||||| 研究ノート |||||

巡回型三重対角連立一次方程式の並列解法

A parallel solver for periodic tridiagonal linear systems

成富 敬
Naritomi Takashi

Abstract

In this article, we propose a new parallel solver for periodic tridiagonal linear systems. A numerical example is also given to illustrate the proposed solver.

1 はじめに

熱伝導方程式は，自然現象や社会現象のさまざまな場面で利用される方程式である．様々な物理現象のシミュレーションはもとより，金融工学におけるブラック・ショールズ方程式を差分法で解く場合にも，大規模な連立一次方程式を高速に解くことが求められる．核心となる処理は，離散化によって得られる大規模三重対角連立一次方程式の求解部分であり，さまざまな並列計算アルゴリズムの開発が進められてきた．求解には，三重対角行列の逆行列を利用する方法ではなく，帯行列という係数行列の構造の特殊性を生かした解法が使われる [1]−[6]．このような行列構造の特殊性を考慮した直接解法は，大規模連立一次方程式の反復解法における探索の初期値設定においても重要である．

本稿では，特に Neumann 条件が与えられた境界値問題に対する方程式の差分化によって得られる，巡回型三重対角連立一次方程式を対象とする．対象とする巡回型三重対角連立一次方程式を，次式のように行列を用いて表す．

$$\begin{pmatrix} d_1 & e_1 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & c_1 \\ c_2 & d_2 & e_2 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & c_3 & d_3 & e_3 & \ddots & & & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & & \ddots & c_{N-2} & d_{N-2} & e_{N-2} & 0 \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & c_{N-1} & d_{N-1} & e_{N-1} \\ e_N & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & c_N & d_N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ x_{N-2} \\ x_{N-1} \\ x_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} h_1 \\ h_2 \\ h_3 \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ h_{N-2} \\ h_{N-1} \\ h_N \end{pmatrix}. \tag{1}$$

ここで，$N \times N$ の係数行列$\boldsymbol{A}$は，対角要素 $d_1, d_2, \dots, d_N$ が全て非零の対角優位な巡回型三重対角行列とする．すなわち，$|d_i| > |c_i| + |e_i|$ $(i = 1, 2, \dots, N)$．また，下対角項を $c_2, c_3, \dots, c_N$ とし，1行 N 列の要素を c_1 とする．一方，上対角項は $e_1, e_2, \dots, e_{N-1}$ とし，N 行1列の要素を e_N とする．また，$\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \dots, x_N)^T$ と $\boldsymbol{h} = (h_1, h_2, \dots, h_N)^T$ は N 次元の列ベクトルである．なお，Dirichlet 条件が与えられた境界値問題に対する差分化では，$c_1 = 0$，$e_N = 0$ である．

本稿では，巡回型三重対角連立一次方程式の並列解法を提案し，数値例を示している．この解法は，Dirichlet 条件の場合，文献 [4] で提案された bi-reduction 法に帰着される．

2　巡回型並列解法

2.1　導出

いま，$N=2m$ とし，式 (1) の d_1，c_1，h_1 及び e_N，d_N，h_N を，それぞれ次式のようにおく．

$$d'_1=d_1,\ c'_1=c_1,\ h'_1=h_1, \tag{2a}$$

$$e'_N=e_N,\ d'_N=d_N,\ h'_N=h_N, \tag{2b}$$

式 (2a) 及び式 (2b) を使うと，式 (1) の 1 行目と N 行目は，

$$d'_1x_1+e_1x_2+c'_1x_N=h'_1, \tag{3a}$$

$$e'_Nx_1+c_Nx_{N-1}+d'_Nx_N=h'_N. \tag{3b}$$

そこで，式 (3a) 及び式 (3b) を連立させて解くと，

$$x_1=\frac{1}{d'_1d'_N-e'_Nc'_1}(-e_1d'_Nx_2+c_Nc'_1x_{N-1}+h'_1d'_N-h'_Nc'_1), \tag{4a}$$

$$x_N=\frac{1}{d'_1d'_N-e'_Nc'_1}(-c_Nd'_1x_{N-1}+e'_Ne_1x_2+h'_Nd'_1-h'_1e'_N). \tag{4b}$$

