学位報告

報告番号	※ 乙 第 号

主 論 文 の 要 旨

論文題目　大規模常微分方程式系に対する Krylov 部分空間法

氏　　名　中村 真輔

論 文 内 容 の 要 旨

工学，物理学などの諸分野における数理的シミュレーションは，しばしば線形定係数の常微分方程式の初期値問題を解くことに帰着される．例えば，熱の拡散などを表わす熱伝導方程式や，空気中の煙の流れなどを表わす移流拡散方程式など，時間依存型の偏微分方程式に対しては，その近似解を得るために空間方向を差分法などにより離散化して得られる，時間方向の常微分方程式を解く手法が用いられる．

その解を係数行列の固有値と固有ベクトルによって表現することは容易だが，常微分方程式が大規模な場合には，固有値・固有ベクトルを得ることは困難であるし，数値的にも有効な方法ではない．そこで常微分方程式の解を近似的に得るための離散変数法(discrete variable methods) の計算機への実装が必須となる．

しかし，離散変数法に属する解法にはそれぞれ近似解の精度や安定性，計算量などで長所や短所がある．解に急減少する成分と緩やかに減少する成分とが併存している，いわゆる硬い方程式は，特に発展型偏微分方程式の空間離散化で生じる大規模常微分方程式など，応用問題でしばしば現われるが，数値的取り扱いは困難となり，*A* 安定性と呼ばれる強固な安定性を持った方法の適用が必要となる．*A* 安定性を持つ離散変数法は非常に限られており，その中で有効な選択肢の一つとして陰的解法がある．陰的解法の中でも，台形則はその簡便さと*A* 安定性から扱い易く，特に時間依存型の偏微分方程式に適用した場合はCrank-Nicolson 法とも呼ばれ，広く用いられている．

しかし陰的解法による計算は，必然的に逆関数の評価（線形定係数の常微分方程式に適用した場合には，線形方程式の求解）を伴なうため，計算量の増大が大きな負担となる問題がある．線形方程式の数値解法には様々なものがあるが，大規模な方程式に対しては反復法が有用であるとされ，反復法でも特にその汎用性の高さと収束の速さからKrylov 部分空間法が現在最も頻繁に用いられている．そこで本論文では，線形定係数の常微分方程式に台形則を用いて離散化することで得られる線形方程式群を，Krylov 部分空間法を用いて解く際，その特性に注目して情報を再利用し，計算時間の削減を図ることを目的とする．

本論文は全5 章より構成されている．

第1 章では，本研究で対象としている，定係数の線形常微分方程式に台形則を適用することで得られる線形方程式群と，その方程式群に適用するKrylov 部分空間法について概略を説明し，また計算時間の削減に用いるKrylov 部分空間法の特性についても述べる．Krylov 部分空間法とは線形方程式のための反復解法の一種であり，方程式の初期残差と係数行列から構成されるKrylov 部分空間によって解の修正量を得るものである．Krylov 部分空間法は，方程式や近似解の状態に合わせて反復過程が変化するため解への収束が速く，また係数行列が対称な場合に適したものや非対称な場合でも適用可能なものなどアルゴリズムのバリエーションも豊富で，そのため頻繁に用いられ研究も盛んな解法である．

第2 章では，本論文のあとの章の記述の準備のため，Krylov 部分空間法について説明する．特に，本論文で提案するアルゴリズムの基礎として用いる，CG 法，BiCGSTAB 法，Deflated CG 法について重点的に説明する．

CG 法とは係数行列が対称な場合に適用可能な解法であり，残差がKrylov 部分空間との直交条件を満すように近似解を生成している．このことは，丸め誤差を考慮しない範囲でCG 法の反復の有限性を保証するとともに，係数行列が正定値な場合に，「解の修正量をKrylov 部分空間内で生成する」という条件下で，誤差ノルムが最小な近似解を得るという特性に繋がるため，係数行列が正値対称な場合では定番と言ってよい反復法である．

また，係数行列が非対称な場合にCG 法を拡張した方法としてBiCG 法がある．さらにBiCGSTAB 法はBiCG 法の不安定性を改善した手法であり，アルゴリズムが簡便であること，収束の速さと安定性のバランスが良いことから頻繁に用いられる解法の一つである．

もう一つCG 法の改善手法として，残差の直交条件に任意の空間を付加することで反復回数の削減を図るものがある．この手法をDeflated CG 法と呼び，係数行列の，より小さな絶対値を持つ固有値に対応する固有ベクトルの張る空間を付加することで，より大きな効果が得られる．

また，提案アルゴリズムの比較対象として用いる前処理つきKrylov 部分空間法についても説明する．前処理とは，Krylov 部分空間法の収束性が係数行列の条件数に強く依存するため，計算コストをかけずに，問題の方程式を条件数を縮小した等価な方程式に置き換えることで，収束性の改善を図る手法であり，線形方程式の起源となっている連続問題に適応したものも含めると膨大な数の前処理手法が存在する．しかし，本論文では対角スケーリングと不完全コレスキー分解，不完全LU 分解の3 種類のみ紹介する．

