テンソル積構造 GPBiCG 法を用いた波動方程式に対する数値解法

情報科学科　増田　凪沙　　　指導教員：代田　健二

1　はじめに

本研究では，波動方程式の順問題に対する数値解法について考察する．対象とする波動方程式は以下のとおりである [1].

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - K(x,y)\nabla\cdot\left(\frac{1}{\rho(x,y)}\nabla u\right) = f \text{ in } \Omega\times(0,T]. \qquad (1)$$

昨年度，大森 [2] は式 (1) に対する直接的数値解法を提案した．その手法では空間方向に差分法，時間方向をスペクトル選点法により離散化し，導出されたテンソル積構造の係数行列による連立一次方程式の解法として，テンソル積構造を利用した BiCGSTAB 法を考察し，少メモリ量で実行可能なことを明らかにした．一方収束させることはできず，近似解を得ることができなかった．本研究では，線形計算の手法を GPBiCG 法に変更し，数値実験によりその有効性を検証する．

2　スペクトル選点-差分法による離散化

方程式 (1) の初期値境界値問題に対する空間方向近似には，x 方向に $m+1$, y 方向に $n+1$ 等分割の差分法を採用する．それにより，次の二階連立常微分方程式の初期値問題が得られる．

$$\begin{cases} M\ddot{\boldsymbol{u}}(t) + A\boldsymbol{u}(t) = \boldsymbol{F}(t),\ t\in(0,T]\,, \\ \boldsymbol{u}(0) = \boldsymbol{u}_0,\ \dot{\boldsymbol{u}}(0) = \boldsymbol{v}_0\,. \end{cases} \qquad (2)$$

ここで，$M\in\mathbb{R}^{mn\times mn}$，$A\in\mathbb{R}^{mn\times mn}$, $\boldsymbol{u}=(u_1,u_2,...,u_{mn})^{\mathrm{T}}$, $\boldsymbol{F}\in\mathbb{R}^{mn}$ である．上式 (2) を近似する方法として，Gauss-Lobatto 選点によるスペクトル選点法を採用する．ここで (2) を 1 階の常微分方程式へ変換する．$N = m\times n$ としたとき，

$$\begin{cases} \tilde{M}\dot{\boldsymbol{U}}(t) - \tilde{A}\boldsymbol{U}(t) = \tilde{\boldsymbol{F}}(t),\ t\in(0,T]\,, \\ \boldsymbol{U}(0) = \tilde{\boldsymbol{U}}(0)\,. \end{cases} \qquad (3)$$

ただし，$\boldsymbol{U} = (\boldsymbol{u},\dot{\boldsymbol{u}})^{\mathrm{T}}\in\mathbb{R}^{2N}$, $\tilde{\boldsymbol{F}} = (\boldsymbol{0}_N,\boldsymbol{F})$, $\tilde{\boldsymbol{U}} = (\boldsymbol{u}_0,\boldsymbol{v}_0)^{\mathrm{T}}$ であり，

$$\tilde{M} = \begin{pmatrix} E_N & O_N \\ O_N & M \end{pmatrix},\ \tilde{A} = \begin{pmatrix} O_N & E_N \\ -A & O_N \end{pmatrix}$$

である．$\boldsymbol{0}_N\,, O_N$ は，N 次の零ベクトル，零行列である．ここで $\hat{t}_k (k=0,1,\ldots,N_T)$ を Gauss-Lobatto 選点とする．また，$\boldsymbol{U}_k = \boldsymbol{U}(t_k)$ とし,$\tilde{\boldsymbol{U}} = (\boldsymbol{U}_0,\ldots,\boldsymbol{U}_{N_{T-1}})^{\mathrm{T}}$ とおく．このとき，(3) へスペクトル選点法を適用することにより，次の $2N\cdot N_T$ 次連立一次方程式を得ることができる．

$$\tilde{C}\tilde{\boldsymbol{U}} = \tilde{\boldsymbol{b}}. \qquad (4)$$

D_t をスペクトル選点法における 1 階微分行列とするとき

$$\tilde{C} = \frac{2}{T}D_t\otimes\tilde{M} - E_{N_T}\otimes\tilde{A}\in\mathbb{R}^{2N\cdot N_T\times 2N\cdot N_T}\,.$$