式 (4a) 及び式 (4b) を式 (1) の 2 行目と $(N-1)$ 行目に代入すると，

$$\begin{aligned}(d_2-\frac{c_2e_1d'_N}{d'_1d'_N-e'_Nc'_1})x_2+e_2x_3+\frac{c_2c_Nc'_1}{d'_1d'_N-e'_Nc'_1}x_{N-1}\\ =h_2-\frac{c_2}{d'_1d'_N-e'_Nc'_1}(h'_1d'_N-h'_Nc'_1),\end{aligned} \tag{5a}$$

$$\begin{aligned}\frac{e_{N-1}e'_Ne_1}{d'_1d'_N-e'_Nc'_1}x_2+c_{N-1}x_{N-2}+(d_{N-1}-\frac{e_{N-1}c_Nd'_1}{d'_1d'_N-e'_Nc'_1})x_{N-1}\\ =h_{N-1}-\frac{e_{N-1}}{d'_1d'_N-e'_Nc'_1}(h'_Nd'_1-h'_1e'_N).\end{aligned} \tag{5b}$$

したがって，式 (1) の $N \times N$ 巡回型三重対角連立一次方程式から，式 (6) に示す $(N-2) \times (N-2)$ 巡回型三重対角連立一次方程式

$$\begin{pmatrix} d'_2 & e_2 & & & & & c'_2 \\ c_3 & d_3 & e_3 & & & & \\ & c_4 & d_4 & & & & \\ & & \cdots & \cdots & & & \\ & & & \cdots & \cdots & & \\ & & & & c_{N-2} & d_{N-2} & e_{N-2} \\ e'_{N-1} & & & & & c_{N-1} & d'_{N-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ \vdots \\ \vdots \\ x_{N-2} \\ x_{N-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} h'_2 \\ h_3 \\ h_4 \\ \vdots \\ \vdots \\ h_{N-2} \\ h'_{N-1} \end{pmatrix}, \tag{6}$$

が得られる．ここで，

$$d'_2 = d_2 - \frac{c_2 e_1 d'_N}{d'_1 d'_N - e'_N c'_1},\ c'_2 = \frac{c_2 c_N c'_1}{d'_1 d'_N - e'_N c'_1},$$

$$h'_2 = h_2 - \frac{c_2}{d'_1 d'_N - e'_N c'_1}(h'_1 d'_N - h'_N c'_1), \tag{7a}$$

$$e'_{N-1} = \frac{e_{N-1} e_1 e'_N}{d'_1 d'_N - e'_N c'_1},\ d'_{N-1} = d_{N-1} - \frac{e_{N-1} c_N d'_1}{d'_1 d'_N - e'_N c'_1},$$

$$h'_{N-1} = h_{N-1} - \frac{e_{N-1}}{d'_1 d'_N - e'_N c'_1}(h'_N d'_1 - h'_1 e'_N). \tag{7b}$$

同様にして，$i(2 \le i < m)$ と $k(m+1 < k \le N-1)$ について，$i+k = N+1$ という条件のもとで，$(k-i+1) \times (k-i+1)$ 巡回型三重対角連立一次方程式

$$\begin{pmatrix} d'_i & e_i & & & & & & c'_i \\ c_{i+1} & d_{i+1} & e_{i+1} & & & & & \\ & c_{i+2} & d_{i+2} & e_{i+2} & & & & \\ & & \cdots & \cdots & \cdots & & & \\ & & & \cdots & \cdots & \cdots & & \\ & & & & c_{k-2} & d_{k-2} & e_{k-2} & \\ & & & & & c_{k-1} & d_{k-1} & e_{k-1} \\ e'_k & & & & & & c_k & d'_k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_i \\ x_{i+1} \\ x_{i+2} \\ \vdots \\ \vdots \\ x_{k-2} \\ x_{k-1} \\ x_k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} h'_i \\ h_{i+1} \\ h_{i+2} \\ \vdots \\ \vdots \\ h_{k-2} \\ h_{k-1} \\ h'_k \end{pmatrix}, \tag{8}$$

