2G-01

線形発展方程式のためのInexact shift-invert Arnoldi法

橋本 悠香 †
慶応義塾大学理工学部 †

野寺 隆 ‡
慶応義塾大学理工学部 ‡

1 はじめに

$\Omega \subset \mathbb{R}^p$ をLipschitz連続な境界を持つ有界開集合として，$[0,T]\times\overline{\Omega}$ 上で定義された次のような初期値境界値問題を考える．

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u(t,x)}{\partial t} = \mathcal{L}u(t,x) & \text{in } (0,T]\times\Omega \\ u(t,x) = \phi(x) & \text{on } \{0\}\times\overline{\Omega} \\ u(t,x) = \psi(x) & \text{on } (0,T]\times\partial\Omega_1 \\ \dfrac{\partial u(t,x)}{\partial n} = \tau_1(x)u(t,x)+\tau_2(x) & \text{on } (0,T]\times\partial\Omega_2 \end{cases} \tag{1}$$

ただし，$\partial\Omega = \partial\Omega_1 \cup \partial\Omega_2$ であり，n は $\partial\Omega$ への単位法線ベクトル，$\mathcal{L}$ は $\mathcal{V}$ 上の微分作用素で，$u(t,\cdot)$ $(\forall t \in (0,T])$ に関して線形で t に依存しないものである．また，ϕ，ψ，τ_1，τ_2 は既知の関数とする．式 (1) で表される問題を有限要素法や有限差分法により，空間方向に離散化すると次式が導かれる [2].

$$\begin{cases} B\dot{y}(t) = -Ay(t) + c \\ y(0) = v \end{cases} \tag{2}$$

ただし，$A, B \in \mathbb{R}^{n\times n}$，$c, v \in \mathbb{R}^n$，$y(t) \in \left(L^2([0,T])\right)^n$ である．式 (2) の解は，行列 A，B が正則であれば次式のようになる．

$$y(t) = e^{-tB^{-1}A}(v - A^{-1}c) + A^{-1}c \tag{3}$$

よって，式 (3) に現れる行列指数関数を計算する必要がある．文献 [3] で提案されたArnoldi法 (AE法) で計算すると，行列 A，B の性質や t の値によっては反復回数が増加する．これを避けるために，Shift-invert Arnoldi法 (SIAE法) [4] が提案された．この方法では，収束が t にはよらず，さらに，収束に必要な反復回数は大幅に減少する [4]．式 (3) に現れる行列指数関数を計算するには，AE法では各反復において $B^{-1}Av_m$，SIAE法では $(B+\gamma A)^{-1}Bv_m$ を計算する必要があるから，AE法とSIAE法で1回の反復に必要な計算コストがほぼ等しくなる．よって，このような行列指数関数を計算するにはSIAE法が適しているといえる．ただし，SIAE法を用いたとしても，各反復に現れる線形方程式を解くには，かなりの計算コスト，メモリ，またはその両方が必要である．

本稿では，必要な $y(t)$ の近似の精度を保障しながら，各反復において現れる線形方程式を，反復法で解の精度を落としながら解くことで，高速化を行うInexact Shift-invert Arnoldi法 (ISIAE法) を提案する．

2 ISIAE法

SIAE法において，線形方程式を解く計算コストを少なくすることを考える．m 回目の外部反復で，$(B+\gamma A)x_m = Bv_m$ を計算した時の誤差を $f_m := x_m - \tilde{x}_m$ とし，$F_m := [f_1 \cdots f_m]$ とする．さらに，$r_{sys,m} := Bv_m - (B+\gamma A)\tilde{x_m}$ とし，$R_m := [r_{sys,1} \cdots r_{sys,m}]$，$\beta = ||v + A^{-1}c||_2$，$v_1 = (v + A^{-1}c)/\beta$ とすると，m 回の外部反復を行うことで，次式が得られる．

$$(B+\gamma A)^{-1}BV_m - F_m = V_mH_m + h_{m+1,m}v_{m+1}e_m^T$$

この行列 V_m，H_m に対して，次式のように近似する．

$$\begin{aligned} y(t) &\approx \beta V_m e^{-\frac{t}{\gamma}(H_m^{-1}-I)}e_1 + A^{-1}c \\ &=: V_m b_m(t) + A^{-1}c \end{aligned} \tag{4}$$