E_{N_T} は N_T 次単位行列，$\otimes$ は行列のクロネッカー積であり，

$$\tilde{\boldsymbol{b}} = \left(F(t_k) - \frac{2}{T}(D_t)_{k,N_T}\tilde{M}\tilde{U}_0\right)_{k=0}^{N_T-1}\in\mathbb{R}^{2N\cdot N_T}\,.$$

3　テンソル積行列に対する GPBiCG 法

$A,C\in\mathbb{R}^{m\times m}, B,D\in\mathbb{R}^{n\times n}, u\in\mathbb{R}^{nm}, v\in\mathbb{R}^{mn}$ とする．このとき，次の連立一次方程式を考える．

$$(A\otimes B - C\otimes D)\boldsymbol{u} = \boldsymbol{v}\,. \qquad (5)$$

ここで，逆 vec 作用素を用いて $U = \mathrm{vec}^{-1}(\boldsymbol{u}), V = \mathrm{vec}^{-1}(\boldsymbol{v})$ とすることにより，(5) は次のテンソル構造を用いない形に変換できる [3].

$$BUA^{\mathrm{T}} - DUC^{\mathrm{T}} = V \qquad (6)$$

テンソル積構造の方程式 (6) に GPBiCG 法 [3] を適用し，残差計算部分などに逆 vec 作用素による同値変形を施すことで，次のアルゴリズムを導出することができる．このアルゴリズムを (4) へ適用し計算することで，(1) の近似解を得ることができる．

Algorithm 1 テンソル構造 GPBiCG 法

Require:$A,C\in\mathbb{R}^m, B,D\in\mathbb{R}^n, v\in\mathbb{R}^{m\times n}$
Given $U,L,P,T,Tnew,W,Z,Y = O_{n\times m}\in\mathbb{R}^{n\times m}$;
$V = \mathrm{vec}^{-1}(v)\in\mathbb{R}^{n\times m}$;
$R = V - (BUA^{\mathrm{T}} - DUC^{\mathrm{T}})$; $R' = R$; $r = (R',R)m$; $\beta = 0$;
repeat
  $P = R + \beta(P-L); \alpha = \frac{r}{(R',BPA'-DPC')}$;
  $Y = T - R - \alpha W + \alpha(BPA^{\mathrm{T}} - DPC^{\mathrm{T}})$;
  $Tnew = R - \alpha(BPA^{\mathrm{T}} - DPC^{\mathrm{T}})$;
  ζ,η を計算する.
  $L = \zeta(BPA^{\mathrm{T}} - CPC^{\mathrm{T}}) + \eta(T - R + \beta L)$;
  $T = Tnew$; $Z = \zeta R + \eta Z - \alpha L$; $U = U + \alpha P + Z$;
  $R = T - \eta Y - \zeta(BTA^{\mathrm{T}} - DTC^{\mathrm{T}}); \beta = \frac{\alpha(R',R)m}{\zeta r}$;
  $W = BTA^{\mathrm{T}} - DTC^{\mathrm{T}} + \beta(BPA^{\mathrm{T}} - DPC^{\mathrm{T}})$;
until $\sqrt{(R,R)m}\le\epsilon\sqrt{(V,V)m}$
repeat $u = \mathrm{vec}(U)\in\mathbb{R}^{m:\times n}$

$N_T = 10$ としたときの数値実験結果は，表 1 のとおりである．分割数が少ない場合，GPBiCG 法は収束し，一定の精度で結果を得ることができた．一方，分割数を増やすと GPBiCG 法による線形計算は収束しなかった．その原因としては，丸め誤差の影響，収束が遅い等が考えられる．今後の課題は，収束を速める方法である前処理の本手法への適用である．

表 1　数値実験結果

N	100	400	900
相対誤差	6.76×10^{-5}	1.79×10^{-5}	5.80×10^{-3}

参考文献

[1] 斎藤正徳, 地震波動論, 東京大学出版会, 2009.
[2] 大森智仁, 波動方程式の順問題に対する直接的数値解法, 平成 28 年度愛知県立大学情報科学部卒業論文, 2017.
[3] 藤野清次, 岩里洸介, 同期点を減らした GPBiCG 法の並列性能評価, 日本シミュレーション学会論文誌, Vol. 7, pp. 103–108, 2015.