.

[7] 成富　敬, 分割統治戦略による Bi-reduction 法の高並列化, 山口経済学雑誌, Vol.49, No.6, pp.19-24, 2001.

[8] Sun, X.H., Zhang, H. and Ni, L.M., Efficient tridiagonal solvers on multicomputers, IEEE Trans. Comput., Vol.C-41, No.3, pp.286-296, 1992.