ハイパフォーマンスコンピューティング　60－4
（1996．3．4）

マルチグリッド前処理付Bi-CGSTAB法

前田一穂　小柳義夫[†]

差分法や有限要素法によって移流拡散方程式を離散化すると係数行列が非対称で疎である連立一次方程式ができる．この解法として修正不完全ＬＵ分解前処理付Bi-CGSTAB法が広く用いられているが，問題サイズが大きくなるに従って収束が遅くなる．

本研究ではマルチグリッド前処理を前処理付Bi-CGSTAB(MGBi-CGSTAB)法に適用した．

非一様メッシュを用いた有限要素法で離散化した非矩形領域の問題に対してMGBi-CGSTAB法を適用した．MGBi-CGSTAB法の収束は問題サイズによらないことがわかった．また長波長成分に見合ったcoarseningを用いることにより収束が速まることがわかった．さらに，多くの反復を必要とする問題に対してW-cycleが有効であることがわかった．

Multigrid Preconditioned Bi-CGSTAB Method

Kazuho Maeda and Yoshio Oyanagi[†]

A discretization of convection-diffusion equation with a finite difference method or a finite element method produces a system of linear equations where the coefficient matrix is nonsymmetric and sparse. Though the Modified Incomplete LU preconditioned BiConjugate Gradient Stabilized (Bi-CGSTAB) method is widely used to solve such a problem, it converges slower as the problem size enlarges.

In this paper, the multigrid preconditioner is applied to the preconditioned Bi-CGSTAB (MGBi-CGSTAB) method.

The MGBi-CGSTAB method is applied to non-rectangular problems discretized with a irregular finite element method. It is shown that it converges independently of the problem size. It is also shown that the coarsening well-matched with the long wavelength component of the solution make the convergence fast. Moreover, it is shown that the W-cycle is effective in the problems requiring many iterations to solve.

1. はじめに

非対称連立一次方程式の主な解法の一つとしてして前処理付Bi-CGSTAB法がある．この前処理としては修正不完全LU(MILU)分解が広く用いられているが，問題サイズが大きくなるにつれて収束が悪化するという欠点がある．本研究ではマルチグリッド(MG)法を前処理として用いるマルチグリッド前処理付Bi-CGSTAB(MGBi-CGSTAB)法を移流拡散方程式に適用し，数値実験を行なった．今までに行なわれた同様の研究である1),2)では矩形領域を差分法で離散化していたが，本研究では非矩形領域の問題をメッシュサイズが一様でない要素分割を用いて有限要素法で離散化した．そのような問題に対してもMGBi-CGSTAB法の収束は問題サイズによらないことが分かった．また，通常のcoarseningでは長波長成分の収束が十分でないような問題では，coarseningを工夫することにより速い収束が得られることが分かった．

† 東京大学理学部
Faculty of science, University of Tokyo

2. MGBi-CGSTAB法

前処理付Bi-CGSTAB法は次のように表される．

$p = r = r_0 = b - Ax$
$\mu_1 = (r_0, r)$
while($\| r \| > \varepsilon \| b \|$)do
　$\hat{p} = M^{-1}p$
　$v = A\hat{p}$
　$\alpha = \mu_1/(r_0, v)$
　$s = r - \alpha v$
　$\hat{s} = M^{-1}s$
　$t = A\hat{s}$
　$\omega = (t, s)/(t, t)$
　$x = x + \alpha\hat{p} + \omega\hat{s}$
　$r = s - \omega t$
　$\mu_2 = u_1$
　$\mu_1 = (r_0, r)$
　$\beta = (\mu_1\alpha)/(\mu_2\omega)$

表1　実験1の結果

size(# of equations)		32(4817)		64(18117)		128(70253)	
method	mg type	#iter	time(s)	#iter	time(s)	#iter	time(s)
MG Bi-CGSTAB	V-cycle/DCA	10	3.2	11	14.4	12	68.0
	V-cycle/GCA	10	2.8	11	13.4	11	58.9
	W-cycle/DCA	6	2.9	6	12.9	6	57.7
	W-cycle/GCA	6	2.6	6	11.6	5	45.5
MG	W-cycle/DCA	23	4.6	20	18.3	18	77.5
	W-cycle/GCA	21	4.0	19	16.2	18	71.6
MILUBi-CGSTAB		61	4.9	117	41.4	237	335.75

$$p = r + \beta(p - \omega v)$$

一反復あたり二回出てくる M^{-1} が前処理である．この前処理として MG 法を用いるのが MGBi-CGSTAB 法である．MG 法は様々なグリッド上で方程式を解いて長波長成分を高速に収束させる方法であり，次のように表される．

