

超大型浮体の波浪応答解析への GMRES-DR の適用

Application of the GMRES with deflated restarting (GMRES-DR) to wave response analysis of a
Very Large Floating Structure (VLFS)

巻幡憲俊*・宇都宮智昭**・渡邊英一***

Noritoshi MAKIHATA, Tomoaki UTSUNOMIYA and Eiichi WATANABE

*学生員 京都大学大学院 工学研究科社会基盤工学専攻 (〒 606-8501 京都市左京区吉田本町)

**正会員 工博 京都大学助教授 大学院工学研究科社会基盤工学専攻 (〒 606-8501 京都市左京区吉田本町)

***フェロー Ph.D., 工博 京都大学教授 大学院工学研究科社会基盤工学専攻 (〒 606-8501 京都市左京区吉田本町)

The generalized minimal residual method (GMRES) is a well-known iterative method for solving large non-Hermitian linear systems of equations. Since GMRES becomes increasingly expensive and requires more storage as the iteration proceeds, it generally uses restarting, which slows the convergence. However, if the new starting vector is chosen appropriately at the time of the restart, this can improve the convergence. By the GMRES with deflated restarting (GMRES-DR) method, approximate eigenvectors determined from the previous subspace are included in the new subspace and this deflates the smallest eigenvalues. We apply the GMRES-DR method for the analysis of the boundary value problem related to the diffraction/radiation wave field around a Very Large Floating Structure (VLFS). The stability problem is examined by the developed algorithm.

Key Words : GMRES, GMRES-DR, iterative methods, non-Hermitian systems, VLFS, boundary element method, fast multipole method

1. はじめに

波動方程式や水波の回折・散乱に関する境界値問題を境界要素法により離散化すると、非 Hermite 行列を係数とする連立一次方程式 $Ax = b$ が現れる。問題の規模が大きくなると、消去法により連立一次方程式を解くのは困難となり反復法が用いられる。

反復法の代表例に generalized minimal residual method (GMRES)¹⁾がある。しかし、GMRES は収束に到るまでの反復回数が増えるに従って計算量および記憶容量をたくさん必要とするため、行列のサイズが大きい場合は用いることができない。このため、実際には探索空間の最大の次元 M を行列のサイズよりかなり小さく選んだリスタート版 GMRES(M)¹⁾を用いることになるが、近似解が停滞して解に収束しないことがある。また GMRES が実際に適用できる問題で GMRES と比較すると、 M を小さくしていくに従って収束回数が GMRES のそれよりも大変大きくなる。

GMRES(M) が生成する Krylov 部分空間は、絶対値の大きい固有値群に対応する固有ベクトル群が張る部分空間を近似する傾向にある²⁾。このことから、固有ベクトルの情報を残すことで収束性の改善が期待できると考えられ、GMRES-E³⁾、GMRES-IR⁴⁾、GMRES-DR⁵⁾ が Morgan により開発された。これらが構成する近似解列は 1 サイクルにおいては同じであるが、GMRES-IR は implicitly restarted Arnoldi (IRA)⁶⁾を用いているため探索空間の最大の次元を 40 より大きく取ると数値的に不安定になる現象が確認された⁷⁾。

そこで本研究では、探索空間の最大の次元に関する制約の解消を目的として GMRES-DR の導入を試みる。

原論文では必ずしも陽な形ではアルゴリズムが与えられていないため、第 2 章では GMRES-DR を具体的なアルゴリズムを含めて詳しく紹介する。第 3 章では GMRES-DR を超大型浮体まわりの回折・散乱波浪場に関する境界値問題の解析に実際に適用し、そのベンチマーク計算の結果から本手法が数値的に安定であることを示す。第 4 章では本論文の内容を簡単にまとめる。

2. GMRES-DR

連立一次方程式を反復法により解く方法の一つとして GMRES with deflated restarting (GMRES-DR)⁵⁾がある。GMRES-DR はリスタート時に、生成された Krylov 部分空間を、その部分空間における絶対値の小さい harmonic Ritz value 群に対応する harmonic Ritz ベクトル群が張る部分空間に圧縮し、新しく生成される探索空間に含ませる。生成された部分空間は Krylov 部分空間であり、この部分空間は絶対値の大きい固有値群に対応する A -不変部分空間⁸⁾を近似する傾向にある²⁾ため、計算された harmonic Ritz value 群のうち絶対値の小さいものに対応する harmonic Ritz ベクトル群を保存することにより、生成される探索空間が停滞しにくくなると期待できる。

ただし、GMRES-DR が生成していく探索空間は、GMRES が生成していく探索空間の部分空間になるので、GMRES より速く収束することはない。

以下において、 A は N 次元正則複素行列、 b は N 次元複素ベクトル、 x_0 は初期ベクトル、 $r_0 = b - Ax_0$ は初期残差を表す。

ここでは、GMRES-DR を構成している方法を 8 つ

の節に分けて説明する。第1-3節では GMRES で使われている方法を説明する。第4-6節では GMRES-DR のリスタートの部分を説明する。第7-8節において、GMRES-DR のアルゴリズムを与える。

2.1 Krylov 部分空間

GMRES-DR による近似解列 $\{x_m\}_{m=0,1,\dots}$ は、ある探索空間の中で残差 $r_m = b - Ax_m$ のノルム $\|r_m\|_2$ が最小となるように構成される。ここでは探索空間として、Krylov 部分空間を扱う。

