

Research Report

KSTS/RR-16/003

November 9, 2016

**A Note on Inexact Rational Krylov Method for
Evolution Equations**

by

**Yuka Hashimoto
Takashi Nodera**

Yuka Hashimoto
School of Fundamental Science and Technology
Keio University

Takashi Nodera
Department of Mathematics
Keio University

Department of Mathematics
Faculty of Science and Technology
Keio University

©2016 KSTS
3-14-1 Hiyoshi, Kohoku-ku, Yokohama, 223-8522 Japan

発展方程式のための Inexact Rational Krylov 法

A Note on Inexact Rational Krylov Method for Evolution Equations

橋本悠香*

Yuka Hashimoto

野寺隆†

Takashi Nodera

概要

近年、発展方程式の数値解法として、Exponential integrator が注目を集めている。Exponential integrator の各時間ステップでは、大規模行列の ϕ 関数を計算する必要がある。大規模行列関数を計算する既存の方法として、Rational Krylov 法が提案されている [GAMM-Mitteilungen, Vol. 36, pp.8–31, 2013]。しかし、Rational Krylov 法は Arnoldi 過程の反復 1 回につき線形方程式を 1 回解く必要があり、コスト高となる。そこで、精度を保証しながら各反復における線形方程式を効率よく解くことで、Rational Krylov 法を高速化する新しい算法を提案する。

キーワード：Rational Krylov 法, Shift-invert Arnoldi 法, ϕ 関数, Exponential integrator

Abstract

Exponential integrator is currently the popular method for computing the numerical solution of evolution equations. At each time step, it needs the computation of large matrix ϕ -functions. In order to compute the large matrix functions, Rational Krylov method has been proposed [GAMM-Mitteilungen, Vol. 36, pp.8–31, 2013]. However, since Rational Krylov method requires solving a linear equation in each Arnoldi step, its computational cost is expensive. As a solution to this issue, we propose the new method which accelerates Rational Krylov method by solving linear equations efficiently while guaranteeing the accuracy.

Keywords: Rational Krylov method, Shift-invert Arnoldi method, ϕ -function, Exponential integrator

*慶應義塾大学大学院理工学研究科

Graduate School of Science and Technology, Keio University

Email: yukahashimoto@math.keio.ac.jp

†慶應義塾大学理工学部

Faculty of Science and Technology, Keio University

Email: nodera@math.keio.ac.jp

1 序論

1.1 背景

本稿では, $\Omega \subseteq \mathbb{R}^d$ を Lipschitz 連続な境界を持つ有界開集合とし, $[0, T] \times \bar{\Omega}$ ($T > 0$) 上で定義された次の初期値境界値問題を考える.

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = \mathcal{D}u & \text{in } (0, T] \times \Omega, \\ u = \xi & \text{on } \{0\} \times \bar{\Omega}, \\ u = \eta & \text{on } (0, T] \times \partial\Omega_1, \\ \frac{\partial u}{\partial n_b} = \tau_1 u + \tau_2 & \text{on } (0, T] \times \partial\Omega_2, \end{cases} \quad (1)$$

ただし, $\partial\Omega = \partial\Omega_1 \cup \partial\Omega_2$, $u \in \mathcal{V} \subseteq L^2([0, T] \times \bar{\Omega})$, n_b は単位法線ベクトル, \mathcal{D} は \mathcal{V} 上の微分作用素, $\xi, \eta, \tau_1, \tau_2$ は既知の関数である. 式 (1) を有限差分法, 有限要素法により離散化すると次式が得られる.

$$\begin{cases} M\dot{y}(t) = F(t, y(t)), \\ y(0) = v, \end{cases} \quad (2)$$

ただし, $M \in \mathbb{R}^{n \times n}$, F はベクトル値汎関数, $v \in \mathbb{R}^n$ である. 一般性を失うことなく, $F = F(y(t))$ としてよい.

\mathcal{D} が線形の時, $F(y) = Ly + c$ と表せる. ただし, $L \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $c \in \mathbb{R}^n$ である. この時, M, L が正則ならば式 (2) の解は以下ようになる.

$$\begin{aligned} y(t) &= e^{tM^{-1}L}M^{-1}v + \int_0^t e^{(t-\tau)M^{-1}L}M^{-1}c \, d\tau. \\ &= \phi_0(tM^{-1}L)(v + L^{-1}c) - L^{-1}c, \end{aligned} \quad (3)$$

ただし, $\phi_0(z) := e^z$. よって, 行列指数関数を 1 回計算すれば式 (1) の数値解が求まる.

\mathcal{D} が非線形の場合には (2) を時間ステップごとに積分する必要がある. この種の問題を解くためには, Euler の陽解法, Euler の陰解法, Runge-Kutta 法等, 様々な方法がある. この中でも, Exponential integrator [9–11] が近年注目されている. Exponential integrator は他の方法に比べ, stiff な問題に対して有効である [11, 12]. 時間 i ステップ目において, Exponential integrator は, 次式のように F を変形することになる.

$$F(y) = L_i y(t) + n(y), \quad (4)$$

ただし, L_i は i ステップ目において線形とみなす部分で, 例えば, $L_i = \frac{\partial}{\partial y} F(y(t_0))$, $L_i = \frac{\partial}{\partial y} F(y(t_{i-1}))$ などとする. また, $n(y) = F(y) - L_i y$ $t \in (t_i, t_{i+1}]$ である. これを用いて, i ステップ目において以下の計算を行うことで式 (2) の近似解を得ることができる.

$$\begin{aligned} Y_{ik} &= \phi_0(c_k \Delta t M^{-1} L_{i+1}) y_i + \Delta t \sum_{l=1}^{k-1} a_{kl} (\Delta t M^{-1} L_{i+1}) M^{-1} n_i(Y_{il}) \quad (1 \leq k \leq s), \\ y_{i+1} &= \phi_0(\Delta t M^{-1} L_{i+1}) y_i + \Delta t \sum_{k=1}^s b_k (\Delta t M^{-1} L_{i+1}) M^{-1} n_i(Y_{ik}), \end{aligned} \quad (5)$$

ただし, Δt は時間ステップサイズ, $c_s \in \mathbb{R}$, a_{kl}, b_k は ϕ 関数の線型結合から成る係数である. $r \in \mathbb{N}$ とする. 式 (5) により得られた数値解が r 次収束するための a_{kl}, b_k の条件は, Hochbruck らの文献 [11, Table 2.3] に示されている. また, ϕ 関数は, 以下で定義される関数である.

$$\begin{aligned}\phi_0(z) &:= e^z, \\ \phi_k(z) &:= \frac{\phi_{k-1}(z) - \frac{1}{(k-1)!}}{z} \quad k = 1, 2, \dots\end{aligned}$$

式 (5) より, 各時間ステップにおいていくつかの ϕ 関数を計算する必要がある.

行列指数関数も ϕ 関数であるから, 以上より, \mathcal{D} が線形, 非線形いずれの場合においても大規模行列の ϕ 関数を計算する必要があることがわかる. ϕ 関数の計算法として, Arnoldi(AP) 法 [6, 16], Sift-invert Arnoldi(SIAP) 法 [5, 15, 17, 19], Rational Krylov(RKP) 法 [7, 8] がある. AP 法は $\|\Delta t M^{-1} L_i\|_2$ の増加に伴って反復回数が増加する [12]. 一方, SIAP 法は反復回数が $\|\Delta t M^{-1} L_i\|_2$ に依らない [7]. RKP 法は SIAP 法の拡張で, SIAP 法ではシフトを 1 つ用いるのに対し, RKP 法ではシフトを複数用いる. SIAP 法, RKAP 法は反復回数が減少する一方で, 各 Arnoldi 過程の反復において線形方程式を解く必要があり, この部分の計算コストが高くなる. そこで, 本稿では, 与えられた精度を保証しながら線形方程式を効率よく解く Inexact Shift-invert Arnoldi(ISIAP) 法, Inexact Rational Krylov(IRKP) 法を提案する.

