数理解析研究所講究録
第514巻 1984年 219-230

対称三項行列の固有値の並列探索

京都大学大型計算機センター
島崎 眞昭 (Masaaki Shimasaki)

1. まえがき

近年超高速計算機が科学・技術の研究に必要不可欠との認識が高まり，超高速計算機に対する関心が強まっている。[1)~4)] 超高速計算機の重要性を示す事例は多々あるが，ここでは，1982年米国NSFの“科学・工学に於ける大規模計算”に関するパネルの報告書，すなわちP. D. Lax委員会のレポート[4)]の付録にある一例を引用しておこう．スリーマイル島の事故後，事故の初期の段階を解析するため，原子炉の計算機シミュレーションが行われ，温度と圧力について，計算値は実測値によく一致したのみならず，他の手段では得難い有用な知見が計算により得られたという。計算には現存の超高速計算機で何時間もかかることが問題で，原子炉運用の現場で，大事故防止のために計算機シミュレーションを実用化するには，高々数分でこの種の計算が完了する必要があり，

現存の超高速機よりさらに少なくとも百倍程度の高速性が必要であるという。

さて超高速計算機を実現する方式は種々研究されているが，現在一般的に実用化されているのは，パイプライン方式のベクトル計算機である。このベクトル計算機は，従来の汎用計算機と性格が異なり，ピーク性能は高いが，その最大性能を引き出して使用するのは必ずしも容易ではないという問題がある。このためには，計算機システムのソフトウェアとして，自動ベクトル化コンパイラが重要で，事実最新のベクトル計算機では自動ベクトル化の範囲が従来のものと比較して拡大され，ベクトル計算機の汎用性が飛躍的に高められたといえる。しかし自動ベクトル化技術はまだ完成したわけでなく，プログラムの少しの変更により，計算時間が大幅に短縮される事例も多い．さらにアルゴリズムにまで目を向けると自動ベクトル化技術だけでは対応し切れない問題もあり，アルゴリズム面での再検討も必要であろう。すなわち使用する計算機の基本的性格が変化するのであるから，その計算機上での各種アルゴリズムの実行性能に関する相対的関係も大きく変化する可能性がある。通常の使用は別として，計算機を限界に近い性能で駆使するには，やはりそれなりに，プログラム上のみならず，解法上も工夫が必要である。先に引用したパ

ネルの結論の提言でも，超高速計算機を効果的に能率よく使用するために必要な数値解析，ソフトウェア，アルゴリズムの研究を強化すること，科学・技術計算のための人材を養成することの必要性が強調されている。我国の大学に於ける本格的な大規模計算の歴史は始まったばかりといえ，今後急速に経験を蓄積してゆかねばならないところである。

ベクトル計算機を効率よく使用するには，基本的にベクトル化率の向上が大切であり，そのために，解法およびプログラムを改良することが必要である。特にプログラム作成面にのみ目を奪われることなく，少し観点を変えて問題をとらえ直し，少し工夫すれば容易にベクトル化率を向上させうる事例は多いと考えられる。本稿では実対称三項行列の固有値問題を採り上げる。この問題に対する従来の手法では，漸化式の形のアルゴリズムが支配的で，ベクトル計算機になじみにくいものであるが，アルゴリズムの"並列化"により，ベクトル計算機との整合性が高まることを示す。

2．実対称行列固有値問題のベクトル計算機との整合性

実対称行列の固有値問題に於て，密行列は Householder 変換によって三重対角化し，その後，2分割法または QL 法（

QR 法)ないしその組合わせで固有値計算する。Householder 変換はその形からベクトル計算機との整合性が本質的に非常によい。実際のサブルーチン作成においては，対称行列を圧縮した形で主記憶に格納する場合も多いが，その場合，ベクトル計算機との整合性を高めるには，プログラム作成上の工夫が必要である。適切なプログラミング上の工夫を行なえばベクトル計算機での高速化が可能である。当然ではあるが，行列の次数が大きいとき効果が大きい。一方 QL 法や 2 分割法は漸化式の形のアルゴリズムで，あまり高速化が望めない。三項行列に対する QR 法では，図 1 に示す様に，最内側ループに於て，ループ中に計算される値を次のループで計算する漸化式の形であり，ベクトル計算機の基本性格である流れ作業的なループの並列処理には本質的になじまない。

