

時間発展非線形偏微分方程式への Multigrid Reduction in Time の適用における特性評価

田口悠太^{†1} 金子重郎^{†1} 野村直也^{†1} 藤井昭宏^{†1} 田中輝雄^{†1}

概要：従来の時間積分の並列化では空間的な並列性にのみ制限され、空間軸方向に十分な並列性を抽出することができない場合、時間積分における時間軸方向の逐次性がボトルネックとなる。時間発展する方程式の求解において計算速度を向上させるためには、高並列性を生かして時間軸方向の逐次性を緩和する必要がある。マルチグリッド法を用いた最適なスケール並列化手法の一つとして Multigrid Reduction in Time (MGRIT) が存在する。非線形問題において時間軸方向並列性を抽出した評価例はまだ少なく、どのような差分スキーマが MGRIT に有効であるのかはあまり明らかにされていない。

本研究では、時間発展する非線形偏微分方程式を陽解法、陰解法、クランク=ニコルソン法などのスキーマで差分化し、MGRIT における収束性について考察するとともに有用性について検証する。

1. はじめに

従来の時間積分の並列化では空間的な並列性にのみ制限され、空間軸方向に十分な並列性を抽出することができない場合、時間積分における時間軸方向の逐次性がボトルネックとなる。近年ではコア自体のクロック周波数を向上させることに限界が生じてきているが、数百万のコアを用いての超高並列性を有する高性能のコンピュータアーキテクチャを設計することにより高速な演算が可能になってきている。したがって時間発展する方程式の求解において高並列性から計算速度の向上を実現させるためには、逐次性によるボトルネックを緩和する時間軸方向の並列化を検討する必要がある。マルチグリッド法[1],[2]を用いての時間軸方向の並列化手法はいくつか存在するが、最適なスケール並列化手法の一つとして R. D. FALGOUT [3],[4],[5]らにより提案されている Multigrid Reduction in Time (MGRIT) がある。非線形問題において時間軸方向並列性を抽出した評価例はまだ少なく、どの差分スキーマが MGRIT に適しているのかはあまり明らかにされていない。

本研究では時間発展する非線形偏微分方程式（バーガース方程式、熱拡散係数が温度に依存する熱伝導方程式）などの非線形問題にも適用可能になるように、非線形問題を解く時に用いられる Full Approximation Scheme Multigrid を用いて MGRIT の実装を行った。上記問題を様々な種類のスキーマで差分化したものに MGRIT を適用して各スキーマに関しての収束性についての評価を行った。

2. Multigrid Reduction in Time (MGRIT)

従来の時間積分法を図 1, MGRIT を図 2 に示す。従来の時間積分では時間発展する問題を逐次解法で時間積分しており、ある時間ステップの解を得るためには 1 つ前の時間ステップの解が必要になる。全ての時間ステップにおい

て時間軸方向に逐次性が存在するため、並列化方向が空間軸方向に限定される。それに対して本研究で取り扱う MGRIT は時間軸方向をある一定間隔で逐次性を緩和する。これにより逐次性が部分的に切れるため時間軸方向に並列性が抽出しやすくなる。加えてマルチグリッド法を用いて時間軸方向に問題サイズを粗くし、ある一定間隔 m で格子を抜き出し粗い問題を生成する。MGRIT は 2 レベルの Parareal[6]といわれるアルゴリズムをマルチグリッド法に適用したものとみなすことができる。マルチグリッド法の各レベルでは緩和法を適用するが、MGRIT の場合、細格子緩和法および粗格子緩和法といわれる緩和法を組み合わせた形で用いる。MGRIT 内部では非線形問題にも対応した Full Approximation Scheme Multigrid を使用する。

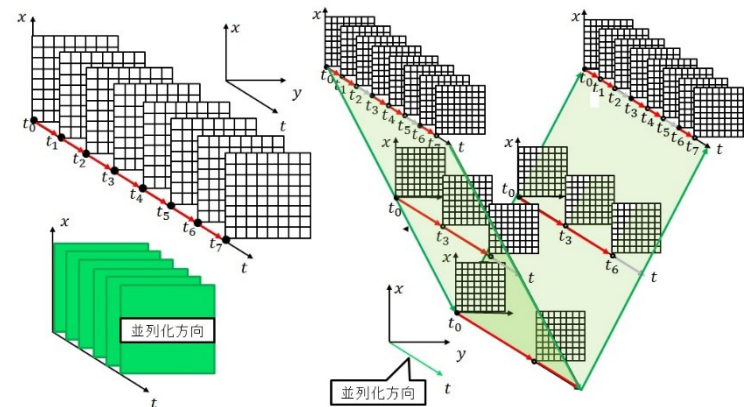


図 1 従来の時間積分法

図 2 MGRIT(V-cycle)

