

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

橋本 悠香

慶應義塾大学理工学部数理科学科
野寺研究室

目次

1	序論	1
1.1	背景	1
1.2	記法	2
2	行列指数関数のための Krylov 部分空間法	3
2.1	AE 法	3
2.2	SIAE 法	4
3	線形発展方程式の離散化	7
3.1	有限差分法	7
3.2	有限要素法	7
4	ISIAE 法	9
4.1	ISIAE 法	9
4.2	ISIAE 法の誤差解析	14
5	数値実験	18
6	結論	26
	謝辞	26
	参考文献	27
A	ISIAE 法	30
B	BiCGStab 法	32

要 旨

1 階の時間微分を含む線形発展方程式の初期値境界値問題を考える．例として移流拡散方程式等がある．このような問題の数値解法として，空間方向にのみ離散化を行い，1 階の多次元常微分方程式を導く方法が効率的である．ただし，この方法は，特殊な形式の大規模行列指数関数の計算を必要とする．大規模行列指数関数を計算するための方法には，Arnoldi 法を利用するものがあるが，離散化により導かれる行列の性質や求めたい近似解によっては，多くの反復回数を必要とする．これを改善する方法として Shift-invert Arnoldi 法 [BIT Numerical Mathematics, pp. 595–615, 2004] が提案されている．本稿では，問題を適切に離散化する方法について述べ，行列指数関数を高速に計算する Shift-invert Arnoldi 法に基づく新しい算法を提案する．

第 1 章

序論

1.1 背景

線形発展方程式の数値解を求めることは、物理学、工学において重要な意味を持つ。移流拡散方程式はその代表例であり、建築物理学や流体の流れを解析するトレーサー試験などに応用されている [18, 19]。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て、 $[0, T] \times \overline{\Omega}$ ($T > 0$) 上で定義された次の初期値境界値問題を考える。

$$\begin{cases} \frac{\partial u(t, x)}{\partial t} = \mathcal{L}u(t, x) & \text{in } (0, T] \times \Omega \\ u(t, x) = \phi(x) & \text{on } \{0\} \times \overline{\Omega} \\ u(t, x) = \psi(x) & \text{on } (0, T] \times \partial\Omega_1 \\ \frac{\partial u(t, x)}{\partial n} = \tau_1(x)u(t, x) + \tau_2(x) & \text{on } (0, T] \times \partial\Omega_2 \end{cases} \quad (1.1)$$

ただし、解は、 $\mathcal{V} \subseteq L^2((0, T] \times \Omega)$ を満たす解空間 \mathcal{V} で探すものとする。ここで、 $\partial\Omega = \partial\Omega_1 \cup \partial\Omega_2$ 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、 $u(t, \cdot) \in L^2(\Omega)$ ($\forall t \in (0, T]$) に関して線形で t に依存しないものである。また、 $\phi \in L^2(\overline{\Omega})$ 、 $\psi \in L^2(\partial\Omega_1)$ 、 $\tau_1 \in L^\infty(\partial\Omega_2)$ 、 $\tau_2 \in (L^2(\partial\Omega_2))^\#$ 、 $(L^2(\partial\Omega_2))^\#$ は、 $L^2(\partial\Omega_2)$ の双対空間とする。一般的に、式 (1.1) で表される問題の近似解を求めるためには空間方向と時間方向両方に対する離散化を行うことになる [11, pp. 22–27]。しかし、この方法では時間方向のステップサイズが細くなるほど、また、 t が大きくなるほど多くの線形方程式を解かなければならないため、計算コストが増大する。

一方、空間方向にのみ離散化を行うと次式が導かれる。

$$\begin{cases} B\dot{y}(t) = -Ay(t) + c \\ y(0) = v \end{cases} \quad (1.2)$$

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。ここで、 $\exists \beta \in \mathbb{R}$ 、 $\exists \theta \in (0, \pi/2)$ 、 $W(B^{-1}A) \subseteq \Sigma_{\beta, \theta}$ とする。ただし、

$$\begin{aligned} W(A) &= \{u^*Au; u \in \mathbb{C}^n, u^*u = 1\}, \\ \Sigma_{\alpha, \theta} &= \{z \in \mathbb{C}; |\arg(z - \alpha)| < \theta\}. \end{aligned}$$

