

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

橋本 悠香<sup>†</sup>慶応義塾大学理工学部<sup>†</sup>野寺 隆<sup>‡</sup>慶応義塾大学理工学部<sup>‡</sup>

## 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,  $[0, T] \times \bar{\Omega}$  上で定義された次のような初期値境界値問題を考える.

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

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,  $\phi$ ,  $\psi$ ,  $\tau_1$ ,  $\tau_2$  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].

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

ただし,  $A, B \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ,  $c, v \in \mathbb{R}^n$ ,  $y(t) \in (L^2([0, T]))^n$  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.

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

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.

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

この行列  $V_m$ ,  $H_m$  に対して, 次式のように近似する.

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

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.

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

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,

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

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.

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

Inexact shift-invert Arnoldi method for linear evolution equations

<sup>†</sup>Yuka Hashimoto—Keio University

<sup>‡</sup>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

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

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

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.

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

式 (9) においては, 式 (7) の  $K$  と  $\lambda$  が,  $H_m$  の次元  $m$  に依存しないことから,  $2 \leq j \leq m$  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.

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

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

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.

### 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.

### 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.  $\|r_{exp,m}^{real}\|_2 \leq tol_{exp}$

$\beta = \|v - A^{-1}c\|_2$ ,  $v_1 = (v - A^{-1}c)/\beta$

$tol_{sys,1} = \gamma tol_{exp} / (m_{max} \|B^{-1}(B + \gamma A)(v - A^{-1}c)\|_2)$

**for**  $m = 1, 2, \dots, m_{max}$  **do**

  Compute  $\tilde{x}$  s.t.  $\|Bv_m - (B + \gamma A)\tilde{x}\|_2 \leq tol_{sys,m}$

**for**  $k = 1, 2, \dots, m$  **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**  $\lambda_{min}((H_m + H_m^T)/2) \leq 0$  **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**  $r \leq tol_{exp}$  **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**

---

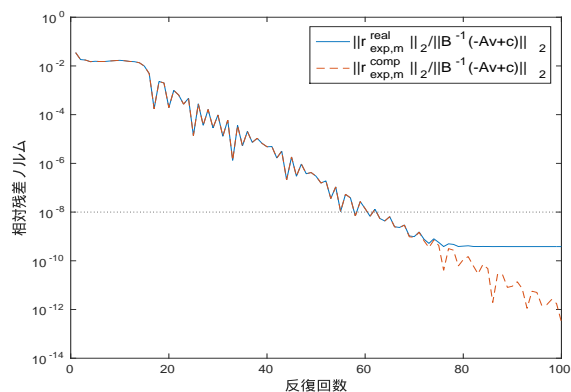


図 1: 反復回数  $m$  と相対残差ノルムの関係 ( $t = 300$ ,  $\gamma = 10$ ,  $\delta = 10^{-2}$ ,  $m_{max} = 100$ )

### 参考文献

- [1] Benzi, M. and Poito, P., “Decay properties for functions of matrices over  $C^*$ -algebras,” Linear Algebra 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.