

審査の結果の要旨

論文提出者氏名 曾我部 知広

物理学・工学的諸問題を計算機上で数値的に解明する際に、大規模で疎な連立一次方程式が頻繁に現れることから、この方程式を数値的に高速かつ高精度に解くことのできる解法の開発は重要な課題とされてきた。近年、その課題に答える解法としてクリロフ部分空間法が注目されており、その開発が現在国際的に主流な研究テーマの一つである。本論文は、エルミート行列用のクリロフ部分空間法の一つである共役残差法を非エルミート行列用へ拡張するという基礎研究を行い、さらにそれを元にして新しく提案した複素対称行列用の解法および非エルミート行列用の積型解法は従来法よりも多くの場合において計算効率が良いことを数値実験により検証したものであって、全7章から成る。

第1章 “Introduction” では、科学技術計算の分野に現れる大規模で疎な連立一次方程式を効率良く解くことの重要性を説明し、その解法としてクリロフ部分空間法に焦点を当て、その従来研究の背景を紹介した上、本論文の目的・構成について述べている。

第2章 “Krylov subspace methods” では、本研究の基礎となるクリロフ部分空間法の枠組みを説明し、この視点からエルミート行列用、複素対称行列用、そして非エルミート行列用の解法を系統的に説明している。また、応用上重要である前処理について簡潔に述べている。

第3章 “Bi-CR: a biconjugate residual method” では、エルミート行列用の共役残差(CR)法の残差ベクトル列が満たすA-直交性をA-双直交性に拡張することにより、短い漸化式で共役残差法を非エルミート行列用に拡張することに成功し、その結果として、双共役残差(Bi-CR)法を提案した。そして、多くの数値例を通して、Bi-CR法は従来の重要な基幹解法とされてきた双共役勾配(Bi-CG)法よりも高速かつ良好な収束の振る舞いを示すことを検証した。この結果は Bi-CR法を基礎とする新しい高速解法の開発の可能性を示唆しており、またその具体例を第4章および第5章で述べる。

第4章 “COCR: a conjugate orthogonal conjugate residual method” では、複素対称行列を係数とする連立一次方程式を高速に解く重要性を述べており、そのための解法である共役直交-共役残差(COCR)法を提案した。これは、複素対称行列に対して Bi-CR法を適用して得られるアルゴリズムであるが、ここでは行列の特徴を利用してさらにその一反復当たりの演算量を半減させていることに成功した。そして、数値実験により COCR法は定評のある COCG法や QMR法と同等以上の性能であることを示した。

第5章 “CRS: a conjugate residual squared method” では、非エルミート行列を係数とする連立一次方程式を高速に解くことを目的とし、Bi-CR法の残差ベクトルに対して行列多項式を乗じることにより収束の加速を図るといった積型解法の導入を行った。その中から

自乗共役残差(CRS)法を提案し、数値実験により従来法であるCGS法が収束する例において、CGS法、Bi-CGSTAB法、そしてGPBi-CG法などの著名な解法よりも多くの場合高速であり、得られる近似解も高精度であることを示した。しかしながら、CGS法が収束しない例ではCRS法の収束は遅くなることがあったため広く実用的であるとは言い難い。そこではBi-CR法の積型解法に用いる行列多項式の模索を今後の課題としている。

第6章“SCGS: a stabilized CGS method”では、非エルミート行列用の高速解法であるCGS法は、しばしば不規則な収束の振る舞いを示すことに対して、その振る舞いを滑らかにする安定化自乗共役勾配法(SCGS)法を提案した。そして、数学的にSCGS法はCGS法よりも必ず少ない反復回数で収束することを証明しており、実際の数値例を通して、CGS法よりも良好な収束性を有することを検証した。最後に、SCGS法のアイデアを前章のCRS法に対して適用することにより、CRS法の更なる加速・安定化を図ることを今後の課題としている。

第7章“Conclusion”は、前6章をまとめ、今後の課題および展望を述べたものである。

以上要するに、本論文は科学技術計算の分野に現れる大規模で疎な連立一次方程式の高速解法であるクリロフ部分空間法の枠組みの中から従来法よりも有用な基幹解法を提案した上、それを基礎とした実用的かつ高性能な解法を目的に応じて開発したものであって、理論と応用の両方にとって重要な結果であり、物理学・工学的諸問題の計算機上での数値的な解明に資すると期待される。これらの点で、本研究は数理工学の発展に寄与するところが大きい。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。