研　究　速　報
UDC 517.929

2次元差分方程式の解法のベクトル化に関する考察

Study on the Vectorizable Solvers for Two-dimensional System of Differential Equations

小　林　敏　雄*・谷　口　伸　行*
Toshio KOBAYASHI and Nobuyuki TANIGUCHI

1．は　じ　め　に

流れ場の数値シミュレーションにおいては，離散方程式を解くことが計算時間の多くを占めるため，その速度が全体の計算速度を左右する．特に，多次元で大規模な計算においてその傾向が強まる．一般に，離散方程式は線形化して解かれるが，大規模線形方程式の解法については多くの研究がなされており，さまざまな方法が場合に応じて使用されている．しかし，近年ベクトル計算機が容易に利用できる状況になったことから，ベクトル化を考慮した解法の再評価が必要となっている．

今回は，差分法において用いられる代表的な2つの反復解法（SOR，ADI）の並列化を行い，単純なポアソン式系において従来の方法と計算速度を比較した．

2．ベクトル化の要点

一般に，差分方程式の解法プログラムにおいてベクトル化を妨げているのは，

```
      DO  10  I＝1，M
   10 F(I)＝A(I)×F(I－1)＋B(I)
```

の形の逐次代入式である．SOR，ADIでは陰解法的(*successive*)な性質が収束性を高めているが，そのために逐次代入が一部に生じる．そこで，反復の順序を適切に変えて，上記の逐次代入を避けることにより効率のよい解法が得られる．

1)　SOR

従来のSORでは，2次元格子（m×n）の各点を以下の順序で評価する．

```
  1 ―――― 2 ―――― 3 ‥‥‥‥ m
  |        |        |           |
m＋1 ――m＋2 ――m＋3 ‥‥‥‥ 2m
  ⋮        ⋮        ⋮           ⋮
m(n－1)―m(n－1)―m(n－1)‥‥m×n
 ＋1      ＋2      ＋3
```

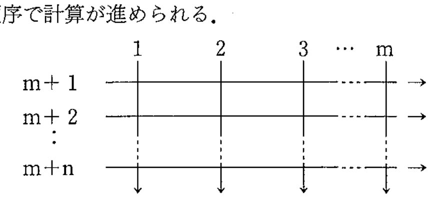
このままsuccessiveに計算を行うと逐次代入が生じる．そこで，計算の順序を入れ替え，

```
1 ―― 2 ―― 3 ―― 4 ―― 5 ―― 1 ‥‥‥‥
|      |      |      |      |      |
4 ―― 5 ―― 1 ―― 2 ―― 3 ―― 4 ‥‥‥‥
|      |      |      |      |      |
2 ―― 3 ―― 4 ―― 5 ―― 1 ―― 2 ‥‥‥‥
⋮      ⋮      ⋮      ⋮      ⋮      ⋮
```

とする．このとき同じ番号の点は隣接せず通常の差分式では互いに参照し合わないため，各番号ごとに計算はベクトル化される．これは，マルチカラー法と呼ばれており，特に番号が1，2のみ（市松模様の配置になる）の場合は適用も容易である．ただし，高次差分のような隣接参照点の多い離散化を行う場合には，上記の5色ないしは，それ以上の色分けが必要となる．この方法では，従来のSORと同等にsuccessiveであることに注意されたい．

2)　ADI－I

本来，ADI法は時間進行に対する離散化法であるが，多次元差分方程式の反復解法としても用いられている．すなわち，1方向のみを陰解法的に（掃き出し法で解く），他の方向を陽解法的に解くステップを，方向を交互に変えて反復する．通常は，各方向に1回ずつ陰解法的に解いて1ステップとしている．この場合，SORと同様に過緩和によって収束が速められる．従来の方法では以下の順序で計算が進められる．



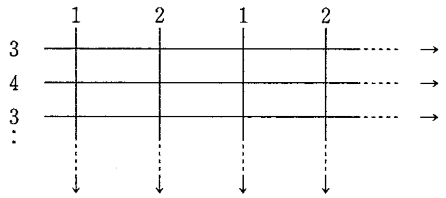
ここで，すべての列，行をsuccessiveに計算すると逐次代入を生じる．そこで，隣り合う列の参照には前のステップの値を用いることにより，列（1，2，3，…m）の計算を並列化する．行の計算についても同様に行う．こ

*東京大学生産技術研究所　第2部

の場合，従来の方法より陽的な解法になる．

3)　ADI－II

前述の方法はベクトル化率は高いが，従来のADI法に比べて反復回数が多くなる欠点がある．そこで，陰解法的な性質を残すために計算順序を入れ替え，



とする．この場合，隣り合う列（行）の参照がないため，計算式はそのままで各番号ごとに並列化される．

この計算法では，列1と2では*successive*の程度が異なるため，収束に偏りを生じることが考えられる．本研究では後に評価する列2には過緩和を行わず（緩和係数1），列1のみ過緩和係数αを最適化して用いた．行3，4についても同様に扱った．