2.1 粗格子に関する方程式の生成

以下のような常微分方程式が存在すると仮定する。

$$u'(t) = f(t, u(t)), u(0) = g_0, t \in [0, T] \quad (2.1)$$

N が時間軸方向の問題サイズ、 $u(t)$ を離散化したものを $u_i (1 \leq i \leq N)$ 、 T を最終時間、時間ステップ幅を $\delta t = T/N$ とし、1 つ前の時間ステップ用いて (2.1) を離散化すると

$$u_0 = g_0, u_i = \Phi_i(u_{i-1}) + g_i (1 \leq i \leq N) \quad (2.2)$$

^{†1} 工学院大学
Kogakuin University

(2.2)で表れる Φ_i は現在の時間ステップから次の時間ステップの解を得るときに使用され、 δt を用いて生成することができる。(2.2)を時間ステップ毎に並べると(2.3)を得る。(2.3)は細格子に関する方程式であり、特に f が線形な関数であるとき $\Phi_i(u_{i-1}) = \Phi_i u_{i-1}$ で表される。

$$A(\mathbf{u}) = \begin{pmatrix} I & & & & \\ -\Phi_1 & I & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & -\Phi_N & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_0 \\ u_1 \\ \vdots \\ u_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g_0 \\ g_1 \\ \vdots \\ g_N \end{pmatrix} = \mathbf{g} \quad (2.3)$$

(2.1)の数値的な解は、(2.3)を前進代入で時間発展させることにより得ることができる。ここで Δ を粗くする記号とし、粗格子率を表す正数を m 、 $N_\Delta = N/m$ 、 $\Delta T = m\delta t$ とする。各レベルでの \mathbf{u} と \mathbf{g} を m 個飛ばしに抜き出し、(2.3)を時間軸方向に粗くすると(2.4)を得る。 Φ_Δ は ΔT を用いて構成したものであり Φ と基本構造はほとんど変わらない。また線形の場合 A は行列になり、非線形の場合 A は関数になる。(2.4)は粗格子に関する方程式であり、マルチグリッド法において粗いレベルの問題に相当する。

$$A_\Delta(\mathbf{u}_\Delta) = \begin{pmatrix} I & & & & \\ -\Phi_{\Delta,1} & I & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & -\Phi_{\Delta,N} & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{\Delta,0} \\ u_{\Delta,1} \\ \vdots \\ u_{\Delta,N_\Delta} \end{pmatrix} = \mathbf{g}_\Delta \quad (2.4)$$

2.2 粗格子緩和法と細格子緩和法

細格子緩和法を図3、粗格子緩和法を図4に示す。図の青色の部分は更新される格子である。細格子緩和法は粗格子 T_i を基点として $T_i \sim T_{i+1}$ 間の細格子を逐次的に更新する緩和法である。各間の計算は逐次処理であるが、各間の処理は他の格子点から独立しているため並列に計算することができる。それに対して粗格子緩和法は T_i の一つ前の時間ステップの細格子を用いて粗格子 T_i を更新する緩和法であり、細格子緩和法と同様に並列に計算することができる。

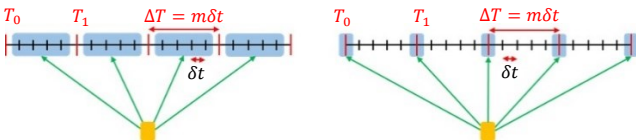


図3 細格子緩和法

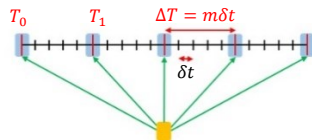


図4 粗格子緩和法

2.3 Full Approximation Scheme Multigrid (FAS)

FAS[1],[7]は非線形問題に対応したマルチグリッド法である。線形のマルチグリッド法では細格子へ足しこむ真の解の差を求めるために粗格子の残差方程式を解く必要がある。非線形問題 $A(\mathbf{u}) = \mathbf{g}$ の場合、線形問題と比べて残差方程式を $A(\mathbf{e}) = \mathbf{r}$ とあらわすことができなため通常のマルチグリッド法とは異なる残差方程式を用いなければならない。

い。 \mathbf{v} を更新前の解、 \mathbf{u} を更新後の解、 h を細格子のレベル、 $2h$ を粗格子のレベル、 I_h^{2h} を制限演算子、 I_{2h}^h を補間演算子とする。このとき $2h$ でのFASの残差方程式は、

$$A^{2h}(\mathbf{u}^{2h}) = A^{2h}(I_h^{2h}\mathbf{v}^h) + I_h^{2h}(\mathbf{g}^h - A^h(\mathbf{v}^h)) \quad (2.5)$$