$MG(u,\ f,\ k,\ \gamma)$
　if$(k = 1)$then
　　$S(u,\ L_1,\ f,\ \cdot)$
　else
　　$S(u,\ L_k,\ f,\ \nu_1)$
　　$r = f - L_k u$
　　$u^{k-1} = 0$
　　for　$i = 1,\ \gamma$
　　　$MG(u^{k-1},\ R_k r,\ k-1,\ \gamma)$
　　$u = u + P^k u^{k-1}$
　　$S(u,\ L_k,\ f,\ \nu_2)$

ここで $\gamma = 1$ のとき V-cycle，$\gamma = 2$ のとき W-cycle と呼ばれる．$L_1 \cdots L_{n-1}$ は粗いグリッド上での係数行列であるが，この生成の方法には次の 2 種類がある．

- GCA: $L_{k-1} = R_k L_k P_k$
- DCA: 粗いグリッド上で元の方程式を離散化

3. 数値実験

例題として以下のような定常状態の二次元移流拡散方程式を有限要素法で離散化したものを考える．

$$\mathrm{div}(-k(x,y)\nabla u + b(x,y)u) = f(x,y)$$

$$\text{in } \Omega \subset R^2 \text{ with } \begin{cases} u = 0 & \text{on} \quad \Gamma_1 \\ \frac{\partial u}{\partial n} = 0 & \text{on} \quad \Gamma_2 \end{cases}$$

ここで $\Gamma_1 \cup \Gamma_2$ は領域 Ω の境界であり，Γ_1 上ではディレクレ条件を，Γ_2 上ではノイマン条件を満たす．領域 Ω は正 n 角形であり，各辺はおのおの Γ_1, Γ_2 のどちらかに属す．有限要素としては三角形のみを許すものとした．

各々の実験について次の各解法を比較した．

- MGBi-CGSTAB 法
  - V-cycle/DCA
  - V-cycle/GCA
  - W-cycle/DCA
  - W-cycle/GCA
- MG 法
  - W-cycle/DCA
  - W-cycle/GCA
- MILUBi-CGSTAB 法 ($\alpha = 0.9$)

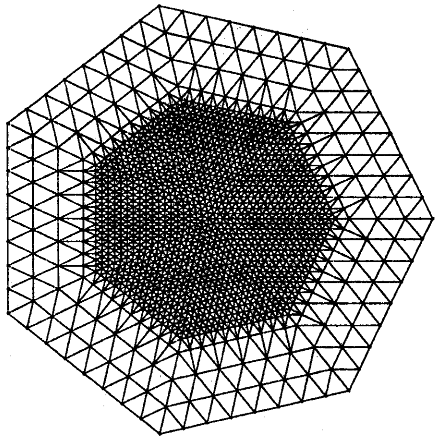

図1　要素分割（実験1）

V-cycle の MG 法はすべての問題について非常に収束が遅かったので比較の対象には入れなかった．収束条件は相対残差が 10^{-8} 未満とした．時間は前処理生成時間＋反復計算時間であり，SPARC Station 20 上で測定した．

3.1　実験 1

ディレクレ境界に囲まれた正7角形の領域を図図1（右）のように要素分割した問題に対して各解法を適用した．中央部の要素は他部の 4 倍の細かさになっている．拡散係数，ソース項は図2である．問題領域の中心を原点，各頂点との距離を 0.5 とすると，流れは

$$b = (16(1 - 4(y - 0.5)^2), 16(1 - (x - 0.7)^2))$$

である．

最初の 2 回の coarsening は細かい部分だけに行ない，その後は全体に対して一様に行なうものとする．

結果は表1である．MILUBi-CGSTAB 法が問題サイズが大きくなるにつれて収束が悪化しているのに対して，MG 法，MGBi-CGSTAB 法は問題サイズが大