C^N の部分空間 S が Krylov 部分空間であるとは、ある正の整数 m とある N 次元ベクトル v が存在して、

$$S = \text{Span}\{v, Av, \dots, A^{m-1}v\} \quad (1)$$

と表されることである。ここで、 $\text{Span}\{v, Av, \dots, A^{m-1}v\}$ は $v, Av, \dots, A^{m-1}v$ が生成する C^N の部分空間である。

2.2 Arnoldi 法

N 次元行列 A を、固有値問題における中間形である Hessenberg 形⁹⁾に変換し、さらに Krylov 部分空間の正規直交基底を構成する方法として Arnoldi 法^{5),9)}がある。

Arnoldi 法

初期ベクトル v_1 , ($\|v_1\|_2 = 1$) をとる;

for $m = 1, \dots, M$ do

$w = Av_m$;

for $i = 1, \dots, m$ do

$h_{im} = (w, v_i)$;

$w = w - v_i h_{im}$;

$h_{m+1,m} = \|w\|_2$;

$v_{m+1} = w / h_{m+1,m}$.

$\bar{H}_M$ を Arnoldi 法により得られる $(M+1) \times M$ 行列とする。 H_M を $\bar{H}_M$ から第 $M+1$ 行を取り除いた $M \times M$ Hessenberg 行列とする。 V_{M+1} を v_1 から v_{M+1} を並べた $N \times (M+1)$ 行列、 V_M を V_{M+1} から第 $M+1$ 列を取り除いた行列とする。また e_M は第 M 成分のみが1である単位ベクトルであり、 e_M^H は e_M のエルミート転置である。このとき次の関係が成立する。

$$AV_M = V_M H_M + h_{M+1,M} v_{M+1} e_M^H \quad (2)$$

$$= V_{M+1} \bar{H}_M. \quad (3)$$

また、 $v_1, \dots, v_M$ は Krylov 部分空間 $\text{Span}\{v_1, Av_1, \dots, A^{M-1}v_1\}$ の正規直交基底をなしている。

2.3 QR 分解

近似解 x_M は、 x_M が $x_0 + \text{Span}\{r_0, Ar_0, \dots, A^{M-1}r_0\}$ を動くとき、残差 r_M のノルムが最小となるように構成される。

x_M は、ある M 次元ベクトル d により $x_M = x_0 + V_M d$ と表されるので、

$$r_M = b - Ax_M \quad (4)$$

$$= r_0 - AV_M d \quad (5)$$

$$= V_{M+1}(\|r_0\|_2 e_1 - \bar{H}_M d) \quad (6)$$

であるから、

$$\|r_M\|_2 = \|\|r_0\|_2 e_1 - \bar{H}_M d\|_2 \quad (7)$$

となり、 d を求める最小2乗問題に帰着される。 $\bar{H}_M$ を $M+1$ 次元ユニタリ行列 $\bar{Q}_M$ と、 $i > j$ のとき $r_{ij} = 0$ である $(M+1) \times M$ 行列 $\bar{R}_M$ により、 $\bar{H}_M = \bar{Q}_M \bar{R}_M$ と QR 分解する。このとき、 R_M を $\bar{R}_M$ から第 $M+1$ 行を取り除いた M 次元上三角正則行列とし、 c を $\bar{Q}_M^H \|r_0\|_2 e_1$ の第 $M+1$ 成分を取り除いた M 次元ベクトルとすると、 $d = R_M^{-1} c$ が求めるものである。ここで、 $\bar{Q}_M^H$ は $\bar{Q}_M$ のエルミート転置である。したがってこの d により、 $x_M = x_0 + V_M d$ は r_M のノルムを最小にする。

$(M+1) \times M$ 行列 $\bar{H}_M$ の QR 分解に LAPACK¹⁰⁾ のルーチン ZGEQRF と ZUNMQR を利用する。

2.4 harmonic Ritz pair

N 次元ベクトル空間 C^N は、 N 次元行列 A の広義固有空間により直和分解される。また A が Hermite 行列のとき、探索空間 $\text{Span}\{r_0, Ar_0, \dots, A^{M-1}r_0\}$ は絶対値の大きな固有値群に対応する固有ベクトル群が張る部分空間を近似する傾向がある²⁾。計算された近似固有値群のうち絶対値の小さいものに対応する部分空間を保存することにより探索空間が停滞しにくくなると期待できる。

T を M 次元部分空間とする。 (θ_i, y_i) が A の T における harmonic Ritz pair であるとは、 W を T の基底を並べた $N \times M$ 行列、 W^H を W のエルミート転置とすると、

$$W^H A^{-1} W g_i = \frac{1}{\theta_i} W^H W g_i \quad (8)$$

$$y_i = A^{-1} W g_i \quad (9)$$

により定義する。ここで g_i は0でない M 次元ベクトルである。また、 (θ_i, y_i) は T の基底 W の選び方に依存しない。

ここでは、 $T = \text{Span}\{AV_M\}$ として harmonic Ritz pair を計算する。このとき、 $G_M = H_M + |h_{M+1,M}|^2 H_M^{-H} e_M e_M^H$ とおき、 (θ_i, g_i) を G_M の eigenpair とし、 $y_i = V_M g_i$ とおくと、 (θ_i, y_i) は A の T における harmonic Ritz pair となっている。ここで、 H_M^{-H} は H_M の逆行列のエルミート転置である。