であり、(2.5)を解くと新たな粗格子の解 \mathbf{u}^{2h} が求まる。ここで粗格子の誤差は $\mathbf{e}^{2h} = \mathbf{u}^{2h} - \mathbf{v}^{2h}$ で求まり、この誤差を I_{2h}^h で延長補間して細格子の解に足しこむことにより、 \mathbf{u}^h は真の解に近づく。本研究で解く問題は(2.1)の f が非線形な関数になるため、MGRITの関数内でFASを用いた。再帰構造を用いたFASアルゴリズムを図5に示す。 l はV-cycleのレベル、 \mathbf{u} は解ベクトル、 \mathbf{g} は右辺ベクトルを表している。V-cycleを下るときは細格子緩和法、粗格子緩和法、細格子緩和法の順に構成された緩和法(FCF-relax)、一方V-cycleを登るときは細格子緩和法(F-relax)を使用する。

Algorithm 1 FAS_MGRIT($l, \mathbf{u}_l^{(j)}, \mathbf{g}_l$)

- 1: Set $\mathbf{u}'_l \leftarrow \text{FCF_relax}(\mathbf{u}_l^{(j)})$
- 2: Set $\mathbf{u}'_{l-1} \leftarrow I_h^{2h}, \mathbf{g}_{l-1} \leftarrow I_h^{2h}(\mathbf{g}_l - A_l(\mathbf{u}'_l)) + A_{l-1}(\mathbf{u}'_{l-1})$
- 3: if $l = 2$ then
- 4: Solve $A_{l-1}(\tilde{\mathbf{u}}_{l-1}) = \mathbf{g}_{l-1}$
- 5: else
- 6: Set $\tilde{\mathbf{u}}_{l-1} \leftarrow \text{FAS_MGRIT}(l-1, \mathbf{u}'_{l-1}, \mathbf{g}_{l-1})$
- 7: end if
- 8: return $\mathbf{u}'_l \leftarrow \text{F_relax}(\mathbf{u}'_l + I_{2h}^h(\tilde{\mathbf{u}}_{l-1} - \mathbf{u}'_{l-1}))$

図5 FAS-MGRIT V-cycleのアルゴリズム

従来の逐次解法では直接解法であるが、FAS MGRITでは反復解法になるため、反復回数の終了条件を設ける必要がある。計測ではV-cycleの一番細かい格子の残差ノルムがある一定値以下になったら反復終了とした。

3. 時間発展非線形偏微分方程式およびその離散化

本研究ではMGRITを用いて以下の二つの非線形問題を解く。その際に差分法を用いて問題を離散化する必要がある。時間軸方向の差分法として前進差分法、空間軸方向の差分法として拡散項には陽解法、陰解法およびランク=ニコルソン法を用いる。

3.1 有限差分法

差分法[8],[9]を大別すると陽解法と陰解法に分けることができる。陽解法は離散化した式に1つの未知数しか含まない解法である。この解法は計算途中で連立方程式を解かないため1時間増分当たりの計算量が少ないが、安定した解を求めるためには安定性条件を満たすように Δt を小さく設定する必要がある。陰解法に比べて小さなメモリ容量で済む。一方陰解法は離散化した式に2つ以上の未知数を含む解法である。この解法は Δt を大きくしても安定して解を得ることが可能であるが、計算途中で連立方程式を解く必要があるため1時間増分当たりの計算量が多く、陽解法

に比べて大きなメモリ容量が必要である。陽解法および陰解法では時間軸方向の打ち切り誤差が $O(\Delta t)$ となり、空間方向の打ち切り誤差の $O(\Delta x^2)$ と比べて大きい。時間軸方向の打ち切り誤差も $O(\Delta t^2)$ にするために考えられた解法がクラック＝ニコルソン法である。この解法は時刻 n と時刻 $n+1$ における u の平均値を使用して計算を行う。

3.2 バーガース方程式

バーガース方程式[10],[11],[12],は、一次元の非線形波動を記述する二階偏微分方程式であり、一次元のナビエ＝ストークス方程式において、圧力項を無視できる場合に相当し、

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} = \frac{1}{Re} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (3.2.1)$$

で表される。この方程式は厳密解が知られており、 t は時間、 u は流体の速度、 Re はレイノルズ数といわれる流体の粘性を表すパラメータであり、左辺の第二項は移流項、右辺の項は拡散項を表している。この方程式を差分法で離散化する場合、安定性条件から移流項に一次精度風上差分法がよく用いられる。レイノルズ数が大きい場合の流れを粗い格子を用いて計算する場合、移流項に中心差分を用いると数値的に不安定なることが知られている。そのような場合でも、風上差分と呼ばれる差分法を使えば安定に計算できる場合がある。離散化では移流項を一次精度風上差分法で、拡散項を中心差分法で離散化する。MGRITの数値実験で使用する各差分法で差分化したスキーマについて以下で説明する。

(1)移流項を風上差分法(陽的)、拡散項を中心差分法(陽的)で(3.2.1)を離散化すると、次式ようになる。

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} = -u_i^n \frac{u_i^n - u_{i-1}^n}{\Delta x} + \frac{1}{Re} \frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{(\Delta x)^2}$$

ここで、 $\alpha = \frac{\Delta t}{\Delta x}, \beta = \frac{\Delta t}{Re(\Delta x)^2}$ とすると、

$$u_i^{n+1} = u_i^n - \alpha u_i^n (u_i^n - u_{i-1}^n) + \beta (u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n) \quad (3.2.2)$$