3．計算速度の比較

各解法の比較を以下のような2次元（M×N）の単純な線形方程式系に対して行った．

$$A_P^{I,J}P^{I,J} = A_E^{I,J}P^{I+1,J} + A_W^{I,J}P^{I-1,J} + A_N^{I,J}P^{I,J+1} + A_S^{I,J}P^{I,J-1} + B^{I,J} \quad (I=1,\ M;\ J=1,\ N)$$

$$A_E^{I,J} = A_W^{I,J} = A_N^{I,J} = A_S^{I,J} = 1$$

ただし，$A_E^{M,J}=0$；$A_W^{1,J}=0$

$A_N^{I,N}=0$；$A_S^{I,1}=0$

$$A_P^{I,J} = A_E^{I,J} + A_W^{I,J} + A_N^{I,J} + A_S^{I,J}$$

$$B^{I,J} = \begin{cases} 1 & (I=M/2,\ J=N/2) \\ 0 & (\text{else}) \end{cases}$$

これは，伝達率一定，点熱源，ノイマン境界における熱伝達方程式の等間隔格子での離散式に相当する．格子数は，（10×10）から（40×40）まで変えて計算を行った．以下では従来のSOR，ADIに対し，前節1）2）3）の各手法をSOR－V，ADI－V，ADI－HVと呼ぶ．

1)　スカラー計算速度

まず，マイコン（PC-9800U）を用い（20×20）までの格子で計算を行い，各解法のステップごとの残差の減少を比較した．残差は前もって計算した収束解に対する誤差の最大値として与えた．図1は（10×10）の結果で，横軸に計算時間（実時間），縦軸に残差を示している．SORと同様に，ADIにおいても過緩和をかけることによって収束がかなり速まる．ただし，2，3ステップで打ちきる場合には加速効果は明らかでない．

他の格子数の場合についても，残差$<10^{-4}$になる速度を表1にまとめた．この格子数の範囲においては，ADI－Vを除き，最適な緩和係数のもとでの各手法の計算速度に大きな違いはみられない．

SOR－VをSORと比較すると，緩和係数αは同じ最適値をとり，ステップ数でみた収束速度はほぼ等しい．1ステップあたりの計算時間は数%長くなる．

ADI－V，ADI－HVでは，緩和係数の最適値がADIと異なる．従来のADIでは1.3であるが，ADI－VはSORと同じ値が最適値となる．また，ADI－HVでは番号1，3の列（行）でSORより2に近い値（約1.8）としたときに

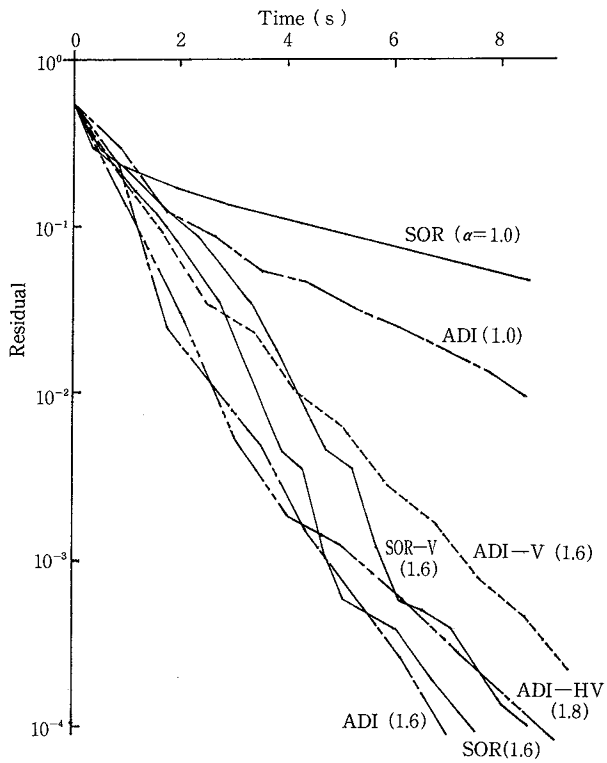


図1　各解法による残差減少の違い

表1　マイコンにおける各解法の速度比較

MESH / METHODS	(10×10) 緩和 α	STEP 数	TIME (S)	(15×15) 緩和 α	STEP 数	TIME (S)	(20×20) 緩和 α	STEP 数	TIME (S)
SOR	1.6	18	7.41	1.7	25	20.2	1.75	33	42
SOR－V	1.6	18	8.02	1.7	25	24.9	1.75	30	48
ADI	1.3	8	6.78	1.3	11	19.4	1.3	15	45
ADI－V	1.6	11	－	1.7	18	29.7	1.75	23	64
ADI－HV	1.8	9	8.22	1.8	11	22.2	1.8	13	46