式 (1.2) の多次元常微分方程式の解は，行列 B が正則であれば次式のようになる．

$$y(t) = e^{-tB^{-1}A}v + e^{-tB^{-1}A} \int_0^t e^{sB^{-1}A} ds B^{-1}c$$

さらに，行列 A が正則であれば次式のようになる．

$$y(t) = e^{-tB^{-1}A}(v - A^{-1}c) + A^{-1}c \quad (1.3)$$

ここで， $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ， $v \in \mathbb{R}^n$ ， $t \in \mathbb{R}$ に対して， $e^{-tA}v$ という形式の行列指数関数を計算する方法は文献 [1, 2, 3, 4, 5] で提案されている．大規模行列に対しては，この中でも Krylov 部分空間法が有効である．文献 [3, 4] で提案された Arnoldi 法 (AE 法) で計算すると，一般には $\|tA\|_2$ が大きいほど収束に必要な反復回数が増加する．また，行列 A の固有値分布によっては Arnoldi 法の収束に必要な反復回数が増加するため，全体的な反復回数も増加する．これを避けるために，Shift-invert Arnoldi 法 (SIAE 法)[5] が提案された．この方法では，収束が t にはよらず，行列 A の固有値分布も改善されるため，収束に必要な反復回数は大幅に減少する [1, 5]．一方，SIAE 法は各反復において $(I + \gamma A)^{-1}v_m$ を計算する必要がある．ただし， $\gamma > 0$ はパラメータ， $v_m \in \mathbb{R}^n$ である．このため， $e^{-tA}v$ の計算においては，1 回の反復に必要な計算コストが AE 法に比べて大きくなる．しかし，式 (1.3) に現れる行列指数関数は $e^{-tB^{-1}A}v$ という形式をしている．これを計算するには，AE 法では各反復において $B^{-1}Av_m$ ，SIAE 法では $(I + \gamma B^{-1}A)^{-1}v_m$ を計算する必要がある．前者は $Bx = Av_m$ という線形方程式を解くことで計算でき，後者は $(I + \gamma B^{-1}A)^{-1} = (B + \gamma A)^{-1}B$ より， $(B + \gamma A)x = Bv_m$ という線形方程式を解くことで計算できる．よって，このような行列指数関数に対しては，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ため，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は反復法または直接法で解く以外に方法がない．反復法を用いた場合は，内部反復が生まれ，1 回の外部反復にかなりの計算時間を必要とする．直接法を用いた場合は，LU 分解は 1 度だけ行えば良いが，分解された行列の疎性が fill in により低下するため，多くのメモリを必要とする．

本稿では，式 (1.1) を式 (1.2) の形に離散化する方法について述べる．その上で，必要な $y(t)$ の近似の精度を保障しながら，各反復で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 章では，行列指数関数のための AE 法と SIAE 法について述べる．3 章では，式 (1.1) を離散化する方法について述べる．さらに 4 章では，離散化された方程式を ISIAE 法で解く方法とその理論的背景について述べ，誤差解析を行う．最後に 5 章で数値実験の結果を示し，3 章，4 章で述べた方法の有効性を示す．

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．

第 2 章

行列指数関数のための Krylov 部分空間法

本章では, $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $v \in \mathbb{R}^n$ に対して, $e^{-tA}v$ を計算するための Krylov 部分空間法, AE 法と SIAE 法について述べる.

2.1 AE 法

$\beta := \|v\|$, 初期ベクトル $v_1 := v/\beta$ として Arnoldi 法の反復を行うと, m 回反復で次式のように変形できる.

$$\begin{aligned} AV_m &= V_m H_m + h_{m+1,m} v_{m+1} e_m^T \\ V_m^T AV_m &= H_m \end{aligned}$$

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, $H_m \in \mathbb{R}^{m \times m}$ は上ヘッセンベルグ行列である. これを用いて, 次式のように近似する.

$$e^{-tA}v \approx V_m V_m^T e^{-tA}v = \beta V_m V_m^T e^{-tA}V_m e_1 \approx \beta V_m e^{-tV_m^T AV_m} e_1 = \beta V_m e^{-tH_m} e_1 =: V_m a_m(t)$$

この方法による残差 $r_{exp,m}^{real}$ は以下のようなになるから, アルゴリズムにまとめると, Algorithm 1 のようになる. ただし, m_{max} は最大反復回数である.