(2)移流項を風上差分法(陰的)、拡散項を中心差分法(陰的)で(3.2.1)を離散化すると、次式ようになる。

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} = -u_i^n \frac{u_i^{n+1} - u_{i-1}^{n+1}}{\Delta x} + \frac{1}{Re} \frac{u_{i+1}^{n+1} - 2u_i^{n+1} + u_{i-1}^{n+1}}{(\Delta x)^2}$$

ここで、 $\alpha = \frac{\Delta t}{\Delta x}, \beta = \frac{\Delta t}{Re(\Delta x)^2}$ とすると、

$$(-\alpha u_i^n - \beta) u_{i-1}^{n+1} + (\alpha u_i^n + 2\beta + 1) u_i^{n+1} - \beta u_{i+1}^{n+1} = u_i^n \quad (3.2.3)$$

(3)移流項を風上差分法(陰的)、拡散項を中心差分法(クラック＝ニコルソン)で(3.2.1)を離散化すると、次式ようになる。

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} = -u_i^n \frac{u_i^{n+1} - u_{i-1}^{n+1}}{\Delta x}$$

$$+ \frac{1}{Re} \frac{(u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n) + (u_{i+1}^{n+1} - 2u_i^{n+1} + u_{i-1}^{n+1})}{2(\Delta x)^2}$$

ここで、 $\alpha = \frac{\Delta t}{\Delta x}, \beta = \frac{\Delta t}{2Re(\Delta x)^2}$ とすると、

$$(-\alpha u_i^n - \beta) u_{i-1}^{n+1} + (\alpha u_i^n + 2\beta + 1) u_i^{n+1} - \beta u_{i+1}^{n+1} = \beta u_{i-1}^n + (1 - 2\beta) u_i^n + \beta u_{i+1}^n \quad (3.2.4)$$

3.3 非線形熱伝導方程式

各場所における熱拡散係数が時間に依存せず一定である場合を定常熱伝導といい、時間依存する場合や固体から液体など相が変化する場合を非定常熱伝導と呼ぶ。一般的な熱伝導方程式ではすべての場所において熱拡散係数が一定であるが、本研究では温度に依存し場所によって熱拡散係数が一定でない熱伝導方程式を扱う。実際の熱拡散では温度によって熱の伝わりやすさが異なるため、この方程式の方がより厳密な熱拡散現象を表現できる。(3.3.1)の t は時間、 u は温度、 $c(u)$ は u に依存する熱拡散係数を表しており、場所によって熱拡散係数が一定でない熱伝導方程式は、

$$\frac{\partial u}{\partial t} = c(u) \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (3.3.1)$$

で表される。ここで、 T_w を最終温度(固体壁面温度)、 t_w を最終時間、 l を物体の長さとするとき、

$$x^* = \frac{x}{l}, u^* = \frac{u - u_0}{u_w - u_0}, t^* = \frac{t}{t_w}$$

で各パラメータを無次元化すると、(3.3.1)は次のように無次元化される。

$$\frac{\partial(u_0 + u^*(u_w - u_0))}{\partial t_w t^*} = c(u) \frac{\partial^2(u_0 + u^*(u_w - u_0))}{\partial (lx^*)^2}$$

$$\frac{\partial T^*}{\partial t^*} = \frac{c(u) t_w}{l^2} \frac{\partial^2 u^*}{\partial x^{*2}}$$

ここで $c^*(u^*) = \frac{c(u) t_w}{l^2}$ とすれば、

$$\frac{\partial u^*}{\partial t^*} = c^*(u^*) \frac{\partial^2 u^*}{\partial x^{*2}} \quad (3.3.2)$$

を得る。計測では、1mの鉄の棒における熱拡散を想定して物体の熱拡散係数[13]を無次元化し、拡散項を中心差分法で離散化する。MGRITの数値実験で使用する各差分法で差分化したスキーマについて以下で説明する。

(1)拡散項を中心差分法(陽的)で(3.3.1)を離散化すると、次式ようになる。

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} = c(u_i^n) \frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{(\Delta x)^2}$$

ここで、 $\alpha = \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2}$ とすると、

$$u_i^{n+1} = \alpha c(u_i^n) u_{i-1}^n + (1 - 2\alpha c(u_i^n)) u_i^n + \alpha c(u_i^n) u_{i+1}^n \quad (3.3.3)$$

(2)拡散項を中心差分法（陰的）で(3.3.1)を離散化すると、次式ようになる。

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} = c(u_i^n) \frac{u_{i+1}^{n+1} - 2u_i^{n+1} + u_{i-1}^{n+1}}{(\Delta x)^2}$$

ここで、 $\alpha = \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2}$ とすると、

$$-ac(u_i^n)u_{i+1}^{n+1} + (1 + 2ac(u_i^n))u_i^{n+1} - ac(u_i^n)u_{i-1}^{n+1} = u_i^n \quad (3.3.4)$$