表2　各機種による計算速度（格子20×20）

METHODS	緩和 α	STEP 数	PC	TIME (S) M680	S820
SOR	1.75	33	42.	2.20 E-2	1.89 E-2
SOR—V	1.75	30	48.	2.23 E-2	0.34 E-2
ADI	1.3	15	45.	2.50 E-2	1.22 E-2
ADI—V	1.75	23	64.	3.52 E-2	0.57 E-2
ADI-HV	1.85	12	46.	2.7　E-2	0.49 E-2

最も速い収束が得られた(番号2，4では1)．ステップ数でみた収束速度は，ADI，ADI—HVがほぼ同じで，ADI—Vはやや遅い．ただし，1ステップあたりの計算時間がADI＜ADI—V＜ADI—HVであるために図1の結果となる．

2)　ベクトル計算結果

次に，ベクトル計算機（HITAC—S820H）により同じプログラムを用いて計算した．比較のため同程度の計算能力をもつ汎用計算機（HITAC—M680）でも同様の計算を行った．スカラー計算の速度については両者に大きな違いがないので，加速率は汎用機の結果を基に評価する．

格子数20×20での残差＜10^{-4}になる速度を表2に示す．マイコンに対して汎用機の計算速度は約1800倍であるが，SOR—Vのみ2000倍以上になっている．これは，配列要素が飛び飛びに参照されるときにマイコンではアクセスの遅れが生じるためと考えられる．よって，大型汎用機ではSORとSOR—Vのステップあたりの計算時間の差は小さい．

ベクトル計算では，計算コードのベクトル化率とベクトル演算部の加速率によって全体の加速率が決まるが，解法により加速率に開きがある．よって，ベクトル計算機の利用を前提とした場合には，解法の速度について加速率を考慮した評価が必要である．

SORの汎用機（M680）における計算時間を基準として，おのおのの解法の基準残差(10^{-4})を得るための計算時間を図2に示す．この図から，ベクトル化による加速率の高い解法の有利さはあきらかである．

格子数40×40では加速率はさらに高くなり，SORに対する速度は図3のようになる．このとき，SOR—Vにおいて，VPU（ベクトル・プロセッサ計算時間）/CPU（全計算時間）の比は約57%，スカラー計算に対する加速率は約25倍であった．また，ベクトル演算部の平均加速率は約36倍と見積もられる．

4．おわりに

行列の反復解法は計算プログラムとして汎用性の高いものの一つであり高速化の利益は大きい．この種のプログラムはライブラリ化されることが望ましく，そのためには多数の実例による検証が必要であろう．本手法のうちマルチカラー法(SOR—V)については実際の流れ場計算プログラムに導入し良好な結果を得ている．

なお，本研究の計算は東大大型計算機センターにおいて行われた．

(1988年5月24日受理)

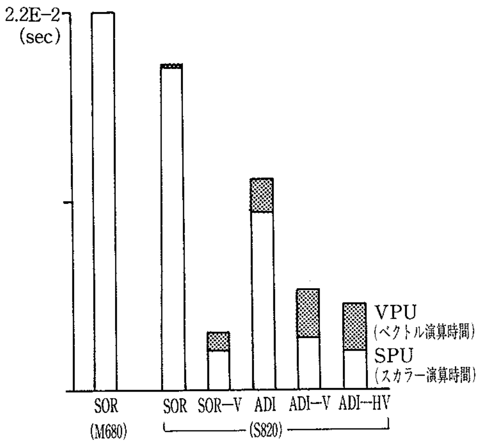


図2　ベクトル計算機における各解法の速度比較（格子20×20）

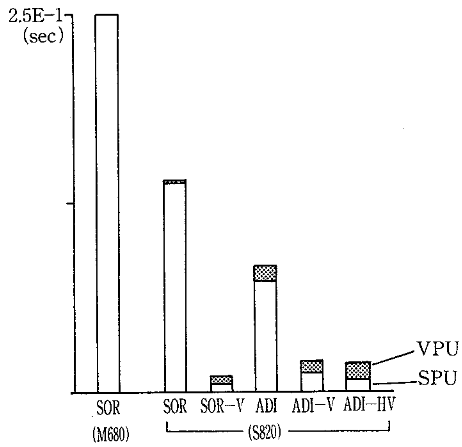


図3　ベクトル計算機における各解法の速度比較（格子40×40）

参考文献

Oyagi, Y. "Use of Multicolor Vectorization of Incomplete LU Preconditioning for the Wilson Fermion on the Lattice" Proceedings, 1st Appi Workshop on Supercomputing, 1987, ISR