$\bar{c}$ を $M+1$ 次元ベクトルで $r_M = V_{M+1} \bar{c}$ を満たすものとする。このとき G_M は次のように表される。

$$G_M = H_M - \frac{h_{M+1,M}}{c_{M+1}} c c^H. \quad (10)$$

ここではこの式を用いて G_M を計算する。

このとき次の関係が成り立つ。

$$AV_M = V_M G_M + \frac{h_{M+1,M}}{c_{M+1}} r_M e_M^H. \quad (11)$$

したがって、 $\gamma_i = \frac{h_{M+1,M}}{c_{M+1}} e_M^H g_i$ とおけば、

$$A y_i = \theta_i y_i + \gamma_i r_M \quad (12)$$

が成り立つ。

G_M の eigenpair (θ_i, g_i) の計算に LAPACK¹⁰⁾ のルーチン ZGEEV を利用する。

2.5 Krylov 部分空間 (リスタート)

$y_1, \dots, y_K$ を保存する harmonic Ritz ベクトル群として、 $x_K := x_M$, $r_K := r_M$ とおくと、GMRES-DR のリスタート以降の探索空間 S^{new} は次のようになる。

$$S^{new} = \text{Span}\{y_1, \dots, y_K, r_K, Ar_K, \dots, A^{M-K-1}r_K\}. \quad (13)$$

ここでは、 S^{new} が Krylov 部分空間であることを 3 段に分けて説明する。

第 1 段:

$$\omega_i(T) = \frac{\prod_{l=1}^K (\theta_l - T)}{\theta_i - T} \quad \text{とおくと、}$$

$$\sum_{i=1}^K \frac{\theta_i^j}{\omega_i(\theta_i)} = 0, (0 \leq j \leq K-2), \quad (14)$$

$$\sum_{i=1}^K \frac{\theta_i^{K-1}}{\omega_i(\theta_i)} = (-1)^{K-1}. \quad (15)$$

実際、 $\pi_i(T) = \frac{\prod_{l=1}^{K-1} (\theta_l - T)}{\theta_i - T}$ とおくと、

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^K \frac{\theta_i^j}{\omega_i(\theta_i)} &= \sum_{i=1}^{K-1} \frac{\theta_i^j}{\pi_i(\theta_i)} \frac{1}{\theta_K - \theta_i} + \frac{\theta_K^j}{\prod_{l=1}^{K-1} (\theta_l - \theta_K)} \\ &= \frac{1}{\prod_{l=1}^{K-1} (\theta_l - \theta_K)} \left\{ \theta_K^j - \sum_{i=1}^{K-1} \frac{\theta_i^j}{\pi_i(\theta_i)} \pi_i(\theta_K) \right\} \end{aligned}$$

が成り立つ。 $F_j(T) = T^j - \sum_{i=1}^{K-1} \frac{\theta_i^j}{\pi_i(\theta_i)} \pi_i(T)$ とおくと、

$F_j(\theta_1) = \dots = F_j(\theta_{K-1}) = 0$ である。 $0 \leq j \leq K-2$ のとき T に関する多項式 $F_j(T)$ の次数は $K-2$ 以下であるから、 $F_j(T) = 0$ 、また $j = K-1$ のとき $F_j(T)$

の最高次の係数は 1 であるから、 $F_j(T) = \prod_{l=1}^{K-1} (T - \theta_l)$

である。ここで、 $\theta_1, \dots, \theta_{K-1}$ はすべて異なっていると仮定している。

第 2 段:

$$s = \sum_{i=1}^K \frac{1}{\gamma_i \omega_i(\theta_i)} y_i \quad \text{とおくと、}$$

$$A^j s = \sum_{i=1}^K \frac{\theta_i^j}{\gamma_i \omega_i(\theta_i)} y_i, (0 \leq j \leq K-1), \quad (16)$$

$$A^{K-1} s = \sum_{i=1}^K \frac{\theta_i^{K-1}}{\gamma_i \omega_i(\theta_i)} y_i + (-1)^{K-1} r_K. \quad (17)$$

第 3 段:

$$\text{Span}\{s, As, \dots, A^{M-1}s\} = \quad (18)$$

$$\text{Span}\{y_1, \dots, y_K, r_K, Ar_K, \dots, A^{M-K-1}r_K\} \quad (19)$$

実際、 $\text{Span}\{s, As, \dots, A^{M-1}s\} \subseteq \text{Span}\{y_1, \dots, y_K, r_K, Ar_K, \dots, A^{M-K-1}r_K\}$ が成り立つが、近似解 x_M は真の解ではないとしているので、左辺の次元は M である。よって、包含関係は等号となる。

2.6 Arnoldi 法 (リスタート)

$\text{Span}\{y_1, \dots, y_K, r_K\}$ の正規直交基底 V_{K+1}^{new} と $(M+1) \times K$ 行列 $\bar{H}_K^{new}$ で $AV_K^{new} = V_{K+1}^{new} \bar{H}_K^{new}$ を満たすものを構成し、Arnoldi 法により V_{K+1}^{new} を V_{M+1}^{new} に、 $\bar{H}_K^{new}$ を $\bar{H}_M^{new}$ に拡張する。