(3)拡散項を中心差分法（クランク＝ニコルソン）で(3.3.1)を離散化すると、次式ようになる。

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} = c(u_i^n) \frac{(u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n) + (u_{i+1}^{n+1} - 2u_i^{n+1} + u_{i-1}^{n+1})}{2(\Delta x)^2}$$

ここで、 $\alpha = \frac{\Delta t}{2(\Delta x)^2}$ とすると、

$$-ac(u_i^n)u_{i+1}^{n+1} + (1 + 2ac(u_i^n))u_i^{n+1} - ac(u_i^n)u_{i-1}^{n+1} = ac(u_i^n)u_{i-1}^n + (1 - 2ac(u_i^n))u_i^n + ac(u_i^n)u_{i+1}^n \quad (3.3.5)$$

線形な熱伝導方程式を陽解法で解く場合安定性条件は、

$$0 \leq c \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \leq \frac{1}{2} \text{となる。非線形熱伝導方程式の場合は熱拡散}$$

係数が温度に依存するため場所によってクーラン数 $c \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2}$

が異なる。MGRIT では下の階層に行くたびに Δt が大きくなるため、下の階層では安定性条件を満たしにくくなるのが考えられる。

4. MPI を用いた MGRIT のプロセス並列化

4.1 並列化の方針

MGRIT の並列化の方針として、MPI(Message Passing Interface)を用いてプロセス並列化を行う。また本研究では粗格子率 m と並列度 p が等しいという制約を課すことにより、マルチグリッド法のレベル間で通信が発生しなくなり、各プロセスが担当する格子の点の数をほぼ均等にさせることができる。具体的には格子点を図6のように各プロセスに割り当てる。ただしこの場合、上記の制約を課さない場合に比べて実装が容易になるが、時間軸方向の問題サイズ N_t は m のべき乗でなければならないという条件が生じる。

特にプロセスランク n のプロセスが粗格子緩和法で一番左側の粗格子を更新する場合、同粗格子の一つ前の格子であるプロセスランク $n-1$ の細格子が必要になる。したがってこの細格子を通信で受け取る通信用格子（図7：黒の四角）を用意する必要がある。一番最初のプロセスランクをもつプロセスはデータを送信するだけで受信はせず、一番最後のプロセスランクをもつプロセスはデータを受信するだけで送信はしない。

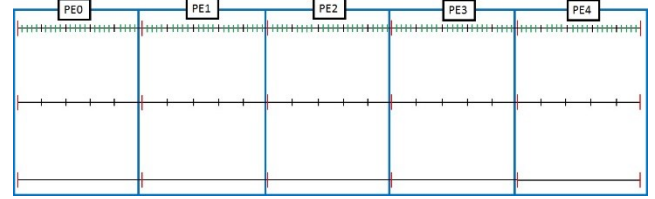


図6 各プロセスにおける格子点の割り当て ($m = 5$)

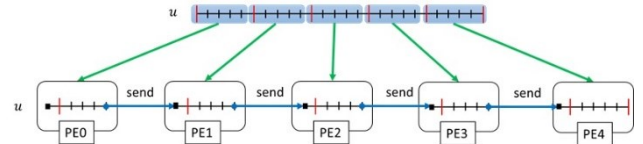


図7 通信用格子の追加 ($m = 5$)

4.2 V-Cycle の実装

マルチグリッド法の多重構造の利用法はいくつか存在するが、V-cycle を用いて MGRIT のプロセス並列化を行う。

4.2.1 細格子から粗格子の抽出

プロセス並列を用いた MGRIT で問題を粗くする際、図8のようにプロセス毎に u と g の粗格子を抜き出す必要がある。下の階層に行く度に1プロセスが担当する格子の点の数が $1/m$ 倍される。なおプロセスランクが0であるプロセスだけ各プロセスの格子点を最下層で集約するため $m+1$ 個の格子点を持っている。

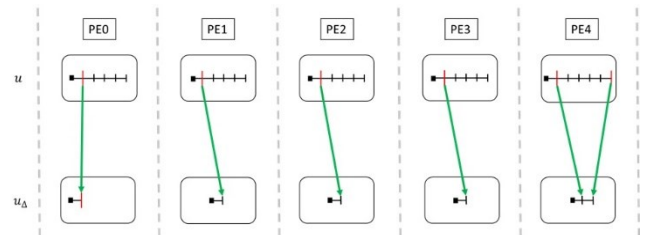


図8 細格子から粗格子の抽出

4.2.2 格子の集約および分散

今回の手法では最下層の問題サイズが $m+1$ になるまで粗くすることができる。V-cycle の最下層では最も粗い問題を直接解法で解くため、各プロセスが持つ u を一つのプロセスに集約する必要がある。図9のように実装ではプロセスランク0のプロセスに集約し、直接解法で最も粗い問題を解く。直接解法適用後に、 u を一つのプロセスから各プロセスに分散させる。