$$\begin{aligned} r_{exp,m}^{real} &:= -\beta AV_m e^{-tH_m} e_1 - \beta V_m \dot{a}_m(t) \\ &= -\beta AV_m e^{-tH_m} e_1 + \beta V_m H_m a_m(t) \\ &= -\beta AV_m e^{-tH_m} e_1 + \beta AV_m a_m(t) - \beta h_{m+1,m} v_{m+1} e_m^T a_m(t) \\ &= -\beta h_{m+1,m} v_{m+1} e_m^T a_m(t) \end{aligned}$$

この方法による誤差は, $\mu(B) := \lim_{h \rightarrow 0+} (\|I + hB\| - 1)/h$ とおくと, 次式のようになる [3].

$$\|e^{-tA}v - \beta V_m e^{-tH_m} e_1\| \leq 2\beta \frac{\|tA\|^m}{m!} \max(1, e^{\mu(tA)})$$

特に, $\|tA\|$ が大きくなるにつれて収束に必要な反復回数が増加する特徴がある.

Algorithm 1 AE 法**Require:** $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $v \in \mathbb{R}^n$, $t \in (0, T]$, $tol_{exp} > 0$, $m_{max} \in \mathbb{N}$ **Ensure:** $y_m(t)$ such that $\|r_{exp,m}^{real}\| \leq tol_{exp}$ $\beta = \|v\|$, $v_1 = v/\beta$ **for** $m = 1, 2, \dots, m_{max}$ **do** $u = Av_m$ **for** $k = 1, 2, \dots, m$ **do** $h_{k,m} = u^T v_k$ $u = u - h_{k,m} v_k$ **end for** $h_{m+1,m} = \|u\|$, $v_{m+1} = u/h_{m+1,m}$ $r = \beta |h_{m+1,1} e_m e^{-tH_m} e_1| \|v_{m+1}\|$ **if** $r \leq tol_{exp}$ **then** $y_m(t) = \beta V_m e^{-tH_m} e_1$, **break****end if****end for**

2.2 SIAE 法

$(I + \gamma A)^{-1}$, $\gamma > 0$ に対して Arnoldi 法の反復を行うと, m 回目の反復で次式のように変形できる.

$$\begin{aligned} (I + \gamma A)^{-1} V_m &= V_m H_m + h_{m+1,m} v_{m+1} e_m^T \\ V_m^T (I + \gamma A)^{-1} V_m &= H_m \end{aligned} \quad (2.1)$$

行列 H_m が正則なら, 式 (2.1) より次式が成り立つ.

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

ここで, $H_m^{-1} \approx V_m^T (I + \gamma A) V_m$ と近似すれば, $V_m^T A V_m \approx \gamma^{-1} (H_m^{-1} - I)$ が得られる. よって, これを用いて次式のように近似する.

$$e^{-tA} v \approx V_m V_m^T e^{-tA} v = \beta V_m V_m^T e^{-tA} V_m e_1 \approx \beta V_m e^{-\frac{t}{\gamma} (H_m^{-1} - I)} e_1 =: V_m b_m(t)$$

Algorithm 2 SIAE 法

Require: $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $v \in \mathbb{R}^n$, $t \in (0, T]$, $\gamma > 0$, $tol_{exp} > 0$, $m_{max} \in \mathbb{N}$

Ensure: $y_m(t)$ such that $\|r_{exp,m}^{real}\| \leq tol_{exp}$

$\beta = \|v\|$, $v_1 = v/\beta$

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

 Compute x such that $(I + \gamma A)x = v_m$

for $k = 1, 2, \dots, m$ **do**

$h_{k,m} = x^T v_k$

$x = x - h_{k,m} v_k$

end for

$h_{m+1,m} = \|x\|$, $v_{m+1} = x/h_{m+1,m}$

$r = |h_{m+1,m} e_m^T H_m^{-1} e^{-\frac{t}{\gamma}(H_m^{-1} - I)} e_1| \|(I + \gamma A)v_{m+1}\|/\gamma$