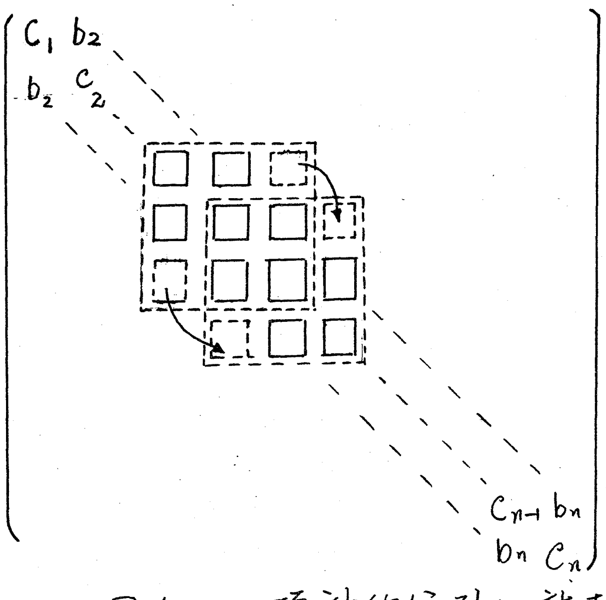
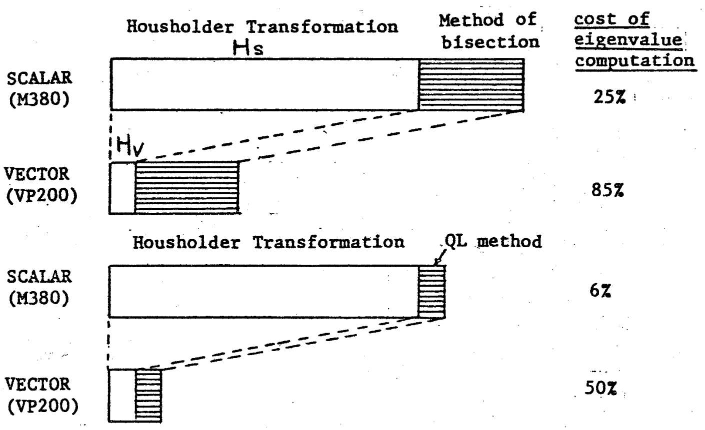


図 1　三項対称行列に対する QR 法の過程

従来の計算機に於ける計算時間でみると，Householder変換の占める割合が圧倒的であるから，従来のアルゴリズムでもHouseholder変換部分の計算時間短縮のおかげで，全体としても，ベクトル計算機では計算時間が短縮される。しかし，計算時間の内訳までみると，従来と比率が大幅に変化していることがわかる。すなわちベクトル計算機上では，三項対称行列の固有値計算時間の全計算時間に占める割合が増加する。また最初から三項対称行列が与えられる場合，ベクトル計算機の利点はあまりないことになる。これが実際にどの程度かというのを見るため，筆者の所属する京都大学大型計算機センターに近く導入されるベクトル計算機VP-100の製造会社富士通(株)にそのVP-200について実測を依頼したので，その結果を図2に示しておく。



全部の固有値を計算
テスト行列
Frank行列 $n=200$
圧縮モードで格納
Hoseholder法
M380：DTRID1
(SSLII)
VP200：DTRID1
(SSLII/VP)
Hs：3030 msec
Hv：186 msec
(富士通 沼津工場測定)

図2　スカラ，ベクトル計算機での計算時間の内訳

3. 実対称三項行列に対する並列固有値探索法

3.1 基本アルゴリズム

図3に示す三項対称行列を考える。Wilkinson等[5]による2分割法のアルゴリズムの中心的部分は次の形で表わされる。

$$A=\begin{bmatrix} c_1 & b_2 & & & \\ b_2 & c_2 & b_3 & & \mathbf{0} \\ & b_3 & c_3 & \ddots & \\ & \mathbf{0} & \ddots & c_{n-1} & b_n \\ & & & b_n & c_n \end{bmatrix}$$