$M \times K$ 行列 $(g_1, \dots, g_K)$ を列ベクトルが直交している $M \times K$ 行列 Q_K と $K \times K$ 上三角行列 R_K により $(g_1, \dots, g_K) = Q_K R_K$ と QR 分解する。次に $\bar{c}$ を Q_K に対して直交化したものを q_{K+1} ($\|q_{K+1}\|_2 = 1$) とし、 $Q'_K = \begin{pmatrix} Q_K \\ 0 \end{pmatrix}$, $\bar{Q}_{K+1} = (Q'_K, q_{K+1})$; とおくと、適当な $K+1$ 次元ベクトル $\bar{c}^{new}$ により、

$$\bar{c} = \bar{Q}_{K+1} \bar{c}^{new} \quad (20)$$

と表される。ここで、 $y_1 = V_M g_1, \dots, y_K = V_M g_K$, $r_K = V_{M+1} \bar{c}$ であった。

このとき、 $\bar{H}_K^{new} = \bar{Q}_{K+1}^H \bar{H}_M Q_K$ とおくと、

$$\bar{H}_M Q_K = \bar{Q}_{K+1} \bar{H}_K \quad (21)$$

と表されることを示したいが、 $\bar{H}_M q_1, \dots, \bar{H}_M q_K$ が $q_1, \dots, q_{K+1}$ が生成する部分空間に属していることを示せばよい。 $\Theta_K = \text{Diag}(\theta_1, \dots, \theta_K)$ とおく。ここで、 $\text{Diag}(\theta_1, \dots, \theta_K)$ は対角要素が $\theta_1, \dots, \theta_K$ である $K \times K$ 対角行列である。

$$\bar{H}_M Q_K = \left(\begin{pmatrix} G_K \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{h_{M+1,M}}{c_{M+1}} \bar{c} e_M^H \right) Q_K \quad (22)$$

$$\begin{aligned} &= \bar{Q}_{K+1} \left(\begin{pmatrix} R_K \Theta_K R_K^{-1} \\ 0 \end{pmatrix} \right. \\ &\quad \left. + \frac{h_{M+1,M}}{c_{M+1}} \bar{c}^{new} e_M^H Q_K \right). \quad (23) \end{aligned}$$

次に、 $V_{K+1}^{new} = V_{M+1} \bar{Q}_{K+1}$ とおくと、

$$AV_K^{new} = AV_M Q_K \quad (24)$$

$$= V_{M+1} \bar{H}_M Q_K \quad (25)$$

$$= V_{M+1} \bar{Q}_{K+1} \bar{H}_K^{new} \quad (26)$$

$$= V_{K+1}^{new} \bar{H}_K^{new}, \quad (27)$$

$$r_K = V_{M+1} \bar{c} \quad (28)$$

$$= V_{M+1} \bar{Q}_{K+1} \bar{c}^{new} \quad (29)$$

$$= V_{K+1}^{new} \bar{c}^{new} \quad (30)$$

が成り立つ。

Arnoldi 法により V_{K+1}^{new} を V_{M+1}^{new} に、 $\bar{H}_K^{new}$ を $\bar{H}_M^{new}$ に拡張すると、 V_M^{new} は $\text{Span}\{y_1, \dots, y_K, r_K, Ar_K, \dots, A^{M-K-1}r_K\}$ の正規直交基底をなし、 $AV_M^{new} = V_{M+1}^{new} \bar{H}_M^{new}$ が成り立つ。 x_M は、 x_M が x_{K+1} $\text{Span}\{y_1, \dots, y_K, r_K, Ar_K, \dots, A^{M-K-1}r_K\}$ を動くと、残差 r_M のノルムが最小となるように構成される。

x_M は、ある M 次元ベクトル d により $x_M = x_K + V_M^{new}d$ と表されるので、

$$r_M = b - Ax_M \quad (31)$$

$$= r_K - AV_M^{new}d \quad (32)$$

$$= V_{M+1}^{new}(\bar{c}^{new} - \bar{H}_M^{new}d) \quad (33)$$

であるから、

$$\|r_M\|_2 = \|\bar{c}^{new} - \bar{H}_M^{new}d\|_2 \quad (34)$$

となり、 d を求める最小 2 乗問題に帰着される。ここで、 $\bar{c}^{new}$ は $K+1$ 次元ベクトルであったが、その成分を 0 により拡張した $M+1$ 次元ベクトルと考えている。

2.7 GMRES-DR

以上で準備が終わり、GMRES-DR⁵⁾ のアルゴリズムとその記憶容量に関する説明に入る。GMRES-DR は、リスタート版 GMRES(M) に harmonic Ritz ベクトル群の情報を組み込んだものである。始めに GMRES を M 回実行し、その次に harmonic Ritz pair 群を計算する。絶対値の小さい harmonic Ritz value 群に対応する harmonic Ritz ベクトル群が張る K 次元の部分空間を、次に生成する探索空間に含ませてリスタートする。ここで、 c は $\bar{c}$ の第 $M+1$ 成分を除いたベクトル、 $Q'_K = \begin{pmatrix} Q_K \\ 0 \end{pmatrix}$ である。