if $r \leq tol_{exp}$ **then**

$y_m(t) = \beta V_m e^{-\frac{t}{\gamma}(H_m^{-1} - I)} e_1$, **break**

end if

end for

この方法による残差 $r_{exp,m}^{real}$ は以下のようになるから，アルゴリズムにまとめると，Algorithm 2 のようになる．

$$\begin{aligned}
 r_{exp,m}^{real} &:= -AV_m b_m(t) - V_m \dot{b}_m(t) - AV_m b_m(t) + \frac{1}{\gamma} V_m (H_m^{-1} - I) b_m(t) \\
 &= -\frac{1}{\gamma} (I + \gamma A) V_m b_m(t) + \frac{1}{\gamma} V_m H_m^{-1} b_m(t) \\
 &= -\frac{1}{\gamma} (I + \gamma A) V_m b_m(t) + \frac{1}{\gamma} (I + \gamma A) V_m b_m(t) \\
 &\quad + \frac{1}{\gamma} h_{m+1,m} (e_m^T H_m^{-1} b_m(t)) (I + \gamma A) v_{m+1} \\
 &= \frac{1}{\gamma} h_{m+1,m} (e_m^T H_m^{-1} b_m(t)) (I + \gamma A) v_{m+1}
 \end{aligned}$$

この方法による誤差について，次の命題が成立する [5, 1] .

Proposition 2.1 $S_{\rho,\theta} := \{z \in \mathbb{C}; z \in \Sigma_{0,\theta}, 0 < |z| \leq \rho\}$, $\Pi_s := \{\text{次数 } s \text{ 以下の全ての多項式}\}$, Γ^* を $S_{\rho^*,\theta^*} (\rho^* \geq 1/(1 - \sin(\theta^* - \theta)), \theta < \theta^* < \pi/2)$ を含む円周, $g(z) := e^{-\frac{t}{\gamma}(z^{-1} - 1)}$ とすると

$$W((I + \gamma A)^{-1}) \subseteq \overline{S_{\rho,\theta}} \quad (2.2)$$

ならば，次式が成立する．

$$\|e^{-tA} v - V_m b_m(t)\| \leq \frac{1 + \beta}{2\pi \sin(\theta^* - \theta)} \min_{p \in \Pi_{m-1}} \int_{\Gamma^*} \left| \frac{g(\lambda) - p(\lambda)}{\lambda} \right| |d\lambda| \quad (2.3)$$

Proof: $Z := (I + \gamma A)^{-1}$ とおくと, 式 (2.1) を帰納的に用いることにより次式が導かれる.

$$Z^k v_1 = V_m H_m^k e_1 \quad (k = 1, \dots, m-1)$$

よって, $\forall p \in \Pi_{m-1}$ に対して次式が成立する.

$$\begin{aligned} e^{-tA}v - V_m b_m(t) &= g(Z)v - \beta V_m g(H_m)e_1 \\ &= g(Z)v - p(Z)v + \beta V_m p(H_m)e_1 - \beta V_m g(H_m)e_1 \\ &= \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma^*} (g(\lambda) - p(\lambda))(\lambda I - Z)^{-1} v d\lambda \\ &\quad - \frac{\beta}{2\pi i} \int_{\Gamma^*} (g(\lambda) - p(\lambda))(\lambda I - H_m)^{-1} e_1 d\lambda \\ &= \int_{\Gamma^*} (g(\lambda) - p(\lambda))((\lambda I - Z)^{-1} v - \beta V_m (\lambda I - H_m)^{-1} e_1) d\lambda \end{aligned}$$

ただし, 2 行目から 3 行目の変形には, Dunford-Taylor integral form[16, pp. 44] を用いた.

ここで, $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $W(A) \subseteq V$ を満たす凸閉集合 V に対して $\|(\lambda I - A)^{-1}\| \leq \text{dist}(\lambda, V)^{-1}$ [17] が成立することと $W(H_m) \subseteq W(Z)$ より次式が成立する.

$$\|e^{-tA}v - V_m b_m(t)\| \leq \frac{1}{2\pi} \int_{\Gamma^*} |g(\lambda) - p(\lambda)| \frac{1 + \beta}{\text{dist}(\lambda, W(Z))} |d\lambda|$$

さらに, 仮定より $\rho^* - \rho \geq \rho^* \sin(\theta^* - \theta)$ だから $\text{dist}(\lambda, W(Z)) \geq \rho - \rho^* \geq \rho^* \sin(\theta - \theta^*)$ が成立することと, $p \in \Pi_{m-1}$ は任意であることから次式が成立し, 命題が成立する.

$$\|e^{-tA}v - V_m b_m(t)\| \leq \frac{(1 + \beta)\rho^*}{2\pi\rho^* \sin(\theta^* - \theta)} \min_{p \in \Pi_{m-1}} \int_{\Gamma^*} \left| \frac{g(\lambda) - p(\lambda)}{\lambda} \right| |d\lambda| \quad \square$$

Remark 2.1 Walsh の定理 [1, Theorem 3.1] より, 式 (2.3) の被積分関数は m の増加とともに減少していくことがわかる. また, $W((I + \gamma A)^{-1}) \subseteq \overline{S_{\rho, \theta}}$ という仮定は, $W(A) \subseteq \Sigma_{\beta, \theta}$ であれば適切な γ を選ぶことにより満たすことができる [5]. このとき, γ を t の影響を打ち消すような値として選べば, 収束に必要な反復回数は t によらずに決定できる.

