前処理付きテンソル積 GPBiCGSafe 法による 3 次元波動方程式に対する数値解法

土居　紘平　　　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 $\Omega \subset \mathbb{R}$ 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．

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

西島 [1] は小川 [2] 提案した 2 次元スカラー波動方程式に対するテンソル積 GPBiCGSafe 法を用いた直接的数値解法を 3 次元問題へと適用した．その手法では波動方程式の初期境界値問題に対する空間方向近似には差分法を，時間方向近似にはスペクトル選点法を採用している．一方，西島の研究においては，分割数が少ない場合は実用時間で計算できたものの，分割数が多くなるにつれ計算時間が実用的な時間に収まらないという問題があった．その原因は，離散化後に現れる連立一次方程式に対する反復解法の収束までの回数が多くなることであった．

そこで本研究では，連立一次方程式に前処理を加えることで反復解法を加速させ，実用時間での計算実現を目指す．

2　3 次元差分近似

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 $Nx+1$，y 方向に $Ny+1$，z 方向に $Nz+1$ 等分割差分法を採用する．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．

$$\begin{cases} \ddot{u}(t) - A_{3D}u(t) = F(t), t \in (0,T). \\ u(0) = u_0, \quad \dot{u}(0) = v_0. \end{cases} \tag{2}$$

ここで，A_{3D} は 3 次元差分近似の係数行列であり，

$$\begin{aligned} A_x &= \frac{1}{\Delta x^2}\left(2I_{N_x} - J_{N_x}\right), A_y = \frac{1}{\Delta y^2}\left(2I_{N_y} - J_{N_y}\right), \\ A_z &= \frac{1}{\Delta z^2}\left(2I_{N_z} - J_{N_z}\right) \end{aligned}$$

としたとき，

$$\begin{aligned} A_{3D} &= (I_{N_x} \otimes A_{2D}) + (A_z \otimes I_{N_x N_y}) \\ &= I_{N_x} \otimes (I_{N_y} \otimes A_x + A_y \otimes I_{N_x}) + A_z \otimes I_{N_x N_y} \\ &= I_{N_x} \otimes I_{N_y} \otimes A_x + I_{N_x} \otimes A_y \otimes I_{N_z} + A_z \otimes I_{N_x N_y} \end{aligned} \tag{3}$$

となる．ただし，

$$\begin{aligned} u(t) &= (u_1(t), u_2(t), ..., u_{N_x N_y N_z}(t))^{\mathrm{T}}, \\ F(t) &= (f_1(t), f_2(t), ..., f_{N_x N_y N_z}(t))^{\mathrm{T}}. \end{aligned}$$

また，A_{2D} は 2 次元差分近似の係数行列である．時間方向近似については，2 次元と同様に，スペクトル選点法を採用する．その結果，次の連立一次方程式を得ることができる．

$$\left(\frac{2}{T}\widetilde{D}_t \otimes I_{2N} - I_{N_T} \otimes \widetilde{A}_{3D} \right) \widetilde{U} = \widetilde{\boldsymbol{b}}. \tag{4}$$

ここで $\widetilde{D}_t$ はスペクトル選点法による微分行列であり，

$$\begin{aligned} \widetilde{A}_{3D} &= \begin{pmatrix} O_N & I_N \\ A_{3D} & O_N \end{pmatrix}, \\ \widetilde{\boldsymbol{b}} &= \left(\begin{pmatrix} \boldsymbol{0} \\ \boldsymbol{F}(t_l) \end{pmatrix} - \frac{2}{T}(D_t)_{l,N_T}\widetilde{\boldsymbol{U}}_0 \right)_{l=0}^{N_T-1}. \end{aligned}$$

3　前処理を用いたテンソル積 BiCG 系解法

テンソル積の和で表された行列に対する前処理として，KPA 前処理 [3] が提案されている．具体的には，係数行列が $\sum_{i=1}^{s} G_i \otimes H_i$ である場合，次の行列 $P = X \otimes Y$ を前処理行列として使用する方法である．

$$\min \left\| \sum_{i=1}^{s} G_i \otimes H_i - X \otimes Y \right\|_F^2.$$

ただし，$\|\cdot\|_F$ は行列のフロベニウスノルムである．なお行列 X, Y は存在し，それぞれ G_i, H_i の一次結合で与えられる．

(4) に対する KPA 前処理行列は，次の多変数関数を最小にする $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2)$, $\boldsymbol{\beta} = (\beta_1, \beta_2)$ により求めることができる．

$$f(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) = \mathrm{tr}(\widehat{G}\widehat{H}) - 2\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}}\widehat{G}\widehat{H}\boldsymbol{\beta} + (\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}}\widehat{G}\boldsymbol{\alpha})(\boldsymbol{\beta}^{\mathrm{T}}\widehat{H}\boldsymbol{\beta}).$$

ただし，$\mathrm{tr}(\cdot)$ は行列のトレースであり，

$$\begin{aligned} \widehat{G} &= \begin{pmatrix} \frac{4}{T^2}\|\widetilde{D}_t\|_F^2 & \frac{2}{T}\mathrm{tr}(\widetilde{D}_t) \\ \frac{2}{T}\mathrm{tr}(\widetilde{D}_t) & N_T \end{pmatrix}, \\ \widehat{H} &= \begin{pmatrix} 2N & 0 \\ 0 & \mathrm{tr}(A_{3D}^{\mathrm{T}}A_{3D}) + N \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

このとき，X, Y は次のとおりとなる．

$$X = \frac{2\alpha_1}{T}\widetilde{D}_t + \alpha_2 I_{N_t},\ Y = \beta_1 I_{2N} + \beta_2 \widetilde{A}_{3D} \tag{5}$$

得られた前処理行列の逆行列 $P^{-1} = (X \otimes Y)^{-1} = X^{-1} \otimes Y^{-1}$ を (4) の両辺へ掛け合わせ，その方程式にテンソル積 BiCG 系解法を用いることで，3 次元波動方程式の近似解を得ることができる．

数値実験結果については，発表時に示す．

参考文献

[1] 西島涼平，テンソル積 GPBiCGSafe 法を用いた 3 次元波動方程式に対する直接的数値解法，令和元年度愛知県立大学情報科学部卒業論文， 2020.

[2] 小川祥平，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，平成 30 年度愛知県立大学情報科学部卒業論文，2018.

[3] A. N. Langville and W. J. Stewart, A Kronecker product approximation preconditioner for SANs, Numer. Linear Algebra Appl., 11, pp. 723–752, 2004.