GMRES-DR

1. 探索空間の最大の次元 M 、リスタート時に保存する harmonic Ritz ベクトルの数 K を選ぶ;
初期ベクトル x_0 を取る;
 $r_0 = b - Ax_0$;
2. $v_1 = r_0 / \|r_0\|_2$;
 $\bar{c} = \|r_0\|_2 e_1$;
3. Arnoldi 法により V_{M+1} と $\bar{H}_M$ を求める;
 $\|\bar{c} - \bar{H}_M d\|_2$ を最小にする d を求める;
4. $x_M = x_0 + V_M d$; $r_M = b - Ax_M$;
 $\bar{c} = \bar{c} - \bar{H}_M d$;
5. $G_M = H_M - \frac{h_{M+1,M}}{c_{M+1}} c e_M^H$;
QR 法により G_M の固有値、固有ベクトルである harmonic Ritz pair $(\theta_1, g_1), \dots, (\theta_M, g_M)$ を求める;
 $(\theta_1, g_1), \dots, (\theta_M, g_M)$ を並び替えて、
 $|\theta_1| \leq \dots \leq |\theta_M|$ となるようにする;
6. $(g_1, \dots, g_K) = Q_K R_K$ と QR 分解する;
 $q_{K+1} = (I_{K+1} - Q'_K Q_K'^H) \bar{c}$; $q_{K+1} = q_{K+1} / \|q_{K+1}\|_2$;
 $\bar{Q}_{K+1} = (Q'_K, q_{K+1})$;
 $\bar{c} = \bar{Q}_{K+1}^H \bar{c}$;
 $\bar{H}_K^{new} = \bar{Q}_{K+1}^H \bar{H}_M Q_K$; $V_{K+1}^{new} = V_{M+1} \bar{Q}_{K+1}$;
 $\bar{H}_K = \bar{H}_K^{new}$; $V_{K+1} = V_{K+1}^{new}$;
Arnoldi 法の $K+1$ 回目へ進む。

$G_M = H_M - \frac{h_{M+1,M}}{c_{M+1}} c e_M^H$ において、 c_{M+1} が 0 であるときは本方法はブレイクダウンすることになるが、その際は通常の GMRES(M) でリスタートすればよい。

更新された $v_1, \dots, v_{K+1}$ たちが張る部分空間はまた Krylov 部分空間であり、リスタートをしない GMRES が生成する探索空間の部分空間である。このた

め、GMRES-DR は GMRES より速く収束することはない。 K を 0 にとれば、GMRES-DR($M, 0$) は通常の GMRES(M) である。記憶容量は通常の GMRES(M) と比べて $N(K+1) + (M+1)(M+K) + M^2$ 増加するので、 N が M に比べて十分大きいとき、GMRES-DR(M, K) の記憶容量は GMRES($M+K$) とほとんど同じである。また探索空間の中で最小条件を満足しているの、残差が振動することはなく、反復回数の増加に対して単調に減少する。

2.8 GMRES-DR のアルゴリズム

ここでは、GMRES-DR のアルゴリズムを前節より詳細に与える。GMRES-DR、BASIS、UPDATE の 3 つのアルゴリズムを載せている。tol は 1 よりも小さく、マシンイプシロンよりも大きい実数である。iter は反復回数、rest はリスタート回数である。配列の成分が 0 であることが分かっているところには念のため 0 を代入している。

GMRES-DR

1. M, K を選ぶ;
初期ベクトル x を取る;
 $r = b - Ax$;
iter=0;
2. $m = 0$; rest=0;
 $v_1 = r / \|r\|_2$;
 $c_1 = \|r\|_2$;
for $i = 2, \dots, M+1$ do
 $c_i = 0$
3. $m = m + 1$; iter=iter+1;
 $v_{m+1} = Av_m$;
BASIS($m, N, h_{-,m}, V_{m+1}$) を呼ぶ;
for $i = m+2, \dots, M+1$ do
 $h_{i,m} = 0$
 $\bar{H}_m = Q_m \bar{C}_m$ と QR 分解する;
 $\bar{c} = Q_m^H \bar{c}$;
if $(|c_{m+1}| < \text{tol} \|b\|_2)$ then
UPDATE(m, N, x, G_m, c, V_m) を呼ぶ;
return;
end if
if $(m < M)$ 3 へ進む;
4. if (rest>0) then
for $i = 1, \dots, K$ do
 $c_i = 0$
end if
UPDATE(M, N, x, G_M, c, V_M) を呼ぶ;
 $\bar{c} = Q_M c_{M+1} e_{M+1}$;
if $(K = 0)$ 2 へ進む;
if $(|c_{M+1}| = 0)$ 2 へ進む;
5. $G_M = H_M - \frac{h_{M+1,M}}{c_{M+1}} c e_M^H$;
QR 法により G の固有値、固有ベクトル $(\theta_1, q_1), \dots, (\theta_M, q_M)$ を求める;
 $(\theta_1, q_1), \dots, (\theta_M, q_M)$ を並び替えて、
 $|\theta_1| \leq \dots \leq |\theta_M|$ となるようにする;
6. $(q_1, \dots, q_K) = G_K R_K$ と QR 分解する;
BASIS($K, M+1, \bar{c}, \bar{Q}_{K+1}$) を呼ぶ;

for $i = K + 2, \dots, M + 1$ do
 $c_i = 0$
 $\bar{H}_K^{new} = \bar{G}_{K+1}^H \bar{H}_M G_K; V_{K+1}^{new} = V_{M+1} \bar{G}_{K+1};$
 $\bar{H}_K = \bar{H}_K^{new}; V_{K+1} = V_{K+1}^{new};$
for $j = 1, \dots, K$ do
for $i = K + 2, \dots, M + 1$ do
 $h_{ij} = 0$
 $m = K; \text{rest} = \text{rest} + 1;$
3へ進む