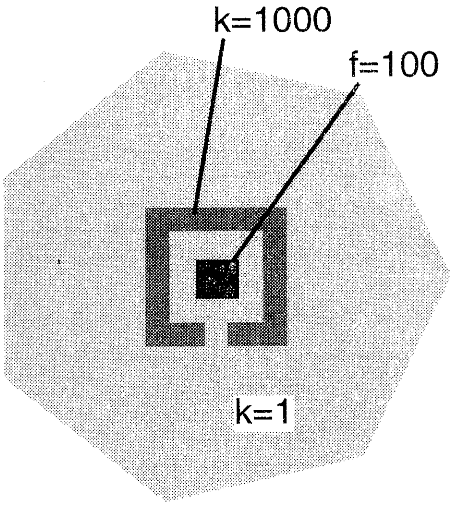

図2　拡散係数及びソース項（実験 1）

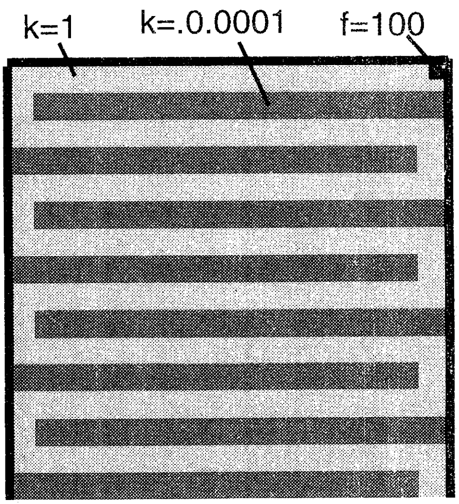

図3　拡散係数とソース項（実験 2）

きくなることによる収束の悪化が見られない．また V-cycle を用いた MG 法の収束が非常に遅い（500 反復程度）のに対して，MGBi-CGSTAB 法では V-cycle でも W-cycle とさして変わらない収束を得た．

3.2　実　験　2

図 3のような拡散係数及びソースである正方領域の問題に対して各解法を適用した．流れは図 4のようなものが，かすかに流れているものとする．（セル・ペクレ数が 10^{-5} 程度）下辺がディレクレ条件，他辺がノイマン条件である．このような問題を下半分が 64 × 32 の一様なメッシュ，上半分が 128 × 64 の一様なメッシュであるような要素分割で離散化した．

ここで通常の coarsening(C1) として，最初の一回だけ上半分を coarsening，その後は standard coarsening を繰り返すものを考える．

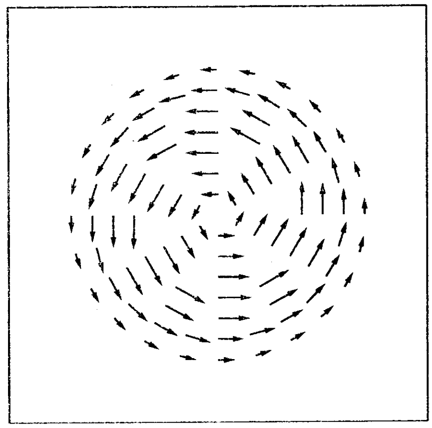

図4　流れ（実験 2,3,4）

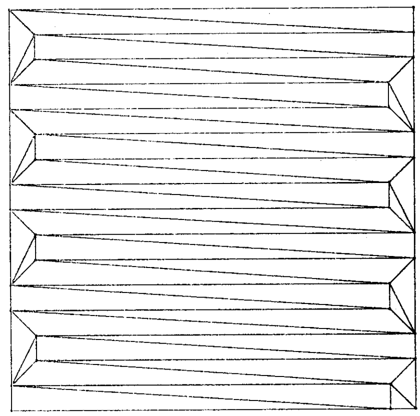

図5　(C2) の最も粗いグリッド

この問題では，解の長波長成分は拡散係数の大きい部分に沿って存在すると思われる．そこで，通常の coarsening(C1) に加えて，次の 3 種類の coarsening を MG 法，MGBi-CGSTAB 法に適用し，比較した．いずれも 16 × 16 メッシュまで通常の coarsening(C1) を行なうものとする．