この近似の残差 $r_{exp,m}^{real}$ を計算すると，次式のようになる．

$$\begin{aligned} r_{exp,m}^{real} = &\frac{1}{\gamma}h_{m+1,m}\left(e_m^T H_m^{-1} b_m(t)\right)(B+\gamma A)v_{m+1} \\ &- \frac{1}{\gamma}R_m H_m^{-1} b_m(t) \end{aligned} \tag{5}$$

式 (5) の第1項 $r_{exp,m}^{comp}$ のノルムは，以下の命題より m の増加とともに任意に小さくなる [1].

Proposition 1 $f(z) := z^{-1}e^{-\frac{t}{\gamma}(z^{-1}-1)}$ とおく．H_m を正方な上ヘッセンベルグ行列とし，

$$W(H_m) \subset \{z \in \mathbb{C}; Re(z) > 0\} \tag{6}$$

と仮定すると，ある定数 $K > 0$ と $0 < \lambda < 1$ が存在して，次式が成立する．

$$\left|\left(f(H_m)\right)_{i,j}\right| < K\lambda^{i-j} \ (i > j) \tag{7}$$

Inexact shift-invert Arnoldi method for linear evolution equations
†Yuka Hashimoto–Keio University
‡Takashi Nodera–Keio University

式 (5) の第 2 項目のノルムは，$(f(H_m))_{i,j} =: g_{i,j}^m$ とし，$tol_{exp} > 0$ を外部反復の収束判定条件，m_{max} を最大反復回数とすると

$$||r_{sys,1}||_2 \le \frac{\gamma \cdot tol_{exp}}{m_{max}||H_m^{-1} b_m(t)||_2} \tag{8}$$

$$||r_{sys,j}||_2 \le \frac{|g_{1,1}^m|}{|g_{j-1,1}^m|} ||r_{sys,1}|| \ (2 \le j \le m) \tag{9}$$

ならば，tol_{exp} 以下となる．式 (8)，式 (9) を事前に計算することは出来ないため，式 (8) の代わりに次式を用いる．

$$||r_{sys,1}||_2 \le \frac{\gamma \cdot tol_{exp}}{m_{max}||B^{-1}(B + \gamma A)(v - A^{-1}c)||_2}$$

式 (9) においては，式 (7) の K と λ が，H_m の次元 m に依存しないことから，$2 \le j \le m$ に対して $|g_{1,1}^m| \approx |g_{1,1}^{j-1}|$，$|g_{1,j-1}^m| \approx |g_{1,j-1}^{j-1}|$ と近似する．

2 章の内容をまとめると，Algorithm 1 のようになる．

Algorithm 1 ISIAE 法

Require: $A, B \in \mathbb{R}^{n \times n}$，$v, c \in \mathbb{R}^n$，$t \in (0, T]$，$\gamma > 0$，$\delta > 0$，$tol_{exp} > 0$，$m_{max}$
Ensure: $y_m(t)$ s.t. $||r_{exp,m}^{real}||_2 \le tol_{exp}$
  $\beta = ||v - A^{-1}c||_2$，$v_1 = (v - A^{-1}c)/\beta$
  $tol_{sys,1} = \gamma tol_{exp}/(m_{max}||B^{-1}(B + \gamma A)(v - A^{-1}c)||_2)$
  for $m = 1, 2, \cdots, m_{max}$ **do**
    Compute $\tilde{x}$ s.t. $||Bv_m - (B + \gamma A)\tilde{x}||_2 \le tol_{sys,m}$
    for $k = 1, 2, \cdots, m$ **do**
      $h_{k,m} = \tilde{x}^T v_k$
      $\tilde{x} = \tilde{x} - h_{k,m} v_k$
    end for
    $h_{m+1,m} = ||\tilde{x}||_2$，$v_{m+1} = \tilde{x}/h_{m+1,m}$
    if $\lambda_{min}((H_m + H_m^T)/2) \le 0$ **then**
      print Warning
    end if
    $f_m = H_m^{-1} e^{-\frac{t}{\gamma}(H_m^{-1} - I)} e_1$
    $r = |h_{m+1,m}(f_m)_m|||(B + \gamma A)v_{m+1}||_2/\gamma$
    $tol_{sys,m+1} = \min\{tol_{sys,1}|(f_m)_1|/|(f_m)_m|, \delta\}$
    if $r \le tol_{exp}$ **then**
      $y_m(t) = \beta V_m e^{-\frac{t}{\gamma}(H_m^{-1} - I)} e_1 + A^{-1}c$, break
    end if
  end for