2 章では, AP 法, SIAP 法, RKP 法について述べる. 3 章で ISIAP 法, IRKP 法を提案する. 最後に 4 章で数値実験の結果を紹介し, ISIAP 法, IRKP 法の有効性を示す.

1.2 記法

本稿では, $\|\cdot\| = \|\cdot\|_2$ とし, 行列 A に対して $\kappa(A)$ を, A の 2 ノルム条件数とする. また, 単位行列 I に対して I の j 列目を e_j と表すことにする. さらに, $\mathbb{C}^- := \{z \in \mathbb{C}; \Re(z) < 0\}$, $\mathbb{C}^+ := \{z \in \mathbb{C}; \Re(z) > 0\}$, $n \times n$ 行列 A に対して $W(A) := \{u^* A u; u \in \mathbb{C}^n, \|u\| = 1\}$ とする.

2 AP 法, SIAP 法, RKP 法

2 章および 3 章では, $M, L \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $v \in \mathbb{R}^n$, $t > 0$ に対し, $\phi_k(tM^{-1}L)M^{-1}v$ ($k = 0, 1, \dots$) を計算するものとする. また, $W(M^{-1}L) \subset \mathbb{C}^-$ とする.

2.1 AP 法

$\beta := \|M^{-1}v\|$, 初期ベクトル $v_1 := M^{-1}v/\beta$ として $M^{-1}L$ に対する Arnoldi 過程の反復を行うと, m 回目の反復で次式が得られる.

$$h_{m+1,m}v_{m+1} = M^{-1}Lv_m - \sum_{j=1}^m h_{j,m}v_j,$$

$$V_m^* M^{-1} L V_m = H_m,$$

ただし, $V_m = [v_1 \cdots v_m] \in \mathbb{R}^{n \times m}$ は列ベクトルが正規直交する行列, $H_m \in \mathbb{R}^{m \times m}$ は上 Hessenberg 行列である. これを用いて, 次式のように近似する.

$$\begin{aligned} \phi_k(tM^{-1}L)M^{-1}v &\approx V_m V_m^T \phi_k(tM^{-1}L)M^{-1}v = \beta V_m V_m^T \phi_k(tM^{-1}L)V_m e_1 \\ &\approx \beta V_m \phi_k(tV_m^T M^{-1} L V_m) e_1 = \beta V_m \phi_k(tH_m) e_1. \end{aligned}$$

2.2 SIAP 法

2.1 節と同様の初期ベクトルを用いて, $M^{-1}L$ をシフトさせて逆行列をとった行列 $(I - \gamma M^{-1}L)^{-1} = (M - \gamma L)^{-1}M$ に対する Arnoldi 過程の反復を行うと, m 回目の反復で次式が得られる. ただし, $\gamma > 0$ はシフトである.

$$\begin{aligned} (M - \gamma L)^{-1} M V_m &= V_m H_m + h_{m+1,m} v_{m+1} e_m^T, \\ V_m^* (M - \gamma L)^{-1} M V_m &= H_m. \end{aligned} \quad (6)$$

これを用いて, 次式のように近似する.

$$\begin{aligned} \phi_k(tM^{-1}L)M^{-1}v &\approx \beta V_m V_m^T \psi_k \left(((I - \gamma M^{-1}L)^{-1})^{-1} \right) M^{-1}v, \\ &\approx \beta V_m \psi_k \left((V_m^T (M - \gamma L)^{-1} M V_m)^{-1} \right) e_1, \\ &= \beta V_m \psi_k(H_m^{-1}) e_1. \end{aligned} \quad (7)$$

ただし, $\psi_k(z) := \phi_k(t(1-z)/\gamma)$ である.

2.3 RKP 法

2.1 節と同様の初期ベクトルを用いて, $(I - \gamma_j M^{-1}L)^{-1} = (M - \gamma_j L)^{-1}M$ に対する Arnoldi 過程の反復を行うと, m 回目の反復で次式が得られる. ただし, $\gamma_j > 0$ ($j = 1, \dots, m$) はシフトであり, j に依存して変化する.

$$\begin{aligned} M V_m &= M V_m H_m - L V_m H_m D_m + (M - \gamma_m L) h_{m+1,m} v_{m+1} e_m^T, \\ V_m^* (M - \gamma_m L)^{-1} M V_m &= H_m D_m (H_m D_m - \gamma_m H_m + \gamma_m I)^{-1} =: K_m. \end{aligned} \quad (8)$$

本稿においては, これを用いて, 次式のような近似をする.

$$\begin{aligned} \phi_k(tM^{-1}L)M^{-1}v &\approx \beta V_m \tilde{\psi}_k^m(K_m^{-1}) e_1, \\ &= V_m \phi_k(t(H_m D_m^{-1} H_m^{-1} - D_m^{-1} H_m^{-1})) e_1, \end{aligned} \quad (9)$$

ただし, $\tilde{\psi}_k^m(z) := \phi_k(t(1-z)/\gamma_m)$, $D_m = \text{diag}\{\gamma_1, \dots, \gamma_m\}$ である.

3 ISIAP 法, IRKP 法

SIAP 法, RKP 法で各 Arnoldi 過程の反復において現れる線形方程式の解の計算コストを減少させるために, 誤差を許して解くことを考える.

3.1 ISIAP 法

2.1 節と同様の初期ベクトルを用いて, $(I - \gamma M^{-1}L)^{-1} = (M - \gamma L)^{-1}M$ に対する Arnoldi 過程の反復を行う. ただし, j 回目の反復において $(M - \gamma L)x_j = Mv_j$ を x_j について解いた時に生じる誤差を $f_j := x_j - \tilde{x}_j$ とし, 残差を $r_{sys,j} := Mv_j - (M - \gamma L)\tilde{x}_m$ とする. m 回の反復で次式が得られる.

$$(M - \gamma L)^{-1}MV_m - F_m = V_m H_m + h_{m+1,m}v_{m+1}e_m^T, \quad (10)$$

$$\begin{aligned} MV_m - R_m^{sys} &= (M - \gamma L)V_m H_m \\ &\quad + h_{m+1,m}(M - \gamma L)v_{m+1}e_m^T. \end{aligned} \quad (11)$$

ただし, $F_m := [f_1 \cdots f_m]$, $R_m^{sys} := [r_{sys,1} \cdots r_{sys,m}]$ である. H_m が正則であれば, これを用いて式 (7) と同様の次式で近似する.

$$\phi_k(tM^{-1}L)M^{-1}v \approx \beta V_m \psi_k(H_m^{-1})e_1. \quad (12)$$

式 (7) と式 (12) は全く同じ形をしているが, 式 (12) は式 (10) から得られる近似であるため, 値は異なることに注意する.