- (C2) もっとも粗いグリッドは図5
- (C3) もっとも粗いグリッドは図6
- (C4) 16 × 16 メッシュから横方向に semi-coarsening を行ない，16 × 1 メッシュに，そののち縦方向に semi-coarsening を行ない，最も粗いグリッドは 1 × 1 メッシュ

結果は表2である．MGBi-CGSTAB 法では粗いグリッドを長波長成分に沿って生成することが効果的であることが分かる．その中でも (C4) が最も速い収束を示した．これを用いた場合，MG 法でもやはり速い収束を示した．

3.3　実　験　3

拡散係数とソース項が図7であり，他の条件が実験

表2　実験2の結果

coarsening		(C1)		(C2)		(C3)		(C4)	
method	mg type	#iter	time(s)	#iter	time(s)	#iter	time(s)	#iter	time(s)
MG Bi-CGSTAB	V-cycle/DCA	33	16.7	25	13.1	25	12.7	21	11.1
	V-cycle/GCA	33	16.0	21	10.1	22	11.0	18	9.5
	W-cycle/DCA	13	10.4	6	6.2	6	6.7	4	5.7
	W-cycle/GCA	13	9.5	6	5.7	6	5.9	4	5.2
MG	W-cycle/DCA	149	43.8	233	80.4	243	89.8	11	7.3
	W-cycle/GCA	149	44.2	164	63.0	192	78.6	10	5.9
MILUBi-CGSTAB		225	35.6						

表3　実験3の結果

coarsening		(C1)		(C5)		(C6)	
method	mg type	#iter	time(s)	#iter	time(s)	#iter	time(s)
MG Bi-CGSTAB	V-cycle/DCA	27	13.8	20	10.9	17	9.9
	V-cycle/GCA	27	12.8	18	9.2	15	7.8
	W-cycle/DCA	11	8.8	5	5.8	5	7.0
	W-cycle/GCA	11	8.0	5	4.9	5	6.2
MG	W-cycle/DCA	467	133.2	100	37.2	40	20.3
	W-cycle/GCA	467	135.0	75	29.7	36	19.1
MILUBi-CGSTAB		200	31.8				

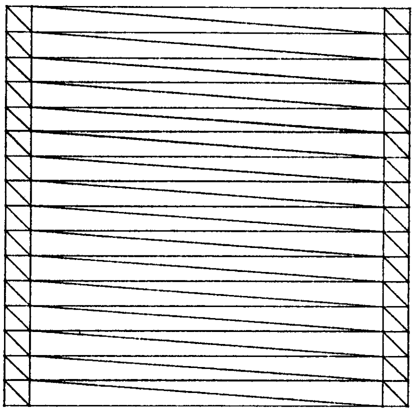

図6　(C3)の最も粗いグリッド

2と同一ある問題について各解法を比較した．coarsening は通常のもの(C1)と次の2つを比較した．実験2と同様にメッシュが 16 × 16 になるまでは通常の coarsening を行なうものとする．

- (C5) もっとも粗いグリッドは図8
- (C6) 16 × 16 メッシュから図9まで coarsening を行ない，そののち最も粗いグリッドが直角二等辺三角形を4つ組み合わせたものになるまで coarsening を行なう

結果は**表3**である．coarsening が(C5)と(C6)のとき DCA が GCA よりも収束が遅いのは粗いグリッド上の係数行列の M 行列性が崩れているからだと思われる．通常の coarsening では MG 法が非常に収束が遅くなるのに対して，MGBi-CGSTAB 法はさほどでもない．この問題の場合は MG 法，MGBi-CGSTAB 法の