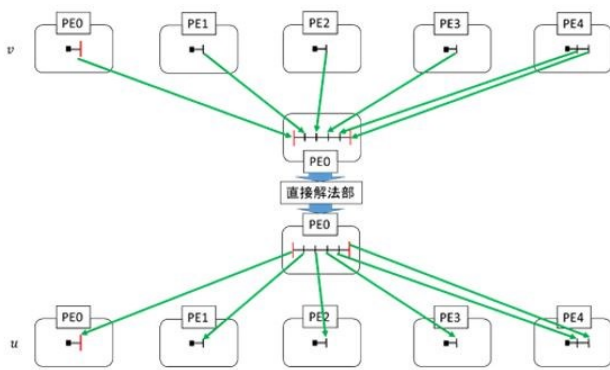


図9 格子の集約および分散

4.2.3 粗格子から細格子への補間

上層の格子に下層で求めた誤差 e を足しこむために、プロセス毎に e の格子を図10のように補間する必要がある。

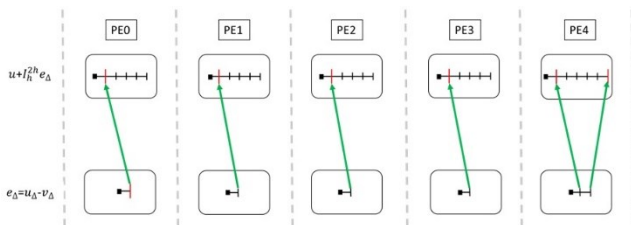


図10 粗格子から細格子への補間

5. 数値実験

5.1 計算機環境

MGRIT の実行時間の計測では計算機環境として東京大学のFX10スーパーコンピュータシステム(Oakleaf-FX)を使用し、数値実験を行った。FX10の構成を表1に示す。

表1 FX10の構成

ノード	CPU数	1
	メモリ	32GB
CPU	SPARC64™IXfx	
	コア数	16 Core / CPU
	動作周波数	1.848GHz
コンパイラ	富士通社製コンパイラ	

5.2 問題の条件

上記の各方程式では、境界条件としてノイマン型境界条件を使用し、時間軸の問題サイズ N_t を 2^{16} 、空間軸の問題サイズ N_s を16とした。バーガース方程式では $Re = 100$ 、 $\Delta x = 2\pi/N_s$ 、 $\Delta t = 1$ とし、初期条件として正弦波 $\mathbf{u}(x, 0) = 1 + \sin x$ を与えた。一方非線形熱伝導方程式では $\Delta x = 1/N_s$ 、 $\Delta t = 0.001$ とし、初期条件として定数 $\mathbf{u}(0, 0) = 0.2$ を与えた。反復の終了条件はL2ノルムが 1.0×10^{-7} 以下になったら終了とした。

5.3 数値実験と評価

バーガース方程式、非線形熱伝導方程式の各差分法における並列度(粗格子率)を変化させたときのMGRITの合計時間、直接解法時間および反復回数を表2から表7に示す。なお表3のみ直接解法+集約+分散の時間を追加してある。バーガース方程式の各差分法の時間ステップ幅は、陽解法を $\Delta t = 0.0001$ 、陰解法を $\Delta t = 1$ 、クランク=ニコルソン法を $\Delta t = 1$ とした。一方、非線形熱伝導方程式の各差分法の時間ステップ幅は、陽解法を $\Delta t = 0.0001$ 、陰解法を $\Delta t = 0.001$ 、クランク=ニコルソン法を $\Delta t = 0.001$ とした。陽解法の場合 Δt を非常に大きくしてしまうと安定性条件を満たしにくくなり収束しなくなるため、各方程式において Δt を小さく設定した。各方程式の陰解法、クランク=ニコルソン法では最も反復回数が減らすことができた Δt を選択し、各差分法の計測結果を表2~表7に示す。

表2 バーガース方程式(陽解法, $\Delta t = 0.0001$)

並列度	合計時間	直接解法時間	反復回数
逐次	0.030838		
2	nan	nan	nan
4	0.645954	0.000037	10
16	0.137297	0.000086	9
256	0.025524	0.000723	6

表3 バーガース方程式(陰解法, $\Delta t = 1$)

並列度	合計時間	直接解法時間	直接解法+集約+分散	反復回数
逐次	1.76394			
2	50.460289	0.000408	0.000925	7
4	18.626982	0.000787	0.001558	7
16	3.498637	0.002606	0.003744	6
256	0.271014	0.041227	0.044347	6

表4 バーガース方程式
(クランク=ニコルソン法, $\Delta t = 1$)

並列度	合計時間	直接解法時間	反復回数
逐次	2.244118		
2	54.62268	0.000441	6
4	20.25713	0.000851	6
16	3.691601	0.002739	5
256	0.235794	0.034719	4

表5 非線形熱伝導方程式(陽解法, $\Delta t = 0.0001$)

