審査の結果の要旨

氏 名　　櫛 田 慶 幸

超高性能計算機の出現により複雑な自然現象の予測・解明が可能となってきているが、それらを記述する偏微分方程式の多くは非線型であり、今なお大規模な問題に対して有効な非線形方程式解法が求められている。大規模な非線形問題の解法として非線形共役勾配法が考えられる。共役勾配法は並列計算に適したアルゴリズムであり、また前処理を行うことで収束性を向上させ安定に解を求めることが期待される。

一方、物質の性質を解明する手法のなかで最も信頼性の高い手法の一つに第一原理計算がある。第一原理計算は実験などにより得られる経験的なパラメータを用いることなく量子力学に基づいて解析を行う手法であるが、多くの計算を必要とし、また非線形問題を解く必要がある。第一原理計算に必要とされる計算量は膨大であり、並列計算機の利用が必須であるため、近年、有限要素法に基づく手法が注目を集めているが、得られた非線形方程式の高速・安定な解法が求められている。

本論文では、非線形方程式解法として知られる共役勾配法の新たな前処理を提案し高速でロバストな非線形方程式解法を開発することを目的としている。本論文では共役勾配法と Newton 法のアルゴリズムの比較から、Newton 法が前処理付き共役勾配法の特殊な場合であることを考察し、Jacobi 行列を近似する行列を前処理行列として用いることで共役勾配法の収束性を向上させることができることを示しており、その考察に基づき新たな前処理手法を提案している。提案された前処理は、有限要素法に基づく第一原理計算に適用され、従来手法に比べ収束性が向上することが確認されている。

本論文は 6 章から構成されている。以下に各章の要旨を述べる。

第 1 章では、本研究の背景として非線型方程式解法、第一原理計算の現状についてのべ、あらたな非線形共役勾配法の前処理の必要性について言及している。

第 2 章では、まず線形共役勾配法、そしてその加速手法である前処理について説明を行っている。その後、非線形共役勾配法のアルゴリズムについて説明を行っている。

第 3 章では、地球シミュレータにおける共役勾配法の効率的な並列化手法について説明を行っている。地球シミュレータは並列化に際して階層構造をもつため、効率的な並列計算のためには階層構造を意識した並列化手法を選択する必要がある。そのような最適化を行った結果、4,096 プロセッサー使用時に約 85%の並列化効率を達成している。

第 4 章では、線形共役勾配法の局所化前処理と応力特異性の関係について述べている。線形共役勾配法においては、効率的に並列計算を行うため前処理を局所化することが多い。し

かし、局所化により前処理の効果は低減されるうえ、応力特異性がもたらす収束性の悪化のため、現実的な並列応力計算においては共役勾配法の収束性が極めて悪化する可能性がある。本論文では、局所化前処理付き線形共役勾配法の収束性を向上させるために特異領域を考慮した領域分割を行うことが有効であると考察した。その結果、最大で約 10%の収束性向上を達成している。
第 5 章では、あたらしい非線形共役勾配法の前処理を提案している。提案された前処理つき非線形共役勾配法を、有限要素法に基づく第一原理計算へ適用し収束性を確認している。提案された前処理を用いることで、従来手法にくらべ最大で計算時間を 5 倍短縮することができた。のみならず、従来手法では計算が破綻する場合においても計算を進めることが可能となっている。
第 6 章では、結論をまとめている。
以上を要約すれば、本論文では現実的な数値計算に求められる高速で安定な非線形方程式解法として、新しい非線形共役勾配法のための前処理を提案し、有限要素法に基づく第一原理計算を用いて検証を行った結果、その有効性を確認することができている。このため、計算力学の発展に寄与するところが大きいと言える。
よって、本論文は博士(工学)の学位請求論文として合格と認められる。