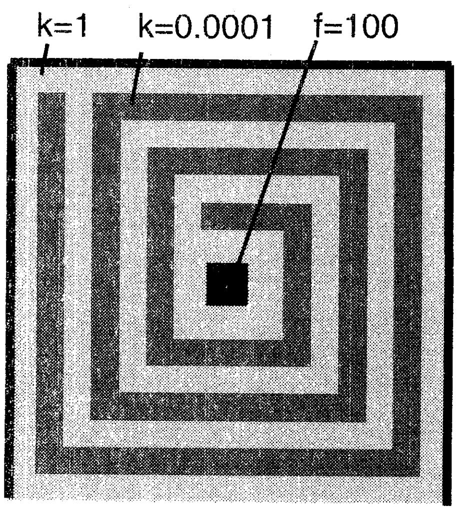

図7　拡散係数とソース項（実験3）

両方に対して coarsening の変更が効果的であり，特に(C6)が最も効果的であった．

実験2と実験3から，粗いグリッドを拡散係数に合わせて構成することが収束速度の向上に効果的であることが分かった．その際には拡散係数にきっちり合わせて最も粗いグリッドを作るよりも，できるだけ粗いグリッドまで構成できるようにした方が良いと思われる．

3.4 実　験　4

拡散係数とソース項が図10であり，他の条件が実験2と同一である問題について各解法を比較した．coarsening は通常のもの(C1)と次のものを比較した．32 × 32 メッシュまでは(C1)と同様の coarsening を行なうものとする．

表4 実験4の結果

coarsening		(C1)		(C4)'	
method	mg type	#iter	time(s)	#iter	time(s)
MG Bi-CGSTAB	V-cycle/DCA	92	46.5	60	30.8
	V-cycle/GCA	86	40.4	52	24.8
	W-cycle/DCA	45	30.8	7	13.6
	W-cycle/GCA	46	32.3	7	13.4
MG	W-cycle/DCA	>500		33	27.6
	W-cycle/GCA	>500		31	27.8
MILUBi-CGSTAB		488	77.0		

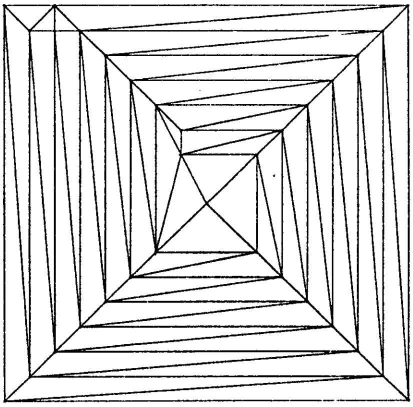

図8 (C5)の最も粗いグリッド

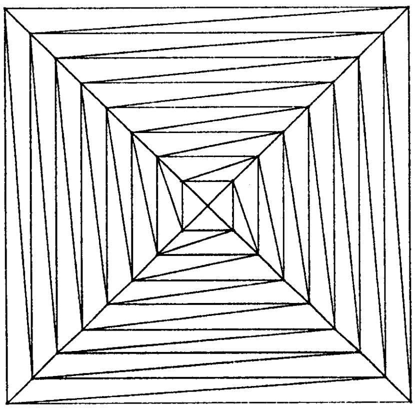

図9 (C6)の中途のグリッド

- (C4)' 32 × 32 メッシュから横方向に semi-coarsening を行ない, 32 × 1 メッシュへ, そののち縦方向に semi-coarsening を行ない, 最も粗いものは 1 × 1 メッシュ

結果は表4である. 通常の coarsening では MG 法では非常に収束が遅くなった. それに対して, MGBi-CGSTAB 法では V-cycle でもそれほど収束は遅くならなかった. それに対して, coarsening を工夫した場合, どの解法もかなりの収束速度の改善が見られた. しかし, 拡散係数が複雑になった影響はいずれも MILUBi-CGSTAB 法より大きかった.