図3 三項対称行列

$$b_1 = 0, \quad q_0 = 1$$

$$q_i(\lambda) = \begin{cases} (c_i-\lambda) - b_i^2/q_{i-1}(\lambda), & \text{for } q_{i-1}(\lambda)\neq 0 \\ (c_i-\lambda) - abs(b_i)/relfeh, & \text{for } q_{i-1}(\lambda)=0 \end{cases} \quad i=1,\cdots,n \quad (1)$$

ただし $relfeh$ は使用計算機上で $1+relfeh > 1$ となる最小正数。$q_i(\lambda)$ のうち負のものの個数が λより小さい固有値の個数である。この部分の FORTRAN 77 プログラムは次のようになる。$\lambda = X1$ での $q_i(\lambda)$ の負のものの個数を A として求める。

```
      INTEGER A
      A=0
      Q=1.0
      DO 10 I=1,N
         IF(Q .NE. 0.0) THEN
             Q=C(I)-X1-BETA(I)/Q
         ELSE
             Q=C(I)-X1-ABS(B(I))/RELFEH
         END IF
         IF(Q .LT. 0.0) A=A+1
   10 CONTINUE
```

ただし BETA(I) には b_i^2 が入っているとする。

式(1)において$g_i(\lambda)$の計算に$g_{i-1}(\lambda)$の計算結果を必要とする漸化式の形なので，ループの並列処理を行うベクトル計算には適さず，最も計算コストの高いこのループがベクトル化されない。

複数の固有値を計算する場合，通常固有値を一つずつ"逐次"計算してゆくので，求める固有値の数だけこのループ計算が行なわれる．すなわち２重ループが形成されている。各Sturm列計算は独立なので，この"逐次"固有値計算を"並列"固有値計算に切り替える。いわば２重ループで内側ループと外側ループを入れ替える。すると内側ループは漸化式の形でないのでベクトル化できる。複数点におけるSturm列のベクトル計算について文献[6]にもその可能性が言及されているのを最近知った．しかし計算例などは示されていない。

並列固有値探索は次の様に行う。

n次の対称三項行列Aの固有値λ_iに対し，繰り返しのステップsで次式を満たす$x_i^{(s)}$，$y_i^{(s)}$が与えられるとする。

$$x_i^{(s)} \leqq \lambda_i < y_i^{(s)}, \quad i=1,...,n \qquad (2)$$

$s=0$の初期状態では，$x_i^{(0)}=-\|A\|_\infty$，$y_i^{(0)}=\|A\|_\infty$とすればよい。$x_i^{(s)}=\cdots=x_{i+m_i-1}^{(s)}$，$y_i^{(s)}=y_{i+1}^{(s)}=\cdots=y_{i+m_i-1}^{(s)}$のとき$[x_i^{(s)}, y_i^{(s)})$に$m_i$個の固有値がある。このとき$m_{i+1}=\cdots=m_{i+m_i-1}=0$とする。$m_i \neq 0$のとき$[x_i^{(s)}, y_i^{(s)})$を$m_i \times p$

分割する。pはパラメータである。各点でスツルム列を計算し，各点の値より小さい固有値の個数を求め，λ_iを囲む新しい区間$[x_i^{(s+1)}, y_i^{(s+1)})$を決定する。新しい$m_i$を計算する。区間巾が十分小さくなるまで分割を続ける。

複数個の点でqを計算する部分のプログラムを示そう。点X(K)でQ(K)，A(K)を計算するとする。

```
      DO 10 K=1,M
         A(K)=0
         Q(K)=1.0
   10 CONTINUE
      DO 30 I=1,N
      DO 20 K=1,M
         IF(Q(K) .NE. 0.0) THEN
            Q(K)=C(I)-X(K)-BETA(I)/Q(K)
         ELSE
            Q(K)=C(I)-X(K)-ABS(B(I))/RELFEH
         END IF
         IF(Q(K) .LT. 0.0) A(K)=A(K)+1
   20 CONTINUE
   30 CONTINUE
```

