

氏 名 杉原 光太

学位(専攻分野) 博士(情報学)

学位記番号 総研大甲第 1882 号

学位授与の日付 平成28年9月28日

学位授与の要件 複合科学研究科 情報学専攻
学位規則第6条第1項該当

学位論文題目 半正定値系に対する右前処理 MINRES 法

論文審査委員 主 査 教授 速水 謙
教授 合田 憲人
教授 宇野 毅明
准教授 後藤田 洋伸
教授 杉原 正顯 青山学院大学
助教 今倉 暁 筑波大学

論文内容の要旨

Summary of thesis contents

半正定値系に対する右前処理 MINRES 法

大規模疎で対称特異な連立一次方程式を、数値的に効率よく解くことを考える。

対称特異な連立一次方程式は、準定常電磁場問題や静磁場問題を、辺要素を用いた有限要素法により離散化した際や、全周ノイマン条件を境界条件とするポワソン方程式を離散化した際や、非圧縮流体を記述する Stokes 方程式を有限要素法の一つの手法により離散化した際に得られる。

特異系は正則系と異なり、右辺ベクトルが係数行列の値域に入らない場合(この場合を系が **inconsistent** と呼び、値域に入る場合を **consistent** と呼ぶ)が起きる。Inconsistent な系を考慮すると、特異系は **consistent**, **inconsistent** いずれの場合も最小二乗問題を解くことに帰着される。

特異系が **inconsistent** になるのは偏微分方程式を離散化する場合の領域近似誤差、右辺ベクトルを決める際の観測誤差の影響や応用分野として静磁場問題がある。

本論文では特異系に対する前処理つき反復法の研究が、正則系と比較し少ないことを背景とし、対称特異系に対して基礎反復法として既存の Krylov 部分空間法の何れかを選択すべきか検証し、さらに効率よく頑強は前処理を開発することを研究対象とした。

係数行列が半正定値で、右辺ベクトルが係数行列の値域に入らない場合、CG 法(共役勾配法, Conjugate Gradient method)は最小二乗解への収束が保証されていない。一方、MINRES 法(最小残差法, Minimal Residual method)は、対称特異系に対して右辺ベクトルが係数行列の値域に入る、入らないに関わらず、最小二乗解に収束することが数学的に保証されている。このことから本研究では、基礎反復法として MINRES 法を選択した。MINRES 法は残差の 2 乗ノルムを最小化する解法である。

次に前処理を開発するため、本論文では、右前処理 MINRES 法の定式化を行った。

右前処理 MINRES 法の定式化にあたり、元の係数行列に右前処理をした行列は対称行列ではないので、右前処理行列を正定値対称行列 \mathbf{M} としたとき、元の係数行列に右前処理をした行列が \mathbf{M} の逆行列に関する内積に関して自己随伴であることを使う。さらに右前処理 MINRES 法は通常の 2 ノルムでなく、 \mathbf{M} の逆行列に関するノルムに関して残差を最小化する。このため、連立一次方程式が **consistent** な場合は MINRES 法と右前処理 MINRES 法は等価であるものの、**inconsistent** な場合は必ずしも等価でない。

まず、右前処理 MINRES 法は、正則な系のみならず、特異系に対しても、任意の右辺ベクトル、任意の初期ベクトルに対して、前処理行列に関するノルムの意味で残差が最小となる解に破綻することなく収束することを証明した。特に、**consistent** な系の場合、初期ベクトルを係数行列に対して右前処理した行列の値域に入るようにとれば、前処理行列に関するノルムでの最小ノルム解に収束することも証明した。

さらに、通常、CG 法の両側前処理の計算量を削減するのに用いられる Eisenstat's trick を SSOR 右前処理に適用した MINRES 法(以後 E-SSOR 右前処理 MINRES 法と呼ぶ)を提案し、同手法の有効性を電磁場解析などで生じる半正定値系に対する数値実験により検証する。半正定値系は特異系の部分集合である。

数値実験から E-SSOR 右前処理 MINRES 法は前処理なし MINRES 法やスケーリング右前処理 MINRES 法より高速かつ頑強であった。また Eisenstat's trick の効果を検証する

(別紙様式 2)
(Separate Form 2)

ため, E-SSOR 右前処理 MINRES 法と右前処理型 SSOR 前処理 MINRES を比較した場合, 数値実験では演算量の見積もりより CPU 時間の比較では高速になった. 要因として非零要素成分に関する間接アドレスを使っていることが考えられる.