ϕ 関数を反復法で計算する際には, 一般残差が収束判定条件に用いられる [13]. ISIAP 法においては, 次のようにして一般残差が計算できる. ここで, Γ を, $M^{-1}(M - \gamma L)$ と H_m^{-1} の固有値を含む Jordan 領域の境界とする. Cauchy の積分定理より, 式 (12) の近似の誤差 E_m は次式のように表せる.

$$\begin{aligned} E_m &= \psi_k(M^{-1}(M - \gamma L))M^{-1}v - \beta V_m \psi_k(H_m^{-1})e_1, \\ &= \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} \psi_k(\lambda) ((\lambda I - M^{-1}(M - \gamma L))^{-1}M^{-1}v - \beta V_m(\lambda I - H_m^{-1})^{-1}e_1) d\lambda, \\ &= \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} \psi_k(\lambda) ((\lambda M - (M - \gamma L))^{-1}v - \beta V_m(\lambda I - H_m^{-1})^{-1}e_1) d\lambda, \\ &=: \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} \psi_k(\lambda) e_m^{lin} d\lambda. \end{aligned} \quad (13)$$

ここで, $\beta V_m(\lambda I - H_m^{-1})^{-1}e_1$ は, 線形方程式 $(\lambda M - (M - \gamma L))x = v$ の解の近似とみなすことができる. よって, e_m^{lin} は, この近似に対する誤差とみなすことができる. 一方, この近似の残差 r_m^{lin} は次式のように表せる.

$$\begin{aligned} r_m^{lin} &= v - (\lambda M - (M - \gamma L))\beta V_m(\lambda I - H_m^{-1})^{-1}e_1, \\ &= v - \beta \lambda M V_m(\lambda I - H_m^{-1})^{-1}e_1 + \beta (M V_m H_m^{-1} \\ &\quad + R_m H_m^{-1} - h_{m+1,m}(M - \gamma L)v_{m+1}e_m^T H_m^{-1}) (\lambda I - H_m^{-1})^{-1}e_1, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= v - \beta MV_m(\lambda I - H_m^{-1})(\lambda I - H_m^{-1})^{-1}e_1 \\
&\quad + (\beta R_m H_m^{-1} - \beta h_{m+1,m}(M - \gamma L)v_{m+1}e_m^T H_m^{-1})(\lambda I - H_m^{-1})^{-1}e_1, \\
&= (\beta R_m H_m^{-1} - \beta h_{m+1,m}(M - \gamma L)v_{m+1}e_m^T H_m^{-1})(\lambda I - H_m^{-1})^{-1}e_1.
\end{aligned}$$

式 (13) の e_m^{lin} を r_m^{lin} で置き換えれば, m ステップ目において計算可能な一般残差が次式のように求まる.

$$\begin{aligned}
r_{phi,m}^{real} &= -\beta h_{m+1,m}(M - \gamma L)v_{m+1}e_m^T H_m^{-1}\psi_k(H_m^{-1})e_1 \\
&\quad + \beta R_m H_m^{-1}\psi_k(H_m^{-1})e_1.
\end{aligned} \tag{14}$$

式 (14) を評価するための, 次の命題が成立する.

Proposition 3.1 $f(z) := \beta z^{-1}\psi(z^{-1})$ とおく. H_m を正方な上 Hessenberg 行列とし

$$W(H_m) \subset \mathbb{C}^+, \tag{15}$$

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.

$$\left| (f(H_m))_{i,j} \right| < K\lambda^{i-j} \quad (i \geq j). \tag{16}$$

Proof: H_m と f は Benzi ら [1] の Theorem 11 の仮定を満たす. 実際, $W(H_m)$ は有界凸だから, $W(H_m) \subset \mathcal{F} \subset \mathbb{C}^+$ を満たす単連結なコンパクト集合で境界が Jordan 閉曲線になる \mathcal{F} を取ることができる. Riemann の写像定理より, $\bar{\mathbb{C}} \setminus \mathcal{F}$ ($\bar{\mathbb{C}} = \mathbb{C} \cup \{\infty\}$) から $\{w \in \bar{\mathbb{C}}; |w| > \rho\}$ ($\rho > 0$) への全射な等角像 Φ で, $\Phi(\infty) = \infty$, $\lim_{z \rightarrow \infty} (\Phi(z)/z) = 1$ を満たすものが存在する [1]. $\partial\mathcal{F}$ は Jordan 閉曲線であるから, Carathéodory の定理 [3] より, この写像は $\bar{\mathbb{C}} \setminus \mathcal{F}$ に, 位相同型写像として拡張できる. ここで, Φ の逆写像を Ψ とする. Ψ は連続だから, $R_0 > \rho$ で, $\Psi(\{w \in \bar{\mathbb{C}}; |w| = R_0\})$ の Jordan 領域が 0 を含まないような R_0 が存在する. よって, この Jordan 領域を $I(C_{R_0})$ とすると, $I(C_{R_0}) \subseteq \bar{\mathbb{C}} \setminus \{0\}$ となる. f は $\mathbb{C} \setminus \{0\}$ で正則だから, $I(C_{R_0})$ でも正則である. H_m は上 Hessenberg 行列であるから, Benzi ら [1, Theorem 11] よりこの命題が成立する. \square

Remark 3.1 Proposition 3.1 は, 式 (15) で表される仮定が満たされれば, $f(H_m)$ の対角より下の成分の絶対値が指数関数的に減少していくことを示している. また, K と λ は \mathcal{F} のみに依存する.

$\|r_{sys,m}\| \leq \delta$, ($\delta > 0$) であれば, 式 (14) の第 1 項目は次式のように評価できる.

$$\begin{aligned}
&\left| h_{m+1,m} (e_m^T f(H_m) e_1) \right| \|(M - \gamma L)v_{m+1}\| \\
&\leq |h_{m+1,m}| \left| (f(H_m))_{m,1} \right| \|M - \gamma L\| \|v_{m+1}\|, \\
&\leq |h_{m+1,m}| \|(M - \gamma L)\| K\lambda^{m-1}, \quad (\because (16)) \\
&\leq \|(M - \gamma L)^{-1} M v_m - f_m - h_{1,n} v_1 - \cdots - h_{m,m} v_m\| \|M - \gamma L\| K\lambda^{m-1}, \\
&\leq (\|(M - \gamma L)^{-1} M v_m\| + \|f_m\|) \|M - \gamma L\| K\lambda^{m-1}, \\
&\leq (\|M\| + \|r_{sys,m}\|) \|(M - \gamma L)^{-1}\| \|M - \gamma L\| K\lambda^{m-1}, \\
&\leq (\|M\| + \delta) \kappa(M - \gamma L) K\lambda^{m-1}.
\end{aligned}$$

$0 < \lambda < 1$ より, 式 (14) の第 1 項目は m の増加とともに減少する.

Remark 3.2 $F_m = O$ ならば, $W(H_m) \subseteq W((I - \gamma M^{-1}L)^{-1}) \subseteq \mathbb{C}^+$ より, 式(15)の仮定は満たされる. よって, H_m が式(15)を満たさない場合, より小さい δ を選び, 各 Arnoldi 過程の反復に現れる線形方程式をより正確に解くか, より小さい γ を選び, $W((I - \gamma M^{-1}L)^{-1})$ を複素平面の原点から分離させればよい.

式(14)の第2項目に関しては, 次の定理が成立する.