が得られる．ここで，

$$d'_i = d_i - \frac{c_i e_{i-1} d'_{k+1}}{d'_{i-1} d'_{k+1} - e'_{k+1} c'_{i-1}},\ c'_i = \frac{c_i c_{k+1} c'_{i-1}}{d'_{i-1} d'_{k+1} - e'_{k+1} c'_{i-1}},$$

$$h'_i = h_i - \frac{c_i}{d'_{i-1} d'_{k+1} - e'_{k+1} c'_{i-1}}(h'_{i-1} d'_{k+1} - h'_{k+1} c'_{i-1}), \tag{9a}$$

$$e'_k = \frac{e_k e_{i-1} e'_{k+1}}{d'_{i-1} d'_{k+1} - e'_{k+1} c'_{i-1}},\ d'_k = d_k - \frac{e_k c_{k+1} d'_{i-1}}{d'_{i-1} d'_{k+1} - e'_{k+1} c'_{i-1}},$$

$$h'_k = h_k - \frac{e_k}{d'_{i-1} d'_{k+1} - e'_{k+1} c'_{i-1}} (h'_{k+1} d'_{i-1} - h'_{i-1} e'_{k+1}). \tag{9b}$$

最終的には，$i = m$ および $k = m + 1$ のとき，2×2 連立一次方程式

$$\begin{pmatrix} d'_m & c'_m \\ e'_{m+1} & d'_{m+1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_m \\ x_{m+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} h'_m \\ h'_{m+1} \end{pmatrix}, \tag{10}$$

が得られる．ここで，

$$d'_m = d_m - \frac{c_m e_{m-1} d'_{m+2}}{d'_{m-1} d'_{m+2} - e'_{m+2} c'_{m-1}},\ c'_m = e_m + \frac{c_m c_{m+2} c'_{m-1}}{d'_{m-1} d'_{m+2} - e'_{m+2} c'_{m-1}},$$

$$h'_m = h_m - \frac{c_m}{d'_{m-1} d'_{m+2} - e'_{m+2} c'_{m-1}} (h'_{m-1} d'_{m+2} - h'_{m+2} c'_{m-1}), \tag{11a}$$

$$e'_{m+1} = c_{m+1} + \frac{e_{m+1} e_{m-1} e'_{m+2}}{d'_{m-1} d'_{m+2} - e'_{m+2} c'_{m-1}},\ d'_{m+1} = d_{m+1} - \frac{e_{m+1} c_{m+2} d'_{m-1}}{d'_{m-1} d'_{m+2} - e'_{m+2} c'_{m-1}},$$

$$h'_{m+1} = h_{m+1} - \frac{e_{m+1}}{d'_{m-1} d'_{m+2} - e'_{m+2} c'_{m-1}} (h'_{m+2} d'_{m-1} - h'_{m-1} e'_{m+2}). \tag{11b}$$

式 (10) を解くと，式 (12a) 及び式 (12b) が得られ，x_m と x_{m+1} が求まる．

$$x_m = \frac{h'_m d'_{m+1} - h'_{m+1} c'_m}{d'_m d'_{m+1} - e'_{m+1} c'_m}, \tag{12a}$$

$$x_{m+1} = \frac{h'_{m+1} d'_m - h'_m e'_{m+1}}{d'_m d'_{m+1} - e'_{m+1} c'_m}. \tag{12b}$$

ところで，式 (8) の最初の行と最後の行より，

$$d'_i x_i + e_i x_{i+1} + c'_i x_k = h'_i, \tag{13a}$$

$$e'_k x_i + c_k x_{k-1} + d'_k x_k = h'_k. \tag{13b}$$

式 (13a) 及び式 (13b) を整理し，x_i と x_k とについて解くと，

$$x_i = \frac{1}{d'_i d'_k - e'_k c'_i} (-e_i d'_k x_{i+1} + c_k c'_i x_{k-1} + h'_i d'_k - h'_k c'_i), \tag{14a}$$

$$x_k = \frac{1}{d'_i d'_k - e'_k c'_i}(-c_k d'_i x_{k-1} + e_i e'_k x_{i+1} + h'_k d'_i - h'_i e'_k). \tag{14b}$$

式 (14a) と式 (14b) において，$i = m-1$，$k = m+2$ とすると，

$$x_{m-1} = \frac{1}{d'_{m-1} d'_{m+2} - e'_{m+2} c'_{m-1}}(-e_{m-1} d'_{m+2} x_m + c_{m+2} c'_{m-1} x_{m+1} + h'_{m-1} d'_{m+2} - h'_{m+2} c'_{m-1}), \tag{15a}$$

$$x_{m+2} = \frac{1}{d'_{m-1} d'_{m+2} - e'_{m+2} c'_{m-1}}(-c_{m+2} d'_{m-1} x_{m+1} + e_{m-1} e'_{m+2} x_m + h'_{m+2} d'_{m-1} - h'_{m-1} e'_{m+2}). \tag{15b}$$