一方で係数行列が悪条件で *inconsistent* な系に対しては, E-SSOR 右前処理 MINRES 法は重み付き正規方程式の相対残差ノルムを倍精度演算の意味では十分に小さくすることができなかった.

そこで重み付き正規方程式の相対残差ノルムが十分小さくならない原因は, 丸め誤差の影響により, E-SSOR 右前処理 MINRES 法が生成する基底の線形独立性が失われているためと考え, その線形独立性を回復させることにより収束性を改善するため, E-SSOR 右前処理 MINRES 法をリスタートすることを提案した. さらにリスタートするステップ数を自動的に決める手法も提案した.

E-SSOR 右前処理 MINRES 法をリスタートすることにより, 重み付き正規方程式の相対残差ノルムを倍精度演算の意味で十分小さくすることができた. さらに元の問題が 2 ノルムの意味での最小二乗問題なので, 前処理行列に依存しない正規方程式の相対残差ノルムの値で, E-SSOR 右前処理 MINRES 法の収束性を評価した. その結果, 数値実験に利用した悪条件な半正定値な係数行列を持つ *inconsistent* な系に対して, リスタートを用いた E-SSOR 右前処理 MINRES 法は, 正規方程式の相対残差ノルムを倍精度演算の意味で十分小さくすることができ, リスタートの効果がある事例があることを確認できた.

(別紙様式 3)
(Separate Form 3)

博士論文の審査結果の要旨
Summary of the results of the doctoral thesis screening

(論文審査結果) [2016年7月25日実施]

出願者、杉原光太氏の博士論文審査委員会を、7月25日に審査員全員出席の下、開催した。博士学位請求論文(以下、「論文」)の内容についてスライドを用いて約1時間の口頭発表を行った後に、約1時間の口頭試問および審査を行った。その結果、出願論文は博士(情報学)の学位を授与するのに十分な内容を有し、出願者に学位を授与することが適切であると判断した。

論文の概要

本論文は対称で特異な係数行列をもつ連立一次方程式に対して右前処理により高速化したMINRES法を反復法として適用することを提案し、同手法による近似解が、丸め誤差のない計算において、任意の右辺および初期解に対して破綻せずに最小二乗解に収束することを証明している。

また、前処理としてEisenstatのトリックを用いたSSOR法を用いることを提案し、電磁界の辺有限要素解析や、The University of Florida Sparse Matrix Collection(以下、「UFSMC」)、の悪条件で半正定値対称で、consistentおよびinconsistentな連立一次方程式(以下、「系」)に対する数値実験により、その有効性を検証している。

更に、手法による近似解の精度をより高めるためにリスタートが有効であることも数値実験により検証している。

本論文は1章(序章)、2章(応用分野)、3章(関連研究)、4章(MINRES法)、5章(前処理付きMINRES法)、6章(E-SSOR右前処理MINRES法)、7章(数値実験・結果(E-SSOR右前処理MINRES法の検証))、8章(数値実験・結果(リスタートMINRES法))、9章(Inconsistentな系に対するE-SSOR右前処理MINRES法の解の精度)、10章(Eisenstatのトリックの適用範囲ならびにEisenstat IC(0)右前処理MINRES法)、11章(Inconsistentな系に対する関連研究手法の数値実験・結果)、12章(4倍精度と倍精度演算の比較による、丸め誤差の影響の検証)、13章(まとめ)、14章(今後の研究課題)、の93ページからなる。

1章では特異系および研究課題について述べている。2章では応用分野として全周ノイマン問題、準定常電磁場解析、静磁場問題について述べている。3章では関連研究として、クリロフ部分空間法、前処理について述べている。4章ではMINRES法のアルゴリズムについて述べている。

