テンソル積 GPBiCGSafe 法を用いた波動方程式に対する直接的数値解法

情報科学科　小川　祥平　　　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直接的数値解法について考察する．領域 $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ $(d = 2, 3)$ は短形領域とし，$T > 0$ は観測時間の長さとする．このとき，本研究で対象とする波動方程式は以下のとおりである [1].

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

昨年度，増田 [2] は (1) に対する GPBiCG 法を用いた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を用いて離散化し，導出された係数行列がテンソル積構造をもつ連立一次方程式の解法として，テンソル積 GPBiCG 法を考案することで，高い頻度で反復計算を収束させることに成功した．しかし，従来法である Newmark 法との計算時間の比較が行われておらず，さらに頻度は減ったものの連立一次方程式求解の反復計算が収束しないという問題があった．よって本研究では，線形計算の手法をより収束性の高い GPBiCGSafe 法 [3] に変更し，さらに GPU による並列計算を用いることで，従来法より高速な数値解法を開発することを目的とする．

2　スペクトル選点-差分法による離散化

波動方程式 (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．

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

ここで, $M \in \mathbb{R}^{mn\times mn}$, $A \in \mathbb{R}^{mn\times mn}$, $\boldsymbol{u} = (u_1, u_2, \ldots, u_{mn})^{\mathrm{T}}$, $\boldsymbol{F} \in \mathbb{R}^{mn}$ である．(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．$N = mn$ としたとき，(2) は

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

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

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

$\boldsymbol{0}_N\,, O_N$ 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，$\boldsymbol{U}_k = \boldsymbol{U}(t_k)$ とし, $\tilde{\boldsymbol{U}} = (\boldsymbol{U}_0, \ldots, \boldsymbol{U}_{N_{T-1}})^{\mathrm{T}}$ とおく．(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られる．

$$(\frac{2}{T}D_t \otimes \tilde{M} - E_{N_T} \otimes \tilde{A})\tilde{\boldsymbol{U}} = \tilde{\boldsymbol{b}}. \tag{4}$$

D_t をスペクトル選点法における 1 階微分行列，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 GPBiCGSafe 法

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

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

ここで, 逆 vec 作用素を用いて $U = \mathrm{vec}^{-1}(\boldsymbol{u}), V = \mathrm{vec}^{-1}(\boldsymbol{v})$ とすると，(5) は次のテンソル構造を用いない形に変換できる [4].

$$BUA^{\mathrm{T}} - DUC^{\mathrm{T}} = V.$$

テンソル積構造の線形方程式 (5) に GPBiCGSafe 法を適用し，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．

Algorithm 1 テンソル積 GPBiCGSafe 法

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

4　数値実験

$N = 80 \times 80, N_T = 30$ のときの数値実験結果は，表 1 の通りである．GPU を使用しない場合の計算時間は約 261 秒であるのに対し，GPU を用いた場合は 7.48 秒となり，計算を高速化することに成功した．一方，同じ程度の相対誤差になる Newmark 法の計算時間は，約 6.5 秒となりテンソル積 GPBiCGSafe 法の方が遅い結果となった．効果的な前処理を適用する等により，従来法より高速かつ大規模問題でも実用時間で計算可能にすることが，今後の課題である．

表 1　計算時間の比較の結果

Newmark 法	GPBiCGSafe 法 (GPU)
6.49 秒	7.48 秒

参考文献

[1] 斎藤正徳, 地震波動論, 東京大学出版会, 2009.
[2] 増田凪, 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, 平成 29 年度愛知県立大学情報科学部卒業論文, 2018.
[3] 藤野清次, 降順に展開した漸化式を使用しない GPBiCGSafe 法の考案, 数理解析研究所講究録, Vol. 1791, pp.31–36, 2012.
[4] 山本哲郎, 行列解析の基礎–Advanced 線形代数–, SGC ライブラリ 79, サイエンス社, 2010.