BASIS(m, N, h, V_{m+1})

for $i = 1, \dots, m$ do
 $h_i = (v_i, v_{m+1});$
 $v_{m+1} = v_{m+1} - h_i v_i$
 $h_{m+1} = \|v_{m+1}\|_2;$
 $v_{m+1} = v_{m+1} / h_{m+1};$
return

UPDATE(m, N, x, R_m, c, V_m)

$c = R_m^{-1} c;$
 $x = x + V_m c;$
return

3. ベンチマーク計算の結果

ここでは超大型浮体まわりの回折・散乱波浪場に関する境界値問題の解析^{(11),(12),(13)}に GMRES-DR を適用した結果を載せる。

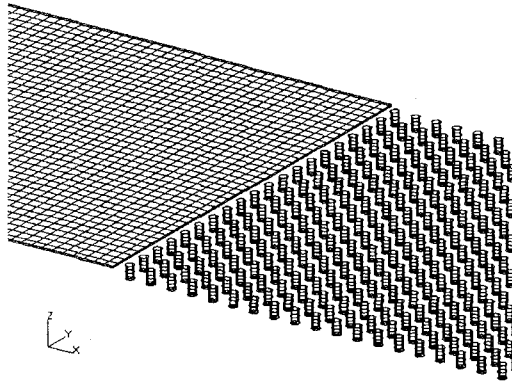


図-1 解析モデル

解析モデルは、図-1 に表される、箱形ポンツーンと円柱形セミサブを接合したハイブリッド型浮体である。また、その主要諸元を表-1 に表す。平均自由水面上に xy 平面をとり、 z 軸は浮体中心をとおり鉛直上向きが正の向きとなるように定義する。これに、波振幅 A 、角周波数 ω の微小振幅波が入射するものとする。入射波方向 β を、 $\beta = 0$ の時に x 軸の正の方向から負の方向へ進行する波となり、 $\beta = \pi/2$ の時に y 軸の正の方向から負の方向へ進行する波となるような方向として定義する。

流体を非粘性、非圧縮性の完全流体とし、流体運動を非回転的とするとき、全ての流体運動は速度ポテンシャル ϕ で表現することができる。また、流体運動、

表-1 主要諸元

VLFS の型	semisub	pontoon	hybrid
長さ (m)	1000	2000	3000
幅 (m)	400	400	400
喫水 (m)	12.0	1.5	12.0 & 1.5
柱の直径 (m)	8.0	—	8.0
柱の数	1000	—	1000
柱間の距離 (m)	20.0	—	20.0
曲げ剛性 (kNm)	1.5×10^8	1.5×10^9	←
ポアッソン比	0.3	0.3	0.3
水深 (m)	20.0	20.0	20.0

浮体運動いずれも定常的な角周波数 ω の調和振動をおこなっているものとする。このとき、全ての時間依存項について、以下のようにあらわす。

$$\Phi(x, y, z, t) = \text{Re}[\phi(x, y, z)e^{i\omega t}] \quad (35)$$

ただし、 i は虚数単位を、 t は時間をあらわす。

流体運動、浮体運動いずれも微小であるとし、流体運動については微小振幅波理論が、浮体運動については線形弾性理論が適用できるものとする。この前提のもとで、本研究であつかう問題を、速度ポテンシャル ϕ に関する境界値問題として定式化する。

$$\nabla^2 \phi = 0 \quad \text{in } \Omega \quad (36)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial z} = K \phi \quad \text{on } S_F \quad (37)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial z} = 0 \quad \text{on } B_0 \quad (38)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial n} = i\omega w(x, y) \quad \text{on } S_H \quad (39)$$

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \sqrt{r} \left(\frac{\partial(\phi - \phi_I)}{\partial r} - ik(\phi - \phi_I) \right) = 0 \quad \text{on } S_\infty \quad (40)$$

$$\phi_I = i \frac{gA}{\omega} \frac{\cosh k(z+h)}{\cosh kh} e^{ik(x \cos \beta + y \sin \beta)} \quad (41)$$

ここで、 ϕ_I は入射波ポテンシャルである。また、 Ω は流体領域を、 S_F は自由水面を、 B_0 はベースとなる $z = -h$ の一定水深面を、 S_H は浮体の没水表面を、 S_∞ は無限遠境界をあらわす。 K は無限水深時波数 ($= \omega^2/g$; g は重力加速度) を、 k は波数をあらわし、次式の分散関係式を満たす。

$$k \tanh kh = K \quad (42)$$

また、 n は単位法線ベクトル (流体から外向き方向を正とする) を、 $w(x, y)$ は浮体底面の鉛直たわみ振動に関する複素振幅をあらわす。 r は原点からの水平距離である。

速度ポテンシャル ϕ に関する境界条件式を積分方程式に代入すると次式が得られる。

$$4\pi\phi(x) + \int_{S_H} \left\{ \phi(\xi) \frac{\partial G(x, \xi)}{\partial n} - \phi(x) \frac{\partial G_2(x, \xi)}{\partial n} \right\} dS$$

$$\begin{aligned}
& -i\omega \sum_{j=1}^P \zeta_j \int_{S_H} G(x, \xi) f_j(\xi) n_z(\xi) dS \\
& = 4\pi \phi_I(x)
\end{aligned} \quad (43)$$

