局所的な不完全コレスキー分解前処理を用いた陰的マルチグリッド法

数理情報学専攻 48096223　塚本昌也
指導教員　杉原正顯 教授

1　はじめに

大規模な連立一次方程式の高速解法としてマルチグリッド法 [1] がある．一方，マルチグリッド法の拡張として陰的マルチグリッド法 [2] が提案されており，これは様々な前処理と併用可能であるという性質があるが，まだ具体的に前処理を用いた研究は行われていない．

代表的な前処理として不完全コレスキー分解があるが，特にブロック毎に局所的な不完全コレスキー分解を行うことを提案し，その性質を調べた．

2　陰的マルチグリッド法

ある物理的な領域を対象とした偏微分方程式を差分法や有限要素法で離散化した連立一次方程式を解く際，ガウス・ザイデル法などの定常反復法は，誤差のうち格子幅と同程度の波長をもつ成分を高速に減衰させるが，長波長成分の減衰が遅いという性質がある．そこで，格子幅の異なる複数の格子を構築することであらゆる波長の誤差成分を効率良く減衰させるのがマルチグリッド法である．簡単のためレベル 2，すなわち 2 段階のみの格子を用いたマルチグリッド法について述べると，まず元の連立一次方程式

$$A^1\boldsymbol{x}^1 = \boldsymbol{b}^1$$

をガウス・ザイデル法などにより緩和し，残差ノルムの制限補間

$$\boldsymbol{b}^2 = R(\boldsymbol{b}^1 - A^1\boldsymbol{x}^1)$$

を用いて粗い格子における連立一次方程式を構築する．

$$A^2\boldsymbol{x}^2 = \boldsymbol{b}^2.$$

さらにこれをガウス・ザイデル法などで緩和して，延長補間

$$\boldsymbol{x}^1 \leftarrow \boldsymbol{x}^1 + P\boldsymbol{x}^2$$

により解を修正する．

一方，陰的マルチグリッド法では，粗さのレベル毎の方程式を制限補間・延長補間の効果を含むように統合化してひとつの大きな連立一次方程式を構築し，これを反復法などで解く．レベル 2 の場合，統合化された連立一次方程式は次のように書ける．

$$\begin{pmatrix} A^1 & A^1P \\ RA^1 & A^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{x}^1 \\ \boldsymbol{x}^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{b}^1 \\ R\boldsymbol{b}^1 \end{pmatrix}.$$

制限補間・延長補間の効果を含んだままひとつの連立一次方程式に帰着することで，不完全コレスキー分解をはじめとする幅広い前処理手法を併用することができる．

3　局所的な不完全コレスキー分解

統合化された方程式の係数行列全体に対して不完全コレスキー分解を行うと，ゼロ固有値を多く含むため計算が不安定であることに加え，たとえフィルインレベル 1 でも大量の非零要素が発生してしまうという問題点がある．統合化された方程式の係数行列はブロック構造を持ち，その対角ブロック行列は，通常のマルチグリッド法における各格子レベル毎の係数行列である．本手法では，これら対角ブロック部分のみに対してそれぞれ独立に不完全コレスキー分解を行い，非対角ブロック行列を無視した前処理を行った．

4　数値実験

4.1　テスト問題と計算手法

次のような正方形領域上の 2 次元ポアソン方程式を，128×128 個のメッシュに基づいて差分法で離散化した問題について数値実験を行った．

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(\lambda\frac{\partial}{\partial x}u\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\lambda\frac{\partial}{\partial y}u\right) = f,$$

$$(x, y) \in (0, 1) \times (0, 1).$$

係数 λ は均質・不均質両方の場合を調べ，不均質な係数としては地質統計学的手法により生成した数値を用いた．統合化された方程式に対し，対称ガウス・ザイデル法 1 反復を前処理とする共役勾配法 (SGS-IMGCG)，および前章で述べた局所的な不完全コレスキー分解を前処理とする共役勾配法 (IC(i)-IMGCG，i はフィルインレベル) を用いた．

4.2　数値実験結果

係数が均質，不均質のそれぞれ場合について，残差ノルムが初期値の 10^{-10} 倍になるまでに要した反復回数および浮動小数点演算回数を表 1，表 2 に，浮動小数点演算回数に対する残差ノルムの推移の例を図 1，図 2 に示す．

表 1. 収束に要した反復回数と浮動小数点演算回数 (係数分布:一様).

	SGS-IMGCG		IC(0)-IMGCG		IC(1)-IMGCG		IC(2)-IMGCG	
level	iters	FLOPs	iters	FLOPs	iters	FLOPs	iters	FLOPs
2	49	1.04E+08	50	5.73E+07	32	5.38E+07	21	6.74E+07
3	17	8.74E+07	30	6.76E+07	22	6.82E+07	19	1.10E+08
4	13	1.42E+08	24	1.03E+08	22	1.16E+08	20	1.62E+08
5	10	2.04E+08	25	1.85E+08	23	1.93E+08	22	2.44E+08
6	10	2.47E+08	26	2.31E+08	26	2.55E+08	24	2.97E+08
7	9	2.33E+08	28	2.58E+08	27	2.74E+08	25	3.17E+08

表 2. 収束に要した反復回数と浮動小数点演算回数 (係数分布:地質統計学的).