第 3 章

線形発展方程式の離散化

3.1 有限差分法

有限差分法により式 (1.1) を空間方向に離散化すると、式 (1.2) において、 $B = I$ となる。ただし、Dirichlet 境界条件が与えられているノード x_i については、行列 A, B の対応する行を対角成分以外すべて 0 とする。このノードに対して、 $\frac{dy_i(t)}{dt} = 0$ だから、 $0 = -y_i(t) + c_i$ が満たされるように、 $c_i = \psi(x_i)$ とする。また、Neumann 境界条件が与えられているノードについては、ポアソン方程式など時間微分が入っていない方程式と同様に $\frac{\partial u(x,t)}{\partial n}$ の情報を c に組み込むこととする [7, pp. 203–204]。

3.2 有限要素法

写像 $\mathbf{u} : [0, T] \rightarrow \mathcal{V}_x$ を $t \mapsto u(t, \cdot)$ と定める。ただし、 $\mathcal{V}_x \subseteq L^2(\bar{\Omega})$ である。式 (1.1) を弱形式に変形すると、次式を満たす $\mathbf{u} \in L^2(0, T; \mathcal{V}_x)$ で、 $\frac{d\mathbf{u}(t)}{dt} \in L^2(0, T; \mathcal{V}_x^\#)$ となるものを求める問題となる [8, pp. 373–374]。

$$\begin{cases} \int_{\Omega} \frac{d\mathbf{u}(t)}{dt} v dx = a(\mathbf{u}(t), v) + l(v) & \forall v \in \mathcal{V}_0, \forall t \in (0, T] \\ \mathbf{u}(0) = \phi \end{cases} \quad (3.1)$$

ただし、 $\mathcal{V}_0 := \{v \in \mathcal{V}_x; v = 0 \text{ on } \partial\Omega_1\}$ であり、 a は双線形形式、 l は線形汎関数である。例えば、熱方程式の場合には次式ようになる。

$$\begin{aligned} a(\mathbf{u}(t), v) &= - \int_{\Omega} \nabla \mathbf{u}(t) \cdot \nabla v dx + \int_{\partial\Omega_2} \tau_1 \mathbf{u}(t) v dS \\ l(v) &= \int_{\partial\Omega_2} \tau_2 v dS \end{aligned}$$

有限次元空間 \mathcal{V}_h を $\mathcal{V}_h := \text{span}\{\eta_1, \dots, \eta_{N(h)}\}$ と定める。ここで、 $h > 0$ はパラメータ、 $N(h) \in \mathbb{N}$ であり、 η_i は $\eta_i \in \mathcal{V}_0$ を満たす区分多項式である。この空間 \mathcal{V}_h を用いて式 (3.1) を離散化すると、次式を満たす $\mathbf{u}_h \in \{u = \sum_{j=1}^{N(h)} y_j \eta_j; y_j \in L^2(0, T; \mathcal{V}_x), \frac{dy_j(t)}{dt} \in L^2(0, T; \mathcal{V}_x^\#)\}$

を求める問題となる．

$$\begin{cases} \int_{\Omega} \frac{d\mathbf{u}_h(t)}{dt} \eta_i dx = a(\mathbf{u}_h(t), \eta_i) + l(\eta_i) & \forall i = 1, \dots, N(h), \forall t \in (0, T] \\ \mathbf{u}_h(0) = \phi \end{cases} \quad (3.2)$$

ここで，(3.2) の左辺は次式のようになる．

$$\int_{\Omega} \frac{d\mathbf{u}_h(t)}{dt} \eta_i dx = \sum_{j=1}^{N(h)} \frac{dy_j(t)}{dt} \int_{\Omega} \eta_j \eta_i dx \quad (3.3)$$