同様に，式 (14a) と式 (14b) において，条件 $i + k = N + 1$ を満たす i と j の組を $(i, j) = (m-2, m+3), (m-3, m+4), \ldots, (1, N)$ とすると，解の組，(x_{m-1}, x_{m+2}), (x_{m-2}, x_{m+3}), $\ldots$, (x_1, x_N) が順次求まる．

2.2 巡回型並列解法のアルゴリズム

巡回型並列解法のアルゴリズムは，次の 3 つのステージから構成される．

ステージ 1 式 (2a) 及び式 (2b)，式 (9a) 及び式 (9b)，そして式 (11a) 及び式 (11b) を使い，それぞれの d'_i，h'_i，d'_k，そして h'_k を計算する．ただし，$i = 1, 2, \ldots, m$，$k = N, N-1, \ldots, m+1$．

ステージ 2 式 (12a) 及び式 (12b) を使い，それぞれ x_m と x_{m+1} を計算する．

ステージ 3 式 (14a) 及び式 (14b) を使い，順次 x_i と x_k を計算する．ただし，$i = m-1, m-2, \ldots, 1$，$k = m+2, m+3 \ldots, N$．

3 数値例

数値例を以下に示す．

いま，対角優位な 12×12 巡回型三重対角係数行列$\boldsymbol{A}$を考える．

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 2.1 & -1 & 0 & \ldots & \ldots & 0 & -1 \\ -1 & 2.1 & -1 & 0 & \ldots & \ldots & 0 \\ 0 & -1 & 2.1 & \ddots & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & -1 & 2.1 & -1 & 0 \\ 0 & \ldots & \ldots & 0 & -1 & 2.1 & -1 \\ -1 & 0 & \ldots & \ldots & 0 & -1 & 2.1 \end{pmatrix}.$$

ここで，$\boldsymbol{h} = (0.1, 0.1, \ldots, 0.1)^T$ として，解 $\boldsymbol{x} = (1, 1, \ldots, 1)^T$ を求める．このとき，ステージ1の c'_i，d'_i，e'_i，h'_i 及び c'_k，d'_k，e'_k，h'_k は以下のとおりである．なお，$*$ 印は，計算する必要のない部分を表す．

		c'_i	d'_i	e'_i	h'_i	
$i=1$	: (	-1.000000	2.100000	$*$	0.100000	)
$i=2$	: (	-0.293255	1.484164	$*$	0.190909	)
$i=3$	: (	-0.138541	1.398846	$*$	0.260305	)
$i=4$	: (	-0.071502	1.378043	$*$	0.306541	)
$i=5$	: (	-0.037754	1.372375	$*$	0.334621	)
$i=6$	: (	-1.020061	1.370784	$*$	0.350723	)
$k=7$	: (	$*$	1.370784	-1.020061	0.350723	)
$k=8$	: (	$*$	1.372375	-0.037754	0.334621	)
$k=9$	: (	$*$	1.378043	-0.071502	0.306541	)
$k=10$	: (	$*$	1.398846	-0.138541	0.260305	)
$k=11$	: (	$*$	1.484164	-0.293255	0.190909	)
$k=12$	: (	$*$	2.100000	-1.000000	0.100000	)
		c'_k	d'_k	e'_k	h'_k	

4　まとめ

巡回型三重対角連立一次方程式の並列解法を提案した．本解法の計算量解析，安定性の検証，さらにマルチコア環境やGPU(Graphics Processing Unit) を用いた数値実験については今後の課題である．

参考文献

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

[2] Evans, D.J.: Parallel numerical algorithms for linear system," in Parallel Processing Systems, ed Evans, D.J., pp.357-384, 1982.

[3] Bondeli, S.: Divide and conquer : A parallel algorithm for the solution of tridiagonal linear systems of equations, Parallel Comput., 17, pp.419–434, 1991.

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

[5] Sun, X.H. and Moitra, S., Performance comparison of a set of periodic and non-periodic tridiagonal solvers on SP2 and Paragon parallel computers, Concurrency: practice and experience, Vol.9, No.8, pp.781-801, 1997.

[6] Wu, J.G., Yan W.M. and Chung K.L., A parallel solver for circulant toeplitz tridiagonal systems on hypercubes, Journal of scientific computing, Vol.12, No.4, pp.409-431, 1997.