Theorem 3.1 $(f(H_m))_{i,j} =: g_{i,j}^m$ とし, $tol_{phi} > 0$ を ϕ 関数を計算するための収束判定条件, m_{max} を Arnoldi 過程の最大反復回数とする.

$$\|r_{sys,1}\| \leq \frac{tol_{phi}}{m_{max} \|f(H_m)e_1\|}, \quad (17)$$

$$\|r_{sys,j}\| \leq \frac{|g_{1,1}^m|}{|g_{j-1,1}^m|} \|r_{sys,1}\| \quad (2 \leq j \leq m), \quad (18)$$

と仮定すると

$$\|R_m f(H_m)e_1\| \leq tol_{phi}.$$

Proof: 式(17), (18)と Proposition 3.1 より, 次式が成立する.

$$\begin{aligned} \|R_m f(H_m)e_1\| &\leq |g_{1,1}^m| \|r_{sys,1}\| + |g_{2,1}^m| \|r_{sys,2}\| + \cdots + |g_{m,1}^m| \|r_{sys,m}\|, \\ &\leq |g_{1,1}^m| \|r_{sys,1}\| + |g_{2,1}^m| \frac{|g_{1,1}^m|}{|g_{1,1}^m|} \|r_{sys,1}\| \\ &\quad + |g_{3,1}^m| \frac{|g_{1,1}^m|}{|g_{2,1}^m|} \|r_{sys,1}\| + \cdots + |g_{m,1}^m| \frac{|g_{1,1}^m|}{|g_{m-1,1}^m|} \|r_{sys,1}\|, \quad (\because (18)) \\ &= |g_{1,1}^m| \|r_{sys,1}\| \left(1 + \frac{|g_{2,1}^m|}{|g_{1,1}^m|} + \frac{|g_{3,1}^m|}{|g_{2,1}^m|} + \cdots + \frac{|g_{m,1}^m|}{|g_{m-1,1}^m|} \right), \\ &\leq \|f(H_m)e_1\| \|r_{sys,1}\| (1 + \lambda + \cdots + \lambda), \quad (\because (16)) \\ &\leq \|f(H_m)e_1\| \|r_{sys,1}\| \cdot m_{max}, \\ &\leq tol_{phi}. \quad (\because (17)) \quad \square \end{aligned}$$

Remark 3.3 Theorem 3.1 より, m 回目の Arnoldi 過程の反復において, 残差が式(17), 式(18)を満たすように線形方程式 $(M - \gamma L)x_j = Mv_j$ ($1 \leq j \leq m$) が解かれていれば, 式(14)の第1項目 $\|r_{phi,m}^{comp}\| := |h_{m+1,m}(e_m^T f(H_m)e_1)| \|(M - \gamma L)v_{m+1}\|$ (計算残差と呼ぶ)のみを計算し, これが収束判定条件 tol_{phi} に達するまで外部反復を行えばよい. 計算残差 $\|r_{phi,m}^{comp}\|$ は真の残差 $\|r_{phi,m}^{real}\|$ に比べて計算コストが少ない. また, Proposition 3.1 より式(18)右辺は m の増加とともに増大する. よって, 反復が進むにつれて, その反復に現れる線形方程式を不正確に解いてよいことになる. これにより, 1回の反復に必要な計算コストが減少する.

Remark 3.4 実際の計算では, 式(17), 式(18)に現れる m の入っている行列を事前に計算することはできない. そこで, \mathcal{D} が線形で, 式(3)を計算する場合は次のようにする. 式(17)は, 次の近似式を用いて計算する.

$$\|f(H_m)e_1\| \|r_{sys,1}\| \approx \|\beta V_m^T M^{-1} (M - \gamma L) V_m \psi_k(H_m^{-1}) e_1\| \|r_{sys,1}\|, \quad (\because (10))$$

$$\begin{aligned} &\approx \|M^{-1}(M - \gamma L)y(t)\| \|r_{sys,1}\|, \quad (\because (12)) \\ &\approx \|M^{-1}(M - \gamma L)(v + L^{-1}c)\| \|r_{sys,1}\|. \end{aligned}$$

よって、式 (17) の代わりに次式を用いる。

$$\|r_{sys,1}\| \leq \frac{\gamma \cdot tol_{phi}}{m_{max} \|M^{-1}(M - \gamma L)(v + L^{-1}c)\|}. \quad (19)$$

式 (19) は、式 (17) に現れる m の入っている各行列を、Krylov 部分空間に射影する前の行列で置き換えたものである。式 (18) は、式 (16) の K と λ が、 H_m の次元 m に依存しないから、 $2 \leq j \leq m$ に対して $|g_{1,1}^m| \approx |g_{1,1}^{j-1}|$ 、 $|g_{1,j-1}^m| \approx |g_{1,j-1}^{j-1}|$ と近似して計算する。

また、 \mathcal{D} が非線形で、Exponential integrator を用いる場合は $i+1$ 時間ステップにおいて、式 (17) の近似として i ステップ目の値を用いる。式 (18) については \mathcal{D} が線形の場合と同様に近似する。

3.2 IRKP 法

2.1 節と同様の初期ベクトルを用いて、 $(I - \gamma_j M^{-1}L)^{-1} = (M - \gamma_j L)^{-1}M$ に対する Arnoldi 過程の反復を行う。ただし、 j 回目の反復において $(M - \gamma_j L)x_j = Mv_j$ を x_j について解いた時に生じる誤差を $f_j := x_j - \tilde{x}_j$ とし、残差を $r_{sys,j} := Mv_j - (M - \gamma_j L)\tilde{x}_m$ とする。 m 回の反復で次式が得られる。

$$\begin{aligned} MV_m &= MV_m H_m - LV_m H_m D_m \\ &\quad + (M - \gamma_m L)h_{m+1,m}v_{m+1}e_m^T + R_m^{sys}, \end{aligned}$$

ただし、 R_m^{sys} は 3.1 節と同様に定義する。 H_m が正則であれば、これを用いて式 (9) と同様の次式で近似する。

$$\phi_k(tM^{-1}L)M^{-1}v \approx \beta V_m \phi_k(t(H_m D_m^{-1}H_m^{-1} - D_m^{-1}H_m^{-1}))e_1.$$

ISIAP 法と同様に計算すると、一般残差は次式のようになる。

$$r_{phi,m}^{real} = h_{m+1,m}(M - \gamma_m L)v_{m+1}e_m^T \tilde{f}_m(D_m, H_m)e_1 - R_m^{sys} \tilde{f}_m(D_m, H_m)e_1. \quad (20)$$

ただし、 $\tilde{f}_m(x, y) = \beta \gamma_m \phi_k(t(x^{-1} - x^{-1}y^{-1}))x^{-1}y^{-1}$ である。式 (20) を評価するための、次の補題と命題が成立する。

Lemma 3.1 $G_{exp}^m := \{A \in \mathbb{C}^{m \times m}; \exists K > 0, 0 < \lambda < 1, |a_{i,j}| < K\lambda^{|i-j|}\}$ とおく。 $H \in \mathbb{C}^{m \times m}$ に対して、

$$\exists K > 0, 0 < \lambda < 1, |h_{i,j}| < K\lambda^{i-j} \quad (i \geq j), \quad (21)$$

ならば、

$$\exists Q \in G_{exp}^m, Q: \text{ユニタリ}, \exists \tilde{H}: \text{上 Hessenberg}, H = Q^* \tilde{H} Q.$$