	SGS-IMGCG		IC(0)-IMGCG		IC(1)-IMGCG		IC(2)-IMGCG	
level	iters	FLOPs	iters	FLOPs	iters	FLOPs	iters	FLOPs
2	162	3.43E+08	206	2.32E+08	160	2.57E+08	101	2.75E+08
3	120	6.07E+08	215	4.70E+08	178	5.05E+08	116	5.11E+08
4	119	1.28E+09	236	9.74E+08	198	9.58E+08	130	8.40E+08
5	121	2.39E+09	-	-	-	-	-	-
6	119	2.86E+09	-	-	-	-	-	-
7	119	2.98E+09	-	-	-	-	-	-

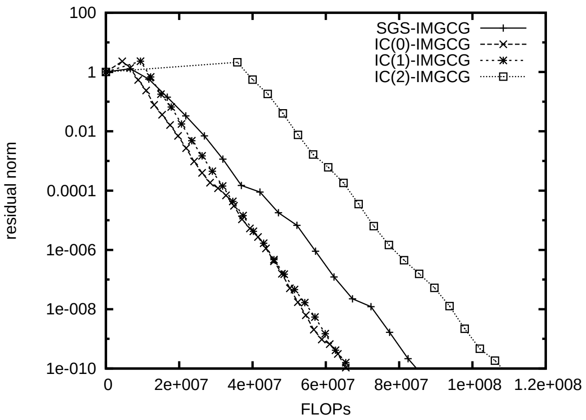

図 1. 残差ノルムの推移 (係数分布:一様, マルチグリッド法のレベル:3).

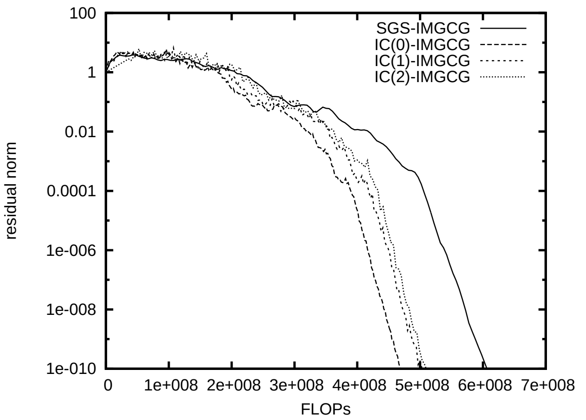

図 2. 残差ノルムの推移 (係数分布:地質統計学的, マルチグリッド法のレベル:3).

5 考察とまとめ

浮動小数点演算回数で比較すると，問題サイズやマルチグリッド法の粗さレベルが同じであれば，従来の陰的マルチグリッド法 (SGS-IMGCG) より IC(0)-IMGCG，IC(1)-IMGCG が高速であるという結果が得られた．係数の不均質性が強い問題ではフィルインレベルの高い IC(2)-IMGCG も高速となった．これはフィルインレベルの高い不完全コレスキー分解前処理が，直接法としての性格が比較的強く，不均質性に強いからであると思われる．

従来の陰的マルチグリッド法はマルチグリッド法のレベルを高くとるほど反復回数が減る．これは定常反復法の誤差の高周波成分の減衰が速いことを考えれば，マルチグリッド法として自然な性質である．不完全コレスキー分解前処理付き共役勾配法に関しては，フィルインレベル 0 の場合は少しその傾向はあるが，フィルインレベル 1，2 では逆にマルチグリッド法のレベルを高くするほど反復回数が増えることも多い．不完全コレスキー分解前処理は，誤差の減衰のさせかたについては定常反復法のように物理的に分かりやすい性質があるわけではない．そのことが，マルチグリッド法のレベルを高くすることが必ずしも反復回数の減少につながらないことの一因であると考えられる [4].

前処理の如何に関わらず，陰的マルチグリッド法は統合化された連立一次方程式のサイズが大きいために，通常の陰的でないマルチグリッド法と比較すると計算量は大きくなる．一方，統合化された方程式に対する任意の前処理を元のサイズの方程式に対する前処理に帰着する，folded preconditioner という手法が提案されている [3]．これを用いた場合でも不完全コレスキー分解前処理の性質は受け継がれ，本研究で得られた知見が生かせると考えられる．

参考文献

[1] W. L. Briggs, V. E. Henson, and S. F. McCormick: *A Multigrid Tutorial Second Edition*, SIAM, 2000.

[2] 岩下武史, 美舩健, 島崎眞昭: 新しいマルチグリッド解法: 陰的マルチグリッド法の基礎概念, 情報処理学会論文誌: コンピューティングシステム, Vol. 48 No. SIG 8(ACS 18), pp.1–10, 2007.

[3] T. Mifune, Y. Takahashi, and T. Iwashita: Folded preconditioner: A new class of preconditioners for Krylov subspace methods to solve redundancy-reduced linear systems of equations, *IEEE Transactions on Magnetics*, vol. 45, no. 5, pp. 2068–2075, 2009.

[4] 塚本昌也，中島研吾，杉原正顯: 局所的な不完全コレスキー分解前処理を用いた陰的マルチグリッド法, 2011 年ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム (HPCS2011), P2–3, 2011.