3 数値実験

数値実験は，OS：Ubuntu14.04LTS，CPU：Intel(R) Xeon(R) E3-1270 V2 @ 3.50GHz，メモリ：16GB，プログラム言語：MATLAB 2015a で行った．

Example $\Omega = ((-1.5, 1.5) \times (-1, 1)) \subset \mathbb{R}^2$,

$$\begin{cases} \rho c_v \dfrac{\partial u}{\partial t} = \lambda \Delta u + \nabla \cdot cu & \text{in } (0, T] \times \Omega \\ u = 300 & \text{on } \{0\} \times \Omega \\ -\lambda \dfrac{\partial u}{\partial n} = \alpha(u - 280) & \text{on } (0, T] \times \partial\Omega_1 \\ -\lambda \dfrac{\partial u}{\partial n} = -1 & \text{on } (0, T] \times \partial\Omega_2 \end{cases}$$

ただし，$\partial\Omega_2 = \{1.5\} \times [-1, 1]$，$\partial\Omega_1 = \partial\Omega \setminus \partial\Omega_2$，$c = [5\ 0]$，$\rho = 1.29$，$c_v = 1000$，$\lambda = 0.025$，$\alpha = 9.3$．この問題を有限要素法により $n = 29969$ の行列に離散化し，ISIAE 法により解を求めた際の，反復回数と相対残差ノルムの関係を図 1 に示す．ISIAE 法が欲しい精度の解を効率良く計算していることがわかる．

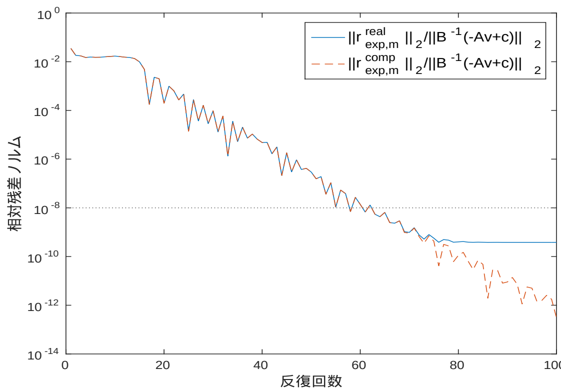

図 1: 反復回数 m と相対残差ノルムの関係 ($t = 300$，$\gamma = 10$，$\delta = 10^{-2}$，$m_{max} = 100$)

4 結 論

1 階の時間微分項が含まれる線形発展方程式に対しては，空間方向のみ離散化を行い，ISIAE 法を用いて解を近似するのが効率的である．これにより，欲しい解の時間変数 t の値に依存しない計算時間で解を近似できる．さらに，ISIAE 法は，各反復に現れる線形方程式を効率良く解くことで，大規模問題に対しても少ない計算時間で解を近似できる．

参考文献

[1] Benzi, M. and Poito, P., *"Decay properties for functions of matrices over C^*-algebras,"* Linear Algebla Appl., vol. 456, pp. 174–198, 2014.

[2] Evans, L. C., "Partial Differential Equations Second Edition," AMS, Providence, 2010.

[3] Gallopoulos, E. and Saad, Y., *"Efficient Solution of Parabolic Equations By Krylov Approximation Methods,"* SIAM J. Sci. Stat., vol. 13, pp. 1236–1264, 1992.

[4] Moret, I. and Novati, P., *"RD-rational approximations of the matrix exponential,"* BIT vol. 44, pp. 595–615, 2004.