論文の内容の要旨

論文題目　Extensions of the Conjugate Residual Method
(共役残差法の拡張)

氏　　名　曽我部 知広

計算機を用いて多自由度系の現象を解明する科学技術計算の方法は, 理論や実験と同様に科学的方法の一つとして広く認知されており, 近年の計算機の発達によりその重要性が益々高まっている. このなかで, 科学技術計算の基盤を支える高品質な数値計算アルゴリズムを開発することは必要不可欠であり, 特に応用諸分野で頻繁に現れる大規模連立一次方程式に対する高速・高安定数値解法の開発は重要な課題である.

連立一次方程式の数値解法は, 直接法, 定常反復法, そしてクリロフ部分空間法に大別される. 直接法のなかで LU 分解法は代表的であり, 中小規模の問題に対して有効である. しかしながら, 所要演算量が行列サイズの 3 乗に比例するため, 大規模行列に対する計算時間の爆発的増加が問題となる. 定常反復法の代表としては逐次過剰緩和 (SOR) 法があり, 実装の容易さのため特に流体計算分野で普及しているが, 特定のクラスの行列しか適用できないため近年の多様化する問題に対応しきれないのが現状である. 一方, クリロフ部分空間法は近年急速に発展を遂げた解法であり, 共役勾配 (CG) 法と共役残差 (CR) 法が代表的である. そして, これらはエルミート行列用であるため, 特に CG 法の非エルミート行列用への拡張である双共役勾配 (Bi-CG) 法が 1976 年に提案されて以降, Bi-CG 法の積型解法とよばれる加速手法の開発が自乗共役勾配 (CGS) 法を発端として現在国際的に主流な研究テーマの一つである.

本論文では, 主流であるBi-CG法の加速手法の開発を行うのではなく, その基幹解法であるBi-CG法よりも高性能な基幹解法を探すべく, CR法を非エルミート行列用や複素対称行列用に拡張した. そして, 得られたアルゴリズムを基礎とする積型解法の理論がBi-CG法と同様に構築可能であることを示した. 一方, Bi-CG法の積型解法の一つである自乗共役勾配(CGS)法に対して収束の安定化を図り, その方法は新たに提案された積型解法の一つに応用できることを示した. 具体的な成果は以下の4点である.

(A) CR法の非エルミート行列用への拡張： 双共役残差(Bi-CR)法の提案

(B) CR法の複素対称行列用への拡張： 共役直交-共役残差(COCR)法の提案

(C) Bi-CR法の積型解法の理論構築およびその一例である自乗共役残差(CRS)法の提案

(D) 自乗共役勾配(CGS)法の安定化

上記の項目(A)～(D)がそれぞれ本論文の第3章～第6章に対応しており, 以下にそれらの詳細を述べる. まず, クリロフ部分空間法について説明する. クリロフ部分空間法とは, 次の残差列

$$\boldsymbol{r}_n \in K_{n+1}(A, \boldsymbol{r}_0) \cap W_n^{\perp}, \quad n = 0, 1, \dots \tag{1}$$

を生成する解法族の総称である. ここで W_n は n 次元部分空間であり, $K_n(A, \boldsymbol{r}_0)$ は n 次元クリロフ部分空間とよばれ, 以下のように定義される.

$$K_n(A, \boldsymbol{r}_0) := \mathrm{span}\{\boldsymbol{r}_0, A\boldsymbol{r}_0, \dots, A^{n-1}\boldsymbol{r}_0\}.$$

(A) CR法は, 式(1)において

$$W_n = AK_n(A, \boldsymbol{r}_0) \tag{2}$$

とし, $\boldsymbol{x}_0$ を初期近似解としたアフィン空間 $\boldsymbol{x}_0 + K_n(A, \boldsymbol{r}_0)$ 上で残差ベクトルの2-ノルムを短い漸化式で最小化する解法である. この結果, 残差ノルムの単調減少性が保証され, 数値実験においても安定な収束の振る舞いを示す. しかしながら A がエルミートでないならばこのような解法は短い漸化式, すなわち少ないメモリ量と演算量では一般には得られないことがFaber & Manteuffel(1984)によって示されている. そこで本研究ではCR法を非エルミート行列用に拡張するために, 次の部分空間