並列度	合計時間	直接解法時間	反復回数
逐次	0.337228		
2	2.888409	0.000029	4
4	1.094712	0.000051	4
16	0.248767	0.000171	4
256	0.026721	0.00131	2

表6 非線形熱伝導方程式 (陰解法, $\Delta t=0.001$)

並列度	合計時間	直接解法時間	反復回数
逐次	8.541128		
2	119.51379	0.00092	7
4	38.195058	0.001565	6
16	8.316083	0.006203	6
256	0.625816	0.099049	6

表7 非線形熱伝導方程式
(クランク=ニコルソン法, $\Delta t=0.001$)

並列度	合計時間	直接解法時間	反復回数
逐次	14.826983		
2	141.03951	0.001078	5
4	52.701916	0.002151	5
16	9.167579	0.006845	4
256	0.684117	0.109272	4

バーガース方程式の各時間ステップ幅毎の陽解法, 陰解法, クランク=ニコルソン法の実行時間をグラフ化したものを図1 1から図1 3に示す.

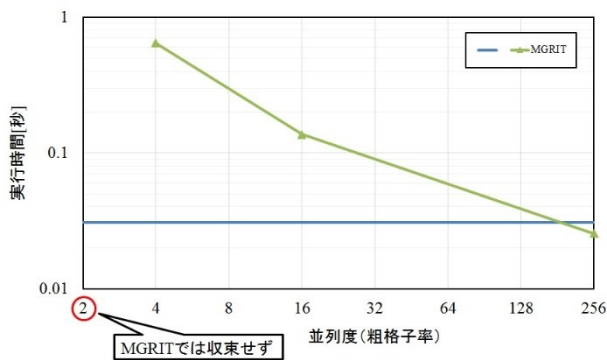


図1 1 バーガース方程式 (陽解法, $\Delta t=0.0001$)

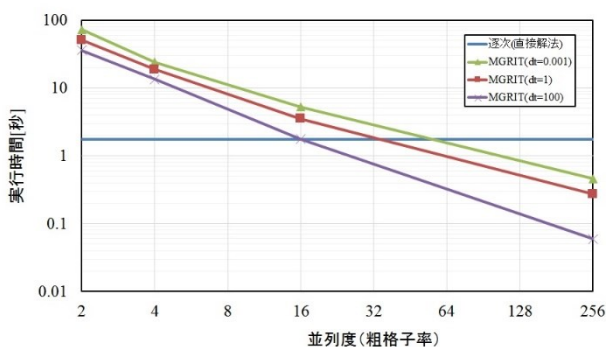


図1 2 バーガース方程式 (陰解法, $\Delta t=0.001, 1, 100$)

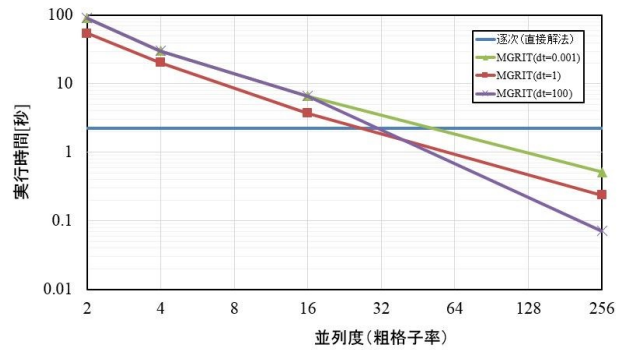


図1 3 バーガース方程式
(クランク=ニコルソン法, $\Delta t=0.001, 1, 100$)

表2からバーガース方程式の場合, 陽解法では並列度が上がるにつれて反復回数が減少していることがわかる. MGRITでは並列度が低いと粗格子率が小さくなり V-cycleのレベル数が増加する. m は最下層の問題サイズに一致しており, レベル数が増加すると下のレベルでの Δt が大きくなるため安定性条件を満たしにくくなる. これが原因で $m=2$ のときに陽解法が収束しなかったと思われる. 並列度が256のときにMGRITが逐次処理よりも早くなっていることがわかる. 陽解法ではかなり少ない計算量で処理が終了してしまうため, 並列化のオーバーヘッドが顕著になる. そのため実行時間でMGRITが逐次処理よりも早く解を得るためには陰解法, クランク=ニコルソン法よりも並列度が必要になる. 陰解法, クランク=ニコルソン法では $\Delta t=1$ であるとき表3, 表4からクランク=ニコルソン法のほうが陰解法よりも反復回数が少ないことが確認できる. 各差分解法の実行時間の内訳では, $m=256$ のときにのみクランク=ニコルソン法が陰解法よりも0.0352秒早く解を得られているが, それ以外では陰解法の方が早く解を得られている. 陰解法, クランク=ニコルソン法では通信などの並列化オーバーヘッドの割合が小さくなり並列度が低くても逐次処理よりも早く解を得ることが可能であることがわかる. また陰解法では, Δt を大きくしていくと収束するまでの反復回数が減少し実行時間が減少している.