20のループ内にIF文が2つあるが，これは次の様に一つにまとめた方がよい。これは富士通(株)三上氏による。

```
      DO 5 I=1,N
         TEMP(I)=ABS(B(I))*RELFEH
    5 CONTINUE
      DO 10 K=1,M
         A(K)=0
         Q(K)=1.0
   10 CONTINUE
      DO 30 I=1,N
      DO 20 k=1,M
         Q(K)=C(I)-X(K)-BETA(I)/Q(K)
         IF(Q(K)) 16,17,20
   16    A(K)=A(K)+1
         GO TO 20
   17    Q(K)=TEMP(I+1)
   20 CONTINUE
   30 CONTINUE
```

3.2 パラメータ p について

ベクトル計算機上での計算時間の見積は容易でないが，ループの場合，一般にループの立上がり時間 t_s とループ長に比例する部分との和になる。r 個の固有値を並列 p 分割法で求める場合 $r(p-1)$ 個の点の Sturm 列計算が必要で，ループ長は $r(p-1)$ となる。このループの計算時間が $r(p-1)t_p+t_s$ で近似できるとする。p 分割法では，分割毎に区間巾は $1/p$ ずつ縮小されるので，収束までに必要な繰り返し計算の回数は $1/l_n p$ に比例する。ゆえにループ部分の全計算時間は $rt_p\{(p-1)+\frac{1}{r}\frac{t_s}{t_p}\}/l_n p$ に比例すると考えられる。$f(t)=\{(t-1)+\alpha\}/l_n t$ のグラフを図4に示す。

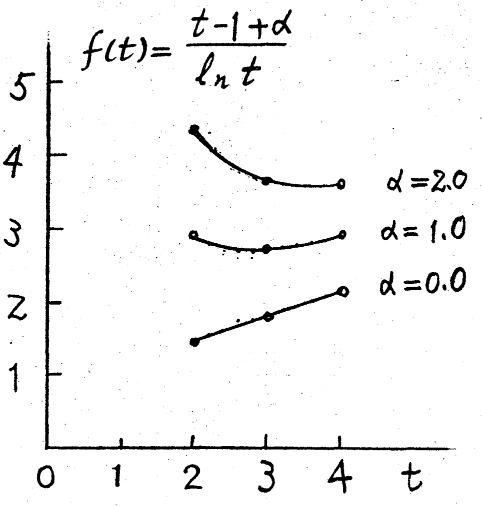


図4 $f(t)=\{(t-1)+\alpha\}/l_n t$ のグラフ

汎用機では $t_s=0$ で，計算時間は $(p-1)/l_n p$ に比例し，$p=2$ が最適である。ベクトル計算機で $\frac{1}{r}\frac{t_s}{t_p}$ が1よりかなり大きい場合には $p=2$ は最適でなくなる。t_s/t_p は計算機のハードウェアに依存する値である。求める固有値の個数 r が十分大きいと $\frac{1}{r}\frac{t_s}{t_p}$ は小さくなるので，$p=2$ が最適になる。$p=2$ の場合，区間分割後，固有値をはさむ新しい区間を決定する部分のプログラムも簡単になる。

4. 数値実験例

並列2分割法($p=2$)でn次対称三項行列の全固有値を計算し，他の方法と比較した。比較の基準としては，スカラー計算機上での2分割法の計算時間を採用した。(図5)