Proof: Householder 変換により, H を上 Hessenberg 行列に変換することを考える. $h_{i_1:i_2,j}$ を, H の j 列目の i_1 から i_2 行目からなるベクトルとする. $\alpha_j = \|h_{j+1:m,j}\|$, $u_j = (h_{j+1:m,j} - \alpha_j e_1) / \|h_{j+1:m,j} - \alpha_j e_1\|$ とし, $\tilde{Q}_j = I_{m-j} - 2u_j u_j^*$ とすれば, \tilde{Q}_j はユニタリーで, $\tilde{Q}_j h_{j+1:m,j} = \alpha_j e_1$ となる. ただし, I_{m-j} は, $(m-j) \times (m-j)$ 単位行列を表す. よって, $Q_j = \text{diag}\{I_{m-j}, \tilde{Q}_j\}$ に対して $Q = Q_{m-2} \cdots Q_1$ とすれば Q はユニタリーで, ${}^3\tilde{H}$: 上 Hessenberg, $QH Q^* = \tilde{H}$ となる. ここで, u_j は $h_{j+1:m,j} - \alpha_j e_1$ のスカラ倍である. $h_{j+1:m,j}$ は式 (21) を満たし, $\alpha_j e_1$ は第 1 成分以外全て 0 であるから, ある $K_j > 0$ と $0 < \lambda_j < 1$ が存在して $|u_{i,j}| < K_j \lambda_j^i$ となる. ただし, $u_{i,j}$ は $u_j \in \mathbb{C}^{m-j}$ の第 i 成分である. よって, 次式が成立する.

$$|[u_j u_j^*]_{k,l}| = |u_{k,j} u_{l,j}| < K_j^2 \lambda_j^{k+l} \leq K_j^2 \lambda_j^{|k-l|}. \quad (\because |k-l| \leq k+l, 0 < \lambda_j < 1)$$

よって $u_j u_j^* \in G_{exp}^{m-j}$ であるから, $\tilde{Q}_j \in G_{exp}^{m-j}$, $Q_j \in G_{exp}^m$ となる. Benzi ら [2, Theorem 9.2] より, $\forall A, B \in G_{exp}^m$ に対して $AB \in G_{exp}^m$ であるから, $Q \in G_{exp}^m$ となる. \square

Proposition 3.2 H_m を正方な上 Hessenberg 行列とし, D_m を対角行列とする.

$$W(H_m D_m) \subset \mathbb{C}^+, \quad (22)$$

$$W(D_m^{-1} - D_m^{-1} H_m^{-1}) \subset \mathbb{C}^-, \quad (23)$$

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

$$\left| \left[\tilde{f}_m(D_m, H_m) \right]_{i,1} \right| < \frac{1}{2} \tilde{K}(m) (i+1) i \tilde{\lambda}^{i-1}. \quad (24)$$

Proof: $H_m D_m$ は上 Hessenberg 行列, 式 (22) より, Proposition 3.1 において $f(x)$ を $h(x) := x^{-1}$, H_m を $H_m D_m$ とすればある $\hat{K} > 0$ と $0 < \hat{\lambda} < 1$ が存在して, $|[D_m^{-1} H_m^{-1}]_{i,j}| < \hat{K} \hat{\lambda}^{i-j}$ ($i \geq j$) となる. D_m^{-1} は対角行列だから, 適切に \hat{K} を取り直すことにより, $|[D_m^{-1} - D_m^{-1} H_m^{-1}]_{i,j}| < \hat{K} \hat{\lambda}^{i-j}$ ($i \geq j$) となる. よって, Lemma 3.1 より, $Q \in G_{exp}^m$ なるユニタリー行列 Q と上 Hessenberg 行列 \tilde{H} が存在して, $D_m^{-1} - D_m^{-1} H_m^{-1} = Q^* \tilde{H} Q$. よって, 次式が成立する.

$$\begin{aligned} \tilde{f}_m(D_m, H_m) e_1 &= \beta \gamma_m \phi_k(t Q^* \tilde{H} Q) D_m^{-1} H_m^{-1} e_1, \\ &= \beta \gamma_m Q^* \phi_k(t \tilde{H}) Q \hat{H} e_1 \quad ({}^3\hat{H} \in G_{exp}^m). \end{aligned}$$

$Q^*, Q \hat{H} \in G_{exp}^m$ より, ある $K', K'' > 0$ と $0 < \lambda', \lambda'' < 1$ が存在して, $|q_{i,j}| < K' \lambda'^{|i-j|}$, $|[Q \hat{H}]_{i,j}| < K'' \lambda''^{|i-j|}$. さらに, 式 (23) より $W(\tilde{H}) = W(D_m^{-1} - D_m^{-1} H_m^{-1}) \subset \mathbb{C}^-$ だから, Proposition 3.1 において $f(x)$ を $\phi_k(tx)$, H_m を \tilde{H} とすればある $\check{K} > 0$ と $0 < \check{\lambda} < 1$ が存在して, $|\phi_k(t \tilde{H})_{i,j}| < \check{K} \check{\lambda}^{i-j}$ ($i \geq j$) となる. ここで, $z \in \mathbb{C}^-$ であれば $|e^z| \leq 1$ より, 次式が成立する.

$$|\phi_k(z)| = \left| \int_0^1 e^{sz} \frac{(1-s)^{k-1}}{(k-1)!} ds \right| \leq |e^z| \left| \int_0^1 \frac{(1-s)^{k-1}}{(k-1)!} ds \right| \leq \frac{1}{k!}. \quad (25)$$

よって, 次式が成立する.

$$\|\phi_k(D_m^{-1} - D_m^{-1} H_m^{-1})\| \leq C \sup_{z \in W(D_m^{-1} - D_m^{-1} H_m^{-1})} |\phi_k(z)| \leq \frac{C}{k!}.$$

ただし、最初の不等号は Crouzeix [4, Theorem 2] より成立し、 $1 \leq C \leq 11.08$ である。2 番目の不等号は式 (23), (25) より成立する。以上より、適切に \check{K} を取り直すことにより、 $|\phi_k(t\tilde{H})_{i,j}| \leq \|\phi_k(D_m^{-1} - D_m^{-1}H_m^{-1})\| < \check{K}$ ($i < j$) とできる。よって、次式が成立する。

$$\begin{aligned} |[\phi_k(t\tilde{H})Q\hat{H}]_{i,1}| &< \sum_{k=1}^i \check{K}\check{\lambda}^{i-k} K''\lambda^{k-1} + \sum_{k=i+1}^m \check{K}K''\lambda^{k-1}, \\ &\leq i\check{K}K''\bar{\lambda}^{i-1} + \check{K}K''\frac{\lambda^{m_i}}{1-\lambda''}, \\ &\leq i\check{K}K''\left(1 + \frac{\lambda''}{1-\lambda''}\right)\bar{\lambda}^{i-1}, \\ &= i\bar{K}\bar{\lambda}^{i-1}. \end{aligned}$$

ただし、 $\bar{K} := \check{K}K''/(1-\lambda'')$, $\bar{\lambda} := \max\{\check{\lambda}, \lambda''\} < 1$ である。よって、 $\tilde{K} := K'\bar{K}(1 + 2/(1-\bar{\lambda}^2))$, $\tilde{\lambda} := \max\{\lambda', \bar{\lambda}\} < 1$, $\gamma := \max_{m=1, \dots, m_{max}} |\gamma_m|$ に対して次式が成立するから命題が成立する。

$$\begin{aligned} |\beta\gamma_m Q^* \phi_k(t\tilde{H})Q\hat{H}_{i,1}| &< \sum_{k=1}^i \beta\gamma K'\lambda^{i-k} k\bar{K}\bar{\lambda}^{k-1} + \sum_{k=i+1}^m \beta\gamma K'\lambda^{k-i} k\bar{K}\bar{\lambda}^{k-1}, \\ &\leq \frac{1}{2}\beta\gamma(i+1)iK'\bar{K}\tilde{\lambda}^{i-1} + \beta\gamma K'\bar{K}\frac{i+1}{(1-\tilde{\lambda}^2)^2}, \\ &\leq \frac{1}{2}\beta\gamma(i+1)iK'\bar{K}\left(1 + \frac{2}{(1-\tilde{\lambda}^2)^2}\right)\tilde{\lambda}^{i-1}, \\ &= \frac{1}{2}\beta\gamma(i+1)i\tilde{K}\tilde{\lambda}^{i-1}. \quad \square \end{aligned}$$