一方表5~7から非線形熱伝導方程式においてはバーガース方程式の場合と同様にクランク=ニコルソン法のほうが陰解法よりも反復回数が少ない. 陰解法とクランク=ニコルソン法の比較ではすべての並列度において陰解法のほうが早く解が得られていることが確認できる. クランク=ニコルソン法の場合, Δt をある程度大きくすると熱拡散係数とクランク数が非常に大きくなって収束しなくなる傾向があった.

6. おわりに

本研究の結論として評価結果から陽解法では Δt が小さく、高並列であると V-cycle のレベル数が小さくなるため逐次処理よりも早く解を求めることができることがわかった。一方陰解法とクランク＝ニコルソンでは収束性に関して反復回数において違いが見られるが、実行時間においてはあまり違いが見られなかった。どちらの差分解法でも従来の逐次処理に対して実行時間において絶大な効果を発揮した。今回の計測では $N_t = 65536$ としており、このとき並列度＝256 が最大の並列数となる。速度向上について考察するため、バーガス方程式（陰解法、 $\Delta t=1$ 、並列度＝256）を例にして考察を行う。実行時間の内訳では全体の合計時間は0.271秒、直接解法部の時間は0.041秒、通信時間を含めた直接解法部の逐次処理の時間は0.044秒であった。通信時間を含めた直接解法部の逐次処理の時間は全体の合計時間の約16.36%を占めていたが、6.51倍の速度向上が実現できた。

今後の課題としては並列度を向上させるために制約（粗格子率＝並列数）の解除が考えられる。この場合レベル間の通信が発生し通信時間が増大するが、粗格子率を固定にして並列度を変えられるようになり、より広い範囲で高速な並列度を選択できるようになる。また空間軸方向の問題サイズが大きい場合は、時間軸方向をプロセス並列化、空間軸方向をスレッド並列の検討も考えられる。特に最新の研究[5]では陽解法においてレベル毎のクーラン数を一定値以下に保つため、時間軸方向だけではなく空間軸方向も粗くする Space Time Multigrid (STMG) といわれる時間軸マルチグリッド法が提案されている。この手法は MGRIT より高速であり、FAS を組み込むことにより非線形問題にも対応可能になることが考えられる。

謝辞 本研究の一部は ISPS 科学研究費 15K15998 の助成を受けて行われた。

参考文献

- [1] William L. Briggs, Van Emden Henson, Steve F. McCormick, A multigrid Tutorial Second Edition.
- [2] 室田一雄, 杉原正顕, 線形計算の数理, 岩波書店 pp.63-141 (2009).
- [3] R. D. Falgout, A. Katz, Tz. V. Kolev, J. B. Schroder, A. Wissink, and U. M. Yang, Parallel time integration with multigrid reduction for a compressible fluid dynamics application, Journal of Computational Physics. url=https://computation.llnl.gov/project/parallel-time-integration/pubs/strand2d-pit.pdf (2014). (accessed 2016-1-25).
- [4] R. D. Falgout, S. Friedhoff, Tz. V. Kolev, S. P. Maclachlan, and J. B. Schroder, Parallel time integration with multigrid (2013). url=https://computation.llnl.gov/project/linear_solvers/pubs/mgritPaper-2014.pdf (accessed 2016-1-25).
- [5] R. D. Falgout, S. Friedhoff, Tz. V. Kolev, S. P. Maclachlan, J. B. Schroder, and J. B. Schroder, Multigrid Methods with Space-Time Concurrency (2015). url=https://computation.llnl.gov/project/linear_solvers/pubs/pit-mg-space-time-2015.pdf (accessed 2016-1-25).
- [6] Martin J. Gander, Stefan Vandewalle, Analysis of The Parareal Time-Parareal Time-integration Method url=http://www.unige.ch/~gander/Preprints/parareal.pdf (accessed 2016-1-25).
- [7] Van Emden Henson, Multigrid methods for nonlinear problems: An overview. url=https://computation.llnl.gov/casc/people/henson/postscript/UCRL_JC_150259.pdf (accessed 2016-1-25).
- [8] 土木・建築関連技術者のための水理計算における差分法入門講座（第1項 差分法入門） url=http://toshi1.civil.saga-u.ac.jp/ohgushik/sabun1.pdf (accessed 2016-1-25).
- [9] CAE 技術情報局 陰解法と陽解法の違い url=http://jikosoftcom.blog25.fc2.com/blog-entry-968.html (accessed 2016-1-25).
- [10] 藤井考蔵, 流体力学の数値計算法, 東京大学出版 pp.77-91 (1994).
- [11] コンピュータによる流体力学, 丸善 (2014).
- [12] 木原 瞬, 一次元バーガス方程式における有限差分法の誤差解析について (2006).
- [13] 日本機械学会編, 伝熱工学資料, 改定第5版, 丸善 pp.1-22,281-282 (2009).