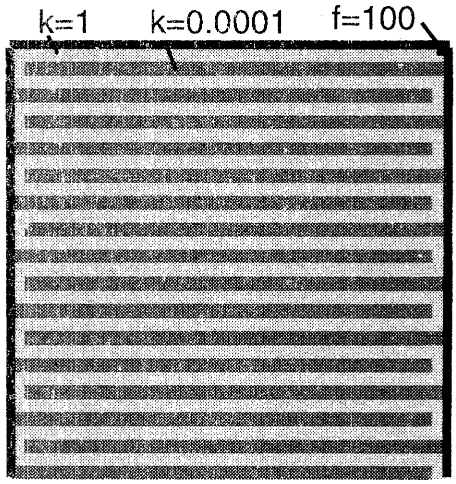

図10 拡散係数とソース項(実験4)

3.5 MGCGS との比較

Bi-CGSTAB 法は自乗共役勾配法(CGS)法に比べて収束の際の残差の振動が小さいという性質がある. マルチグリッド前処理を用いた場合, 両者にほとんど差が出ないこともあるが, 難しい問題を解いた場合には差が出ることが多く見られた. **図11**は実験3で coarsening(C1), V-cycle/GCA を用いた時の MGBi-CGSTAB 法と MGCGS 法の収束の様子である(縦軸が相対残差, 横軸が反復回数). MGBi-CGSTAB 法が MGCGS 法よりも残差の振動が少なくて済んでいる様子が分かる. また, 収束条件を相対残差が 10^{-12} と少し厳しめにしたため, 最後の辺りで計算上の残差と実際の残差との間に乖離が見られる. このとき, わずかではあるが, MGBi-CGSTAB 法が MGCGS 法よりも(相対残差の面で)精度が良いところまで収束している.

4. まとめ

本研究ではマルチグリッド前処理付 Bi-CGSTAB 法を非矩形領域の非一様メッシュの問題に対して適用し,

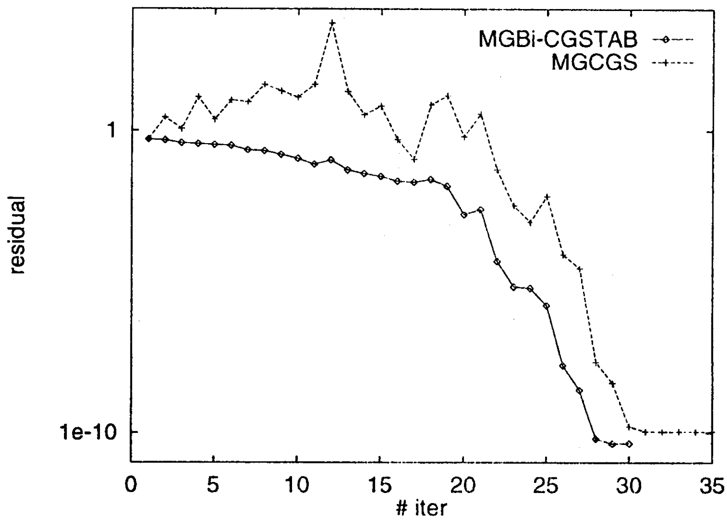

図11 MGBi-CGSTAB法とMGCGS法の収束の様子

その収束が問題サイズに関係ないことを確かめた．さらに，通常のcoarseningでは長波長成分の収束が十分でない問題に対してはcoarseningを工夫することで収束が速くなることを示した．この際のcoarseningは粗いグリッドまでとることが効果的であると思われる．今回の実験では拡散係数の段差を1000 ～ 10000倍に設定した．そのため，V-cycleを用いたMG法は非常に収束が遅くなった．一方，W-cycleを用いたMG法は多くのケースで良好な収束を見せたが，いくつかのケースでは収束の悪化する様子が見られた．それに対して，MGBi-CGSTAB法ではV-cycle，W-cycleに関わらず良好な結果を得た．MG法，MGBi-CGSTAB法ともにW-cycleを用いることが収束速度の向上に効果的であることが分かったが，粗いグリッド上の計算が多くなるW-cycleは並列化には向いていない．したがって，V-cycleでもよい性質を示したMGBi-CGSTAB法は，MG法よりも並列化に向いているといえる．

参 考 文 献

1) T. Osoda. The multigrid preconditioned conjugate gradient squared method. Master's thesis, University of Tokyo, 1995.
2) K. Oosterlee T. Washio. Experirnces with robust parallel multilevel preconditioners for bicgstab. Arbeitspapiere, GMD, 1995.
3) P. Wesseling. *An introduction to multigrid methods*. John Wiley & Sons, 1992.
4) 村田健郎, 名取亮, 唐木幸比古. 大型数値シミュレーション. 岩波書店, 1990.