ここで、積分および法線微分は ξ に関して計算し、 $G(x, \xi)$ は水波 Green 関数、 $f_j(\xi)$ はモード関数、 ζ_j は複素振幅である。要素としては 8 節点 2 次要素を用いる。上式は、 S_H の表面上に配置される N 個の節点における未知ポテンシャル $\phi_i (i = 1, \dots, N)$ を未知数とする連立一次方程式に帰着される^{11),12)}。節点数は、セミサブ型が $N = 44000$ 、ポンツーン型が $N = 25921$ 、ハイブリッド型が $N = 69921$ である¹³⁾。

図-1 の解析モデルにおいて、入射角を x 軸から 60° 、入射波長 λ を 121.21m または 88.77m としてベンチマーク解析を行う。

表-2 ポンツーン 入射波長=121.21m

K	GMRES-DR(100, K)	GMRES(100 + K)
10	833	1164
20	836	1150
30	849	1097

表-3 ポンツーン 入射波長=88.77m

K	GMRES-DR(200, K)	GMRES(200 + K)
20	1578	2353
40	1598	2272
60	1638	2217

表-4 ハイブリッド 入射波長=121.21m

K	GMRES-DR(100, K)	GMRES(100 + K)
10	1694	2576
20	1487	2512
30	1410	2432

表-5 GMRES-DR、GMRES、full-GMRES 及び GPBi-CG の収束回数

λ	pontoon 121.21m	pontoon 88.77m	hybrid 121.21m
GMRES-DR	833	1578	1410
GMRES	1164	2353	2432
full-GMRES	340	614	426
GPBi-CG	1286	3044	—

表-2,3 は、ポンツーン部分 (節点数 $N = 25921$) に対して、入射波長を 121.21m または 88.77m として GMRES-DR と GMRES の収束回数を比較して表にしたものである。ここで、生成される Krylov 部分空間の最大の次元はそれぞれ 100、200 としており、 K は保存する近似固有ベクトルの数である。また、収束回数は $\|a\|_2 \leq 10^{-5} \|b\|_2$ が満たされる最小の数とした。リ

表-6 GMRES-DR、GMRES、full-GMRES 及び GPBi-CG の収束までの計算時間 (秒)

λ	pontoon 121.21m	pontoon 88.77m	hybrid 121.21m
GMRES-DR	24596.0	46554.7	148922.9
GMRES	33430.0	68482.1	254808.8
full-GMRES	10125.7	21536.2	45225.2
GPBi-CG	37363.2	88414.1	—

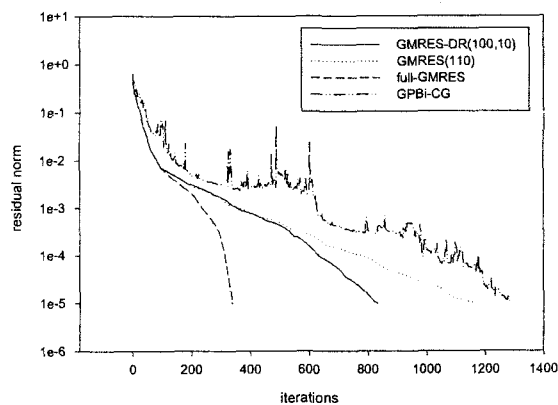


図-2 ポンツーン 入射波長=121.21m

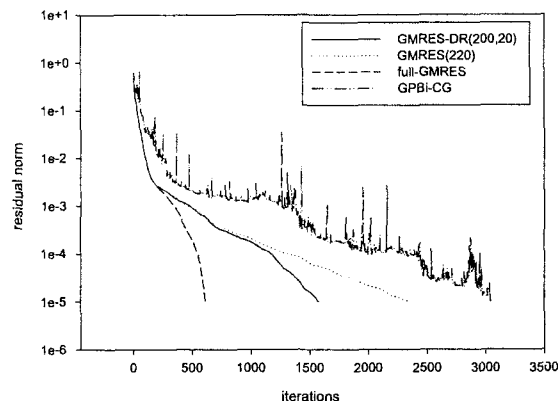


図-3 ポンツーン 入射波長=88.77m

スタートをかけなければ、full-GMRES においてそれぞれ 340、614 回の反復回数で収束する。同様に、表-4 は、ポンツーン部分とセミサブ部分を接合したハイブリッド型 (節点数 $N = 69921$) に対して、入射波長を 121.21m として GMRES-DR と GMRES の収束回数を比較して表にしたものである。リスタートをかけなければ、full-GMRES において 426 回の反復回数で収束する。

表-5,6 は、GMRES-DR、GMRES、full-GMRES 及び GPBi-CG¹⁴⁾を比較した結果である。GPBi-CG はハイブリッド型に対して 428494.9 秒計算を行ったが解に収束しなかった。ここでは full-GMRES は GMRES-DR の約 3 倍の記憶容量を使っている。また、ここでは GPBi-CG は GMRES-DR の約 1/10 の記憶容量しか使っていない。