テスト行列は

$c_i = i^4$, $1 \leq i \leq n$

$b_i = i-1$, $1 < i \leq n$

である。約$n=140$のところで，並列2分割法は全固有値を計算する場合でも，QL法を性能的に越えている。

なお本結果は富士通(株)沼津工場で実行・計測されたものである。

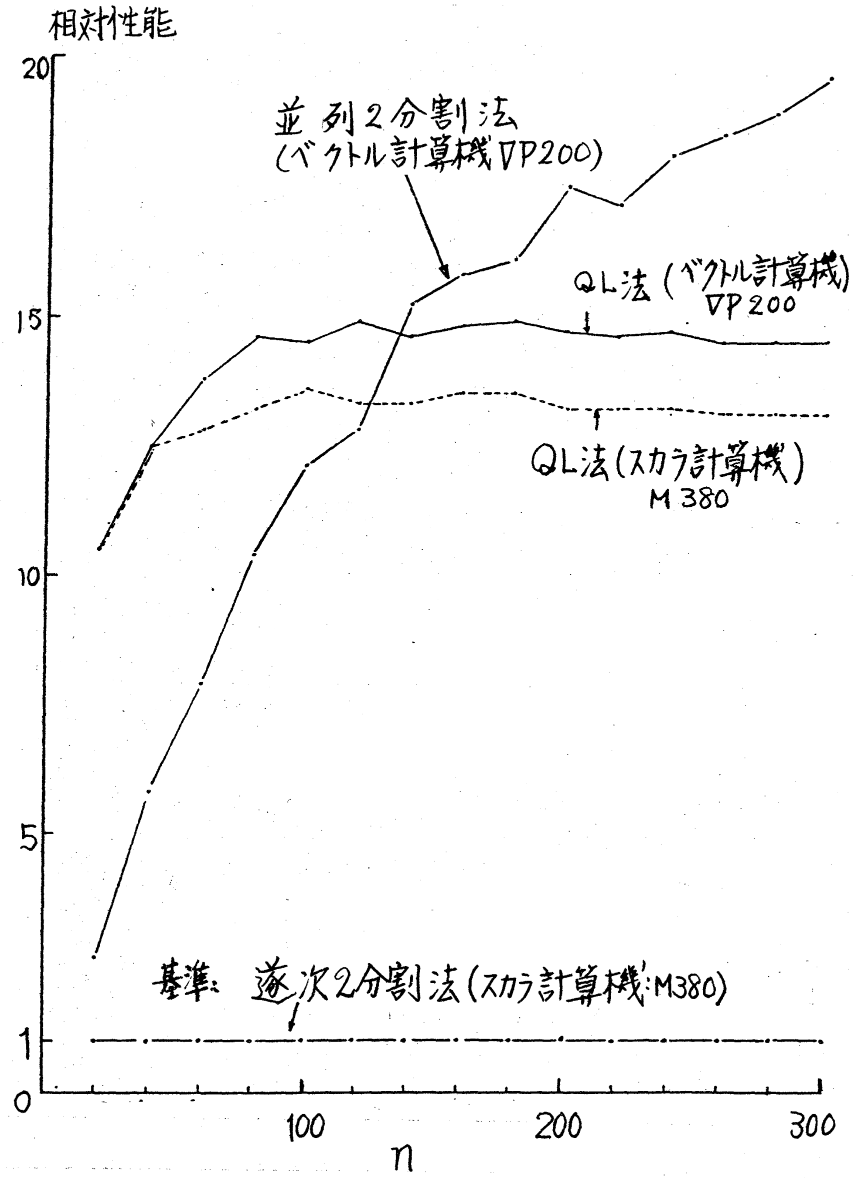


図5 並列2分割法と他の方法との性能比較

5. むすび

対称三項行列の固有値問題はベクトル計算機と

の整合性が必ずしもよくないが，並列2分割法はQL法を性能的に越えうることがわかった。ベクトル計算機との整合性の悪い問題の場合，“アルゴリズムの並列化”はベクトル計算機利用のための一つの有用な指針と考えられる。

謝辞　VP-200 でのテスト実行の労をとられた富士通(株)関係者に深謝します。

参考文献

(1) 特集：スーパコンピュータの応用，情報処理，Vol. 22，No12 1981.

(2) 特集：スーパコンピュータ，日経エレクトロニクス，1983年4月11日号，No. 314，pp. 105－184.

(3) 唐木幸比古：スーパーコンピューターの概観，核融合研究，第49巻，第4号，pp. 319－338，1983.

(4) report of the panel on Large Scale Computing in Science and Engineering (P.D. Lax: Chairman), NSF, 1982.

(5) W. Barth, R.S. Martin, J.H. Wilkinson: Calculation of the Eigenvalues of a Symmetric Tridiagonal Matrix by the Method of Bisection, in J.H. Wilkinson, C. Reinsch: "Linear Algebra", Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, New York, 1971, pp. 249－256.

(16) 後　保範，西方政春，長堀文子：スーパコンピュータ"HITAC S-810"による行列計算，日立評論，Vol. 65, No. 8, pp.　　　　, 1983.