Remark 3.5 Proposition 3.2 に現れる $\tilde{K}(m)$ は一般には m に依る。しかし、Benzi ら [2, Theorem 9.2] と Proposition 3.1 より、 \hat{K} , \check{K} , 全ての “ λ ” は m に依らないから、Lemma 3.1 と Proposition 3.2 の証明の中で m に依存する部分は、 Q を構成する過程のみである。 Q はユニタリ行列だから、任意の $i, j = 1, \dots, m$ に対して $|q_{i,j}| \leq 1$ である。よって、実際には $|q_{i,j}| < K'\lambda^{|i-j|}$ を満たす $K' = K'(m) > 0$ は $K'(m) = O(1)$ と推測できる。よって、 $\tilde{K}(m) = O(1)$ と推測できる。

$\|r_{sys,m}\| \leq \delta$, ($\delta > 0$) であれば、式 (20) の第 1 項目は次式のように評価できる。

$$\begin{aligned} &\left| h_{m+1,m} e_m^T \tilde{f}_m(D_m, H_m) e_1 \right| \|(M - \gamma L)v_{m+1}\| \\ &\leq \frac{1}{2}(\|M\| + \delta)\kappa(M - \gamma_m L)\tilde{K}(m)m(m+1)\tilde{\lambda}^{m-1}. \end{aligned} \quad (26)$$

よって、 $\tilde{K}(m)$ が多項式オーダーであれば、式 (20) の第 1 項目は m の増加とともに減少する。

式 (20) の第 2 項目に関しては、次の定理が成立する。

Theorem 3.2 $\left[\tilde{f}_m(D_m, H_m) \right]_{i,j} =: \tilde{g}_{i,j}^m$ とし、 $tol_{phi} > 0$ を ϕ 関数を計算するための収束判定条件、 m_{max} を Arnoldi 過程の最大反復回数とする。

$$\|r_{sys,1}\| \leq \frac{tol_{phi}}{3m_{max}\|f(H_m)e_1\|}, \quad (27)$$

Algorithm 1 時間ステップ i における IRKP 法

$\beta = \|M^{-1}v\|$, $v_1 = M^{-1}v/\beta$
 $tol_{sys,1} = tol_{phi}/(3m_{max}\|f_m^{i-1}\|)$
for $m = 1, 2, \dots, m_{max}$ **do**
 Compute \tilde{x} such that $\|Mv_m - (M - \gamma_m L)\tilde{x}\| \leq tol_{sys,m}$
 Compute Arnoldi process
 $f_m^i = \tilde{f}(D_m, H_m)e_1$
 $r = |h_{m+1,m}(f_m^i)_m| \|(M - \gamma_m L)v_{m+1}\|$
 $tol_{sys,m+1} = \min\{tol_{sys,1}|(f_m^i)_1|/|(f_m^i)_m|, \delta\}$
if $r \leq tol_{phi}$ **then**
 $m(i) = m$
 $y_m(t) = V_m \phi_k(t(H_m D_m^{-1} H_m^{-1} - D_m^{-1} H_m^{-1}))e_1$, break
end if
end for

$$\|r_{sys,j}\| \leq \frac{|\tilde{g}_{1,1}^m|}{|\tilde{g}_{j-1,1}^m|} \|r_{sys,1}\| \quad (2 \leq j \leq m), \quad (28)$$

と仮定すると

$$\|R_m^{sys} \tilde{f}_m(D_m, H_m)e_1\| \leq tol_{phi}.$$

Remark 3.6 式 (27), (28) は ISIAP 法と同様に近似する. また, 式 (27), 式 (28) を満たすように線形方程式が解かれていれば, 式 (20) の第 1 項目 $\|r_{phi,m}^{comp}\| := |h_{m+1,m}| \|(M - \gamma_m L)v_{m+1} e_m^T \tilde{f}_m(D_m, H_m)e_1\|$ のみを計算し, これが収束判定条件 tol_{phi} に達するまで外部反復を行えばよい. さらに, Proposition 3.2 より式 (28) 右辺は m の増加とともに増大するから, 1 回の反復に必要な計算コストが減少する.

以上のことをまとめ, IRKP 法の算法を Algorithm 1 に示す.

Remark 3.7 ϕ_0 に対しては, 以下のような通常 of 残差を用いることができる [19]. 通常 of 残差は ϕ_0 に対する式 (14), (20) の定数倍であるから, これに対して 3 章 of 今までの議論を全て適用することができる.

$$r_{phi,m}^{real} = -\frac{\beta}{\gamma} h_{m+1,m} (e_m^T H_m^{-1} \psi_0(H_m^{-1})e_1) (M - \gamma L)v_{m+1} + \frac{\beta}{\gamma} R_m^{sys} H_m^{-1} \psi_0(H_m^{-1})e_1$$

(ISIAP の時),

$$r_{phi,m}^{real} = -\beta h_{m+1,m} (e_m^T H_m^{-1} \phi_0(D_m^{-1} - D_m^{-1} H_m^{-1})D_m^{-1} H_m^{-1} e_1) (M - \gamma_m L)v_{m+1} + \beta R_m^{sys} \phi_0(D_m^{-1} - D_m^{-1} H_m^{-1})D_m^{-1} H_m^{-1} e_1 \quad (\text{IRKP の時}).$$

4 数値実験

本章では, 数値実験により ISIAP 法, IRKP 法 of 有効性を示す. 全ての数値実験は, OS : Ubuntu14.04LTS, CPU : Intel(R) Xeon(R) E3-1270 V2 @ 3.50GHz, メモリ : 16GB, プ

表 1: Example 1: ISIAP 法, SIAP 法, AP 法の比較

n	Algorithm	実行時間 (s)	相対誤差
1234	ISIAP	1.01	$1.1e-03$
	SIAP	1.29	$1.1e-03$
	AP	1.62	$1.1e-03$
5090	ISIAP	4.71	$5.4e-04$
	SIAP	6.95	$5.4e-04$
	AP	7.50	$5.4e-04$
20674	ISIAP	26.91	$3.4e-04$
	SIAP	46.08	$3.4e-04$
	AP	42.44	$3.4e-04$

ログラム言語 : MATLAB 2015a を用いて行った.

問題の離散化には, 三角形要素分割と線形な重み関数による Galerkin 法を用いた. 離散化された行列に対して ISIAP 法, IRKP 法等を適用した. 各 Arnoldi 過程の反復で現れる線形方程式は, ILU(0) で前処理した BiCGStab 法 [18] を用いた. AP 法, SIAP 法, RKP 法ではこの線形方程式を残差ノルムが 10^{-14} 以下となるように計算した.