5章は本論文の理論部分で、まず右前処理と左前処理について元の問題との等価性について述べている。次に、右前処理MINRES法を定式化し、本論文の主定理である、同手法による近似解が、対称で特異な連立一次方程式(最小二乗問題)に対して、丸め誤差のない計算において、任意の右辺および初期解に対して破綻せずに最小二乗解に収束することを証明している。証明の枠組みとしては、アルゴリズムを右前処理した係数行列の像空間成分と、その前処理行列を計量とする直交補空間の成分に分離する方法をとっている。

6章では、MINRES法の効率的な右前処理法として、Eisenstatのトリックを用いたSSOR法(以下「E-SSOR右前処理法」)を提案し、それによる演算量の削減効果を見積もっている。

次に数値実験による提案手法の有効性を検証している。問題としては、準定常電磁場、

(別紙様式 3)

(Separate Form 3)

静電磁場の辺要素を用いた有限要素解析、UFSMC、で生じる半正定値対称な係数行列をもつ、consistent(右辺が係数行列の像空間に入る)およびinconsistent (consistentでない)な系を扱っている。

まず、7章では、Eisenstatのトリックを用いることによりSSOR前処理法が2倍以上高速化することを確認している。次に、E-SSOR右前処理MINRES法を、前処理無しのMINRES法、対角項による右前処理MINRES法と比較して計算時間にして2-3倍以上高速であることを示している。

8章では、さらに解の精度を向上させるのに、MINRES法の反復を途中で打ち切り、その時の近似解の情報を用いて反復を再開するリスタートすることが有効であることを数値実験により示している。また、自動的にリスタートする方法を提案し、その有効性を検証している。

以上の数値実験では、収束の判定には(0に収束することが理論的に保証される)前処理された正規方程式の相対残差2乗ノルムを用いている。

9章では、7、8章と同様の数値実験を、(本来求められる)元の正規方程式の相対残差2乗ノルムを用いて収束判定して行っている。その結果リスタートを用いればUFSMCの問題では提案手法でよい精度の解が得られるが、静磁場の問題では前処理無しのMINRES法の方がよりよい精度の解が得られた。また、非対称系の解法である右前処理GMRES法とも比較したが、提案手法の方が高速でよい精度が得られた。

10章ではEisenstatのトリックを不完全コレスキー分解の1種であるIC(0)法と比較し、前者の方が優れていることを数値実験により示している。

11章では、リスタート付きの提案手法の、MINRES法に関連するMR-2法、RRMR法、MINRES-QLP法に対する優位性を数値実験により示している。

12章では、丸め誤差の影響を調べている。提案手法に対して4倍精度を使うことにより問題によってはリスタートなしでよい収束が得られるが、別の問題では4倍精度でもリスタートが必要であることを数値実験により示している。

13章で本論文を総括し、14章で今後の研究課題にふれている。

なお、本論文の4-9章の内容の一部は、

杉原光太，速水 謙，Ning Zheng，半正定値系に対する Eisenstat SSOR による右前処理 MINRES 法，

日本応用数学会論文誌, Vol. 26, No.2, pp. 124-166, 2016

として既に掲載されている。

論文の評価

発表では、論文の全般の説明が行われ、多くの質疑に対して適切な応答がなされた。本論文は科学計算・数値解析における問題である対称特異、半正定値で大規模疎な連立一次方程式に対する新しい前処理付き反復法を提案し、その有効性を理論、数値実験の両面から検証しており、この分野において貢献している。

よって、審査委員一同、出願論文は博士(情報学)の学位を授与するのに十分な内容を持ち、出願者に博士の学位を授与することが適切であると判断した。

(試験結果) [2016年7月25日実施]

口述による試験を実施した結果、出願者はその博士論文を中心としてそれに関連がある

(別紙様式 3)

(Separate Form 3)

専門分野及びその基礎となる分野について博士(情報学)の学位の授与に十分な学識を有するものと判断し、合格と判定した。