GMRES-DR の収束特性を図-2,3,4 に表す。水平方

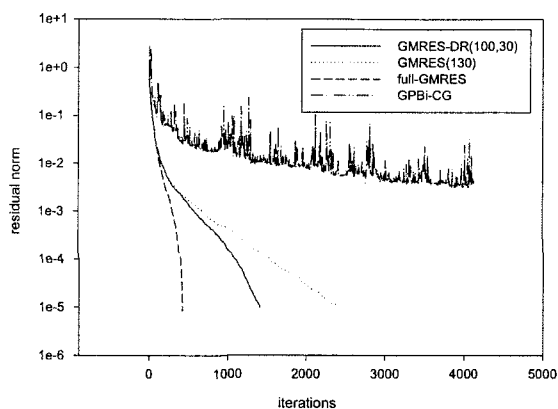


図-4 ハイブリッド 入射波長=121.21m

向の目盛は反復回数を表し、垂直方向の目盛は対数スケールでの相対残差ノルムを表す。実線で描かれているのが GMRES-DR である。反復はすべて初期値 $x_0 = 0$ から始め、IBM RS/6000SP (CPU POWER3 375MHz) の 1 ノードを使用して倍精度で計算した。

このモデルに対しては K として M の 20(%) ぐらいに選べばよいことがわかる。いずれの場合も GMRES-DR(M, K) では従来の GMRES($M + K$) と比較して、同程度の記憶容量でより少ない反復回数で収束していることが分かる。

なお、GMRES-IR⁴⁾は harmonic Ritz ベクトル群を IRA⁶⁾を用いて陰的に計算しているため、探索空間の最大の次元 M は 40 より大きく取ると数値的に不安定になる現象が確認された⁷⁾。GMRES-DR⁵⁾では harmonic Ritz ベクトル群を直接計算しているため、記憶容量は GMRES-IR よりおよそ $N \times K$ 増加したが、 M を 40 より大きく取ることができる。実際、本モデルに対して M として 500 としても、数値計算誤差の影響はあまり受けず、残差が反復回数の増加に対して単調に減少することを確認している。

4. おわりに

ここでは、本論文の内容を箇条書きで簡単にまとめる。

1. 原論文⁵⁾では必ずしも陽な形で与えられていない GMRES-DR のアルゴリズムを陽な形で与え、詳しく説明した。
2. 超大型浮体まわりの回折・散乱波浪場に関する境界値問題の解析に GMRES-DR を適用して、その収束性に関するベンチマーク計算結果を行い、本方法の有効性を実証した。
3. この問題に対しては、探索空間の最大の次元 M が 100 または 200 のとき、保存するベクトルの数 K として M の 20(%) ぐらいに選べば、従来の GMRES($M + K$) より速く解に収束することがわかった。

4. GMRES-IR⁴⁾において M を 40 より大きく取ると数値的に不安定になる現象が確認された⁷⁾が、本モデルに対しては、GMRES-DR では M を 500 としても、正常に動作することを確認した。

参考文献

- 1) Y.Saad and M.H.Schultz, GMRES: a generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems, *SIAM J. Sci. Statist. Comput.*, 7, pp.856-869, 1986.
- 2) B.N.Parlett, The symmetric eigenvalue problem, Prentice-Hall, Englewood, Cliffs, NJ, 1980.
- 3) R.B.Morgan, A restarted GMRES method augmented with eigenvectors, *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 16, pp.1154-1171, 1995.
- 4) R.B.Morgan, Implicitly restarted GMRES and Arnoldi methods for nonsymmetric systems of equations, *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 21, pp.1112-1135, 2000.
- 5) R.B.Morgan, GMRES with deflated restarting, *SIAM J. Sci. Comput.*, 24, pp.20-37, 2002.
- 6) D.C.Sorensen, Implicit application of polynomial filters in a k-step Arnoldi method, *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 13, pp.357-385, 1992.
- 7) 巻幡憲俊, 宇都宮智昭, 渡邊英一, 波浪回折問題のための境界要素法への GMRES-IR の適用, 土木学会応用力学論文集, Vol.6, pp.275-281, 2003.
- 8) 松阪和夫, 線形代数入門, 岩波書店, 1980.
- 9) 森 正武, 杉原正顕, 室田一雄, 線形計算「岩波講座, 応用数学」, 岩波書店, 1994.
- 10) E.Anderson, Z.Bai, C.Bischof, J.Demmel, J.Dongarra, J.D.Croz, A.Greenbaum, S.Hammarling, A.McKenney, S.Ostouchov, and D.Sorensen, LAPACK Users' Guide, 2nd ed., SIAM, Philadelphia, 1995. (小国力 訳: 行列計算パッケージ LAPACK 利用の手引, 丸善, 1995)
- 11) T.Utsunomiya, E.Watanabe and N.Nishimura, Fast multipole algorithm for wave diffraction/radiation problems and its application to VLFS in variable water depth and topography, *Proc. 20th Int. Conf. on Offshore Mech. & Arctic Eng.*, OMAE01-5202, 2001.
- 12) 宇都宮智昭, 渡邊英一, 超大型浮体の波浪応答解析のための高速化グリーン関数法の開発, 第 16 回海洋工学シンポジウム, 313-320, 2001.
- 13) T.Utsunomiya, E.Watanabe, Wave response analysis of hybrid-type VLFS by accelerated BEM, *Proc. 3rd Int. Conf. Hydroelasticity in Marine Technology*, 2003.
- 14) 藤野清次, 張紹良, 反復法の数理, 朝倉書店, 1996.

(2003 年 9 月 12 日 受付)