Example 1 (Burgers' 方程式)

$\Omega = (0, 1) \times (0, 1) \subseteq \mathbb{R}^2$:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial u}{\partial t} = u \frac{\partial u}{\partial x_1} + v \frac{\partial u}{\partial x_2} + \frac{1}{Re} \Delta u \\ \frac{\partial v}{\partial t} = u \frac{\partial v}{\partial x_1} + v \frac{\partial v}{\partial x_2} + \frac{1}{Re} \Delta v \\ u = u_{anal}(0, x) \\ v = v_{anal}(0, x) \\ u = u_{anal}(t, x) \\ v = v_{anal}(t, x) \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} \text{in } (0, T] \times \Omega, \\ \text{on } \{0\} \times \Omega, \\ \text{on } (0, T] \times \partial\Omega, \end{array} \quad (29)$$

ただし, $Re = 100$, $u_{anal}(x_1, x_2) = 3/4 - 1/(4 + 4e^{Re(-t-4x_1+4x_2)/32})$, $v_{anal}(x_1, x_2) = 3/4 + 1/(4 + 4e^{Re(-t-4x_1+4x_2)/32})$. 式 (29) の解析解は u_{anal} , v_{anal} である [14]. 離散化すると, 式 (2) において $F(y) = Ly + Q(y)y + n(t)$ となる. よって, $L_i = L + Q(y_{i-1})$ と設定して, 式 (5) において $\Delta t = 0.01$, $r = 1$ とした Exponential integrator を 100 ステップ適用した. Exponential integrator の各タイムステップに現れる ϕ_1 を, ISIAP 法, SIAP 法, AP 法を用いて計算した. ただし, $tol_{phi} = 10^{-8}$ と設定し, ISIAP 法, SIAP 法では, $\gamma = 10^{-2}$, $m_{max} = 100$, $\delta = 10^{-2}$ を用いた. 各算法の実行時間, 相対誤差を表 1 に示す. 行列の次元 n が同じであれば, 相対誤差は全ての算法において同じになった. 一方, 実行時間は全ての場合で ISIAP 法が最も早くなった.

Example 2 (移流拡散方程式)

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

$$\begin{cases} \rho c_v \frac{\partial u}{\partial t} = \lambda \Delta u - \nabla \cdot cu & \text{in } (0, T] \times \Omega, \\ u = u_0 & \text{on } \{0\} \times \Omega, \\ -\lambda \frac{\partial u}{\partial n} = \alpha(u - 280) & \text{on } (0, T] \times \partial\Omega_1, \\ -\lambda \frac{\partial u}{\partial n_b} = -1 & \text{on } (0, T] \times \partial\Omega_2, \end{cases} \quad (30)$$

ただし, $\partial\Omega_2 = \{1.5\} \times [-1, 1]$, $\partial\Omega_1 = \partial\Omega \setminus \partial\Omega_2$, $c = [5 \ 0]$, $\rho = 1.3$, $c_v = 1000$, $\lambda = 0.025$, $\alpha = 9.3$,

$$u_0(x_1, x_2) = \begin{cases} 300 & \text{in } (-1, 1) \times (-1, 1) \cap \Omega, \\ 280 & \text{otherwise.} \end{cases}$$

式 (30) は, 熱の移流拡散を表す方程式であり, 次のような現象のモデルである. 中央に穴が空いた部屋 Ω があり, 壁 $\partial\Omega_1$ は常に温度 300K に保たれている. 壁 $\partial\Omega_2$ には常に一定の熱流束 -10W/m があり, 壁 $\partial\Omega_3$ では 280K の外気と壁を通して熱のやりとりがある. さらに, 部屋の中には常に 5m/s の空気の流れがある. $u(t, x)$ は, 時刻 t , 位置 x における温度を表している. 式 (30) は線形であるから, 式 (3) を計算することで数値解が求まる. 式 (3) に現れる行列指数関数を $t = 150$ の場合に IRKP 法, RKP 法, AP 法を用いて計算した. ただし, $tol_{phi} = 10^{-8}$ と設定し, IRKP 法, RKP 法では, $\delta = 10^{-2}$, 次式で定義される γ_m を用いた [7].

$$\frac{1}{\gamma_m} = \frac{100}{t} + (-1)^{m-1} \frac{2.5}{t} \left\lceil \frac{m-1}{2} \right\rceil i.$$

また, 式 (3) の解析解は求められないため, 離散化された行列に対して AP 法で $tol_{phi} = 10^{-14}$ として計算した数値解を正確な解とみなして相対誤差を求めた.

各算法の実行時間, 反復回数, 相対誤差を表 2 に示す. 行列の次元 n が同じであれば, 相対誤差は全ての算法においてほぼ同じになった. 一方, 実行時間は全ての場合で IRKP 法が最も早くなった.

また, $n = 98016$ の時の反復回数 m と線形方程式 $(M + \gamma_m L)x_m = Mv_m$ を解く際の収束判定条件 $tol_{sys,m}$ を図 1, 反復回数 m と相対残差ノルムの関係を図 2 に示す. 図 1 より, IRKP 法は, $tol_{sys,m}$ が m の増加とともに大きくなっていくことで解を効率良く計算していることがわかる. また, 図 2 より, 十分な外部反復を行えば, 計算残差ノルム $\|r_{phi,m}^{comp}\|$ が m の増加とともに減少していることがわかる. しかし, 真の相対残差ノルム $\|r_{phi,m}^{real}\|$ の減少は tol_{phi} に達した時点で頭打ちとなっている. これは Theorem 3.2 により $\|r_{phi,m}^{real}\|$ をコントロールしているためであり, この図 2 から IRKP 法が解を効率良く計算していることがわかる. さらに, $r_{phi,m}^{real}$ と $r_{phi,m}^{comp}$ は tol_{exp} までは同じ振る舞いをしている. よって, $r_{phi,m}^{comp}$ を収束判定に用いてよいことがわかる.

さらに, $n = 98016$ の時の IRKP 法により求めた数値解を図 3 に示す. IRKP 法が正しい数値解を計算していることがわかる.

表 2: Example 2: IRKP 法, RKP 法, AP 法の比較

n	Algorithm	実行時間 (s)	反復回数	相対誤差
24688	IRKP	1.81	52	$3.1e-08$
	RKP	2.17	52	$3.1e-08$
	AP	5.11	202	$1.9e-08$
98016	IRKP	15.91	54	$7.6e-08$
	RKP	24.78	54	$7.6e-08$
	AP	54.88	432	$9.9e-08$

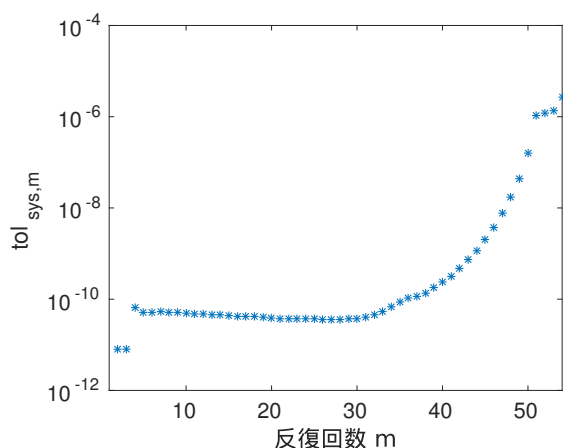


図 1: Example 2, $n = 98016$: 反復回数 m と $tol_{sys,m}$ の関係.