$$W_n = A^H K_n(A^H, \boldsymbol{r}_0^*) \tag{3}$$

を選択することにより短い漸化式を有する解法が得られることを示した. 得られたアルゴリズムをBi-CR法と名付け, 破綻が無ければ高々全空間の次元数の反復回数で収束することを示した. 数値実験では多くの場合, Bi-CG法よりもその残差ノルムが滑らかであり, より速く収束したことからBi-CR法はBi-CG法と同様に重要な基幹解法となり得ることが分かった.

(B) 複素対称行列を係数行列とする連立一次方程式は, 音響学や大規模電子構造計算などの分野で頻繁に現れ, その高速解法の開発が強く望まれている. そこで本研究では, 次の部分空間

$$W_n = \bar{A}K_n(\bar{A}, \bar{r}_0) \tag{4}$$

を選択することにより短い漸化式を有する解法 (COCR 法) が得られることを示した. 最小残差性は理論的に失われるものの, 数値実験では, 多くの場合ほぼ残差ノルムが単調減少し, 定評のある COCG 法と同程度以上の収束性を示したため, COCR 法は実用性の高いアルゴリズムであることが分かった.

特に, 係数行列 A が実対称のときに COCR 法は CR 法に帰着するため, COCR 法は CR 法を複素対称行列用へ拡張した解法であるといえる. また Bi-CR 法は, 係数行列 A が複素対称のとき, $\boldsymbol{r}_0^* = \bar{\boldsymbol{r}}_0$ とすることにより式 (3) は式 (4) となるため COCR 法となり, エルミートのときは $\boldsymbol{r}_0^* = \boldsymbol{r}_0$ とすることにより式 (3) は式 (2) になるため CR 法に帰着する. したがって, Bi-CR 法は, CR 法や COCR 法を非エルミート行列用へ拡張した解法であるといえる.

(C) Bi-CR 法の収束性を加速するために, Bi-CR 法の積型解法の理論構築を行なった. 具体的には, 以下のように (A) で得られた Bi-CR 法の残差ベクトルに, 原点で値が 1 となる n 次多項式 (加速多項式) を乗じた.

$$\boldsymbol{r}_n = H_n(A)\boldsymbol{r}_n^{\text{Bi-CR}}.$$

次に, Bi-CG 法に対するこの種の加速法は十分に発達しているため, このアイディアを Bi-CR 法の積型解法に応用した. そして一例として, 加速多項式を Bi-CR 法で用いられている多項式とすることにより自乗共役残差 (CRS) 法を導出し, 数値例により自乗共役勾配 (CGS) 法よりも高速かつ高精度の近似解を生成することを検証した. また CRS 法は, Helmholtz 方程式の境界値問題で他の有力な Bi-CG 法の積型解法である Bi-CGSTAB 法や GPBi-CG 法よりも高速かつ高精度の解を生成したため, 非エルミート行列を係数行列に持つ連立一次方程式の有効な解法になることが分かった.

(D) Bi-CG 法の積型解法の一つである CGS 法は, 他の有力な積型解法よりも速く収束することがあるがその収束の不安定さが問題とされている. そこで, まず CGS 法で用いられている多項式を包含する新しい多項式を用いて残差ベクトルを再定義した. 次に, その多項式に含まれている一つの自由パラメータを残差ノルムの局所的最小化に用いることにより CGS 法の加速・安定化を図り, その有効性を数値実験で検証した. また, このアイディアは上述の CRS 法にも応用可能であることを示した.

以上のように, 本論文では CR 法を非エルミート行列用や複素対称行列用に拡張し, 得られたアルゴリズムの性質に関する理論的な解析を行なった. そして, 数値実験によりそれらの性能評価を行なった. 更に Bi-CR 法を基礎とした積型解法の理論を構築し, 例として CRS 法を導出し, 数値実験によりその有効性を検証した. 一方, CGS 法の収束性の向上に関する研究を行い, それが CRS 法にも応用可能であることを示した.