第3 章では，本論文で目的としている，常微分方程式を台形則で離散化することで得られる線形方程式群にKrylov 部分空間法を適用する場合の情報の再利用について，まずその基礎を3.1 節で説明する．しなわち，ある線形方程式の解の修正量を構成するための部分空間に，前の線形方程式の求解プロセスで得られたKrylov 部分空間を付加することで情報の再利用を行ない，反復回数の削減を図る．3.2 節以降では常微分方程式の定係数行列が対称な場合に適用可能なアルゴリズムを提案する．この章では，CG 法が満たす残差の直交条件の対象となる部分空間に，前の線形方程式の求解プロセスで得られたKrylov 部分空間を連結することで反復回数の削減を図ることを企図し，Deflated CG 法を基礎にアルゴリズムを構築する．また3.4 節では，1 反復あたりの計算量を削減する手法について説明する．3.3 節で提案したアルゴリズムでは，基礎となるDeflated CG 法にベクトルの内積と線形結合が追加されるが，そのうち線形結合につ

いて，生成するベクトルの定義に変更を加えることで計算回数を抑える手法を示す．ただし，この計算式では丸め誤差の影響が大きいため，大半の反復ではこの節で導出した計算式を用いつつ，一定の反復回数で3.2 ～ 3.3 節で導出した計算式を用いることで精度を維持する必要があることも述べている．

3.5 節では，提案したアルゴリズムの性能について検証するため，拡散方程式の空間方向を離散化することで得られる大規模定係数線形常微分方程式をもつモデル問題をを対象に，数値実験を行なった．その結果，

(1) 係数行列の非ゼロ要素が比較的多い場合，

(2) 常微分方程式を離散化する際の刻み幅が小さい場合，

(3) 常微分方程式の非斉次項が時間方向に変動せず，一定な場合

において提案アルゴリズムに有利な結果が得られた．このうち(1) については，提案アルゴリズムでは1 反復あたりのベクトル演算は増えるが，行列・ベクトル積の回数は変わらないため，全体の計算量に占める行列・ベクトル積の割合が少ないことによると考えられる．(2) については，提案アルゴリズムの利点というよりは比較対象として用いた前処理つきCG 法の欠点であると言える．つまり，刻み幅が小さくなると係数行列の条件数も小さくなるため，その条件数を小さくする前処理の効果が限定的となるからである．Deflated CG 法は前処理つきCG 法とも見做せるため，提案アルゴリズムも前処理なしのCG 法よりは現象の影響を受けるが，条件数の縮小を主眼としていないため前処理つきCG 法ほど顕著ではない．(3) については，裏を返せば非斉次項が変動する場合では，むしろ性能が悪化してしまうことを意味する．3.6 節において，これらの数値実験結果を考察し，直交条件の連結によるKrylov 部分空間の再利用では，非斉次項が動的な場合に対応できないとの結論が得られた．

第4 章では，3.5 節の考察を元に非斉次項が動的な場合への対応について考え，3.1 節で述べたKrylov 部分空間の再利用に関する理論的基礎づけは保持して，付加する条件式の改善を考察する．すなわち，ある時点における線形方程式の近似解の修正量を構成するために，それより前の線形方程式の求解プロセスで得られたKrylov 部分空間を再利用するという基礎はそのままとし，3.2 節で述べた，残差の直交条件にKrylov 部分空間を付加する手法は用いずに，Krylov 部分空間の再利用を反復法の初期近似解の計算に留める．また，その初期近似解の設定に非斉次項の振舞いを反映させることで，非斉次項が動的な場合にも対応可能となることを目指して，アルゴリズムを修正する．このようにすることで，初期近似解が求められて以降の求解プロセスは線形方程式を個別に解く場合と同じになる．そのため，係数行列が対称な場合にはDeflated CG 法ではなく，その原形であるCG 法を基礎にアルゴリズムを構成する．また，係数行列が非対称な場合は，アルゴリズムが簡便で収束の速さと安定性のバランスが良いBiCGSTAB 法を基礎に新規にアルゴリズムを構築する．このように修正したアルゴリズムに対して，3.5 節と同じモデル問題に対する数値実験を行い，4.2.3 節と4.3.3 節でその結果を報告する．その結果，非斉次項が動的であってもその変化が1 次元の部分空間に納まる常微分方程式であれば良い結果が得られることが確認された．

第5 章では，まとめと今後の目標について述べている．本論文に述べた手法は，その考え方において，たとえばRosenbrock 法を適用した場合など，非線形常微分方程式系に対する離散変数法の高効率化に適用が可能である点にも触れて，今後の展望を記述している．