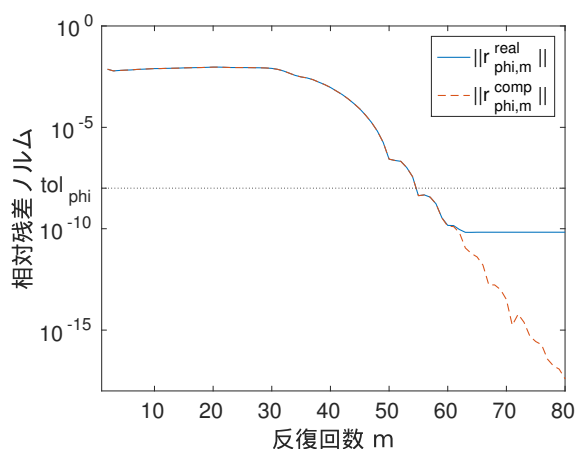


図 2: Example 2, $n = 98016$: 反復回数 m と相対残差の関係.

5 結論

Exponential integrator に現れる大規模 ϕ 関数の計算には, ISIAP 法や IRKP 法が適している. ISIAP 法, IRKP 法は, 各 Arnoldi 過程の反復に現れる線形方程式を効率よく解くことで, 計算コストを削減できる. 実際に, Arnoldi 過程の反復が進むにつれて, 線形方程式の解の精度を落として良いことを示せた. また, 計算コストの少ない計算残差により収束判定を行うことが可能である. 一方で, ISIAP 法, IRKP 法は, 与えられた tol_{phi} に対して, 一般残差が tol_{phi} 以下になることを保証する.

参考文献

- [1] Benzi, M. and Boito, P., Decay properties for functions of matrices over C^* -algebras. *Linear Algebra and its Applications*, 456(1): 174–198, 2014.
- [2] Benzi, M., Boito, P. and Razouk, N., Decay properties of spectral projectors with Applications to electronic structure. *SIAM Review*, 55(1): 3-64, 2013.

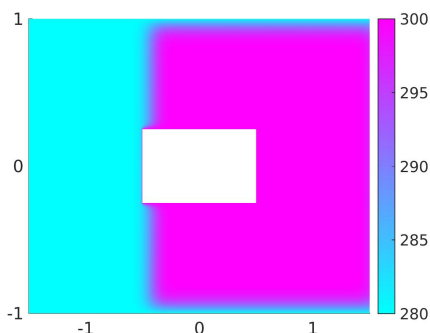


図 3: Example 2, $n = 98016$: IRKP による数値解.

- [3] Carathéodory, C., Über die gegenseitige Beziehung der Ränder bei der konformen Abbildung des Inneren einer Jordanschen Kurve auf einen Kreis. *Mathematische Annalen*, 73(2): 305–320, 1913.
- [4] Crouzeix, M., Numerical range and functional calculus in Hilbert space., *Journal of Functional Analysis*, 244: 668–690, 2007.
- [5] Gang, W., Feng, T. and Yimin, W., An inexact shift-and-invert Arnoldi algorithm for Toeplitz matrix exponential. *Numerical Linear Algebra with Applications*, 22(4): 777–792, 2015.
- [6] Gallopoulos, E. and Saad, Y., Efficient solution of parabolic equations by Krylov approximation methods. *SIAM Journal on Scientific Statistics*, 13(5):1236–1264, 1992.
- [7] Göckler, T., Rational Krylov subspace methods for ϕ -functions in exponential integrators. em Karlsruher Institut für Technologie, 2014, Ph.D. thesis.
- [8] Güttel, S., “Rational Krylov Approximation of Matrix Functions: Numerical Methods and Optimal Pole Selection,” *GAMM-Mitteilungen*, Vol. 36 (2013), 8–31.
- [9] Hochbruck, M., A short course on exponential integrators. *Series in Contemporary Applied Mathematics*, 17: 29–49, 2015.
- [10] Hochbruck, M. and Ostermann, A., Exponential Runge-Kutta methods for parabolic problems. *Applied Numerical Mathematics*, 53(2–4): 323–339, 2005.
- [11] ———, Exponential integrators. *Acta Numerica*, 19:209–286, 2010.
- [12] Hochbruck, M. and Lubich, C., On Krylov subspace approximations to the matrix exponential Operator. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 34(5): 1911–1925, 1997.
- [13] Hochbruck, M., Lubich, C. and Selhofer, H., Exponential integrators for large systems of differential equations. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 19(5):1552–1574, 1997.

- [14] Hongqing, Z., Huazhong, S. and Meiyu, D., Numerical solutions of two-dimensional Burgers' equations by discrete Adomian decomposition method. *Computers & Mathematics with Applications*, 60(3): 840–848, 2010.
- [15] Moret, I. and Novati, P., RD-rational approximations of the matrix exponential. *BIT Numerical Mathematics*, 44(3): 595–615, 2004.
- [16] Moler, C. and Van Loan, C. F., Nineteen dubious ways to compute the exponential of a matrix, Twenty-Five Years Later. *SIAM Review*, 45(1): 3–49, 2003.
- [17] Novati, P., Using the restricted-denominator rational Arnoldi method for exponential integrators. *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, 32(4): 1537–1558, 2011.
- [18] Van der Vorst, H. A., Bi-CGSTAB: A fast and smoothly converging variant of Bi-CG for the solution of nonsymmetric linear systems. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, 13(2): 631–644, 1992.
- [19] 橋本悠香, 野寺隆, 線形発展方程式のための Inexact Shift-invert Arnoldi 法. 情報処理学会論文誌, 57(10): 2250–2259, 2016.

Department of Mathematics
Faculty of Science and Technology
Keio University

Research Report

2015

- [15/001] Shiro Ishikawa,
Linguistic interpretation of quantum mechanics: Quantum Language,
KSTS/RR-15/001, January 22, 2015
- [15/002] Takuji Arai, Ryoichi Suzuki,
Local risk-minimization for Lévy markets,
KSTS/RR-15/002, February 2, 2015
- [15/003] Kazuma Teramoto, Takashi Nodera,
Lanczos type method for computing PageRank,
KSTS/RR-15/003, March 9, 2015
- [15/004] Yoichi Matsuo, Takashi Nodera,
Block symplectic Gram-Schmidt method,
KSTS/RR-15/004, March 9, 2015
- [15/005] Yuto Yokota, Takashi Nodera,
The L-BFGS method for nonlinear GMRES acceleration,
KSTS/RR-15/005, March 9, 2015
- [15/006] Takatoshi Nakamura, Takashi Nodera,
The flexible incomplete LU preconditioner for large nonsymmetric linear systems,
KSTS/RR-15/006, April 13, 2015
- [15/007] Takuro Kutsukake, Takashi Nodera,
The deflated flexible GMRES with an approximate inverse preconditioner,
KSTS/RR-15/007, April 15, 2015
- [15/008] Dai Togashi, Takashi Nodera,
The GKB-GCV method for solving the general form of the Tikhonov regularization,
KSTS/RR-15/008, September 29, 2015
- [15/009] Shiro Ishikawa,
The projection postulate in the linguistic interpretation of quantum mechanics,
KSTS/RR-15/009, November 8, 2015

2016

- [16/001] Shiro Ishikawa,
Linguistic interpretation of quantum mechanics: Quantum Language [Ver. 2],
KSTS/RR-16/001, January 8, 2016
- [16/002] Yuka Hashimoto, Takashi Nodera,
Inexact shift-invert Arnoldi method for evolution equations,
KSTS/RR-16/002, May 6, 2016
- [16/003] Yuka Hashimoto, Takashi Nodera,
A Note on Inexact Rational Krylov Method for Evolution Equations,
KSTS/RR-16/003, November 9, 2016