式 (3.3) の右辺は $\sum_{j=1}^{N(h)} a(\eta_j, \eta_i) y_j(t) + l(\eta_i)$ と変形すれば， $y = [y_1, \dots, y_{N(h)}]^T$ として，式 (1.2) が導かれる [10, 11]．ただし，Dirichlet 境界条件が与えられているノードについては 3.1 節と同様に扱うこととする．

第 4 章

ISIAE 法

4.1 ISIAE 法

3 章で述べた方法により離散化された式 (1.2) の解 (1.3) は, 2 章において行列 A を行列 $B^{-1}A$ に置き換えることで計算できる. $W(B^{-1}A) \subseteq \Sigma_{\beta, \theta}$ であるから, SIAE 法において式 (2.2) で表される仮定は常に成り立つ. 2 章の 2 つの方法を比較すると, 1.1 節で述べたように, SIAE 法が適している. SIAE 法では各反復において $(I + \gamma B^{-1}A)^{-1}v_m$ を計算する必要がある. この値は, 一般には線形方程式 $(B + \gamma A)x = Bv_m$ を解くことによって得られる. $B = I$, かつ, A が Toeplitz 行列である時は, $I + \gamma A$ の逆行列を精度を落として構成することで, 高速に解くことが出来る [1, 2]. しかし, 一般の行列に対しては, 反復法または直接法で解く以外に方法はないため, 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. そこで, 我々は, 線形方程式を解く部分にかかる計算コストを少なくすることを考える. 概略としては, まず, 最初の外部反復に現れる線形方程式の解の精度を, 必要な $y(t)$ の近似の精度に応じて決定する. その後の外部反復においては, 1 つ前の外部反復で計算した値を用いて精度を決定していく. この精度は反復ごとに悪くなっていくから, 外部反復が進むにつれて 1 回の外部反復に必要な計算コストは減少していく. 具体的には以下のようにして精度を決定すればよい.

m 回目の外部反復において $(B + \gamma A)x_m = Bv_m$ を x_m について解いた時に生じる誤差を $f_m := x_m - \tilde{x}_m$ とし, $F_m := [f_1 \cdots f_m]$ とする. さらに, $r_{sys, m} := Bv_m - (B + \gamma A)\tilde{x}_m$ (残差ベクトル) とし, $R_m := [r_{sys, 1} \cdots r_{sys, m}]$, $\beta = \|v - A^{-1}c\|$, $v_1 = (v - A^{-1}c)/\beta$ とすると, m 回の外部反復を行うことにより, 次が得られる.

$$(B + \gamma A)^{-1}BV_m - F_m = V_m H_m + h_{m+1, m} v_{m+1} e_m^T \quad (4.1)$$

$$\begin{aligned} BV_m + R_m &= (B + \gamma A)V_m H_m + h_{m+1, m}(B + \gamma A)v_{m+1} e_m^T \\ BV_m H_m^{-1} + R_m H_m^{-1} &= (B + \gamma A)V_m + h_{m+1, m}(B + \gamma A)v_{m+1} e_m^T H_m^{-1} \end{aligned} \quad (4.2)$$

ここで, 行列 V_m, H_m は式 (2.1) のものと形は同じだが, $(B + \gamma A)x_m = Bv_m$ を精度を落として計算した結果として得られる値であるから, 値は異なることに注意する. この行列 V_m, H_m に対して, 以下のように近似する.

$$H_m^{-1} \approx V_m^T (I + \gamma B^{-1}A) V_m, \quad (4.3)$$

$$y(t) \approx \beta V_m e^{-\frac{t}{\gamma}(H_m^{-1} - I)} e_1 + A^{-1}c := V_m c_m(t) + A^{-1}c \quad (4.4)$$

この近似を，多次元微分方程式 (1.2) の解の近似と考えると残差 $r_{exp,m}^{real}$ を計算すると，次式のようになる．

$$\begin{aligned}
r_{exp,m}^{real} &:= -AV_m c_m(t) - AA^{-1}c + c - BV_m \dot{b}_m(t) \\
&= -AV_m c_m(t) + \frac{1}{\gamma} BV_m (H_m^{-1} - I) c_m(t) \\
&= -\frac{1}{\gamma} (B + \gamma A) V_m c_m(t) + \frac{1}{\gamma} BV_m H_m^{-1} c_m(t) \\
&= -\frac{1}{\gamma} (B + \gamma A) V_m c_m(t) + \frac{1}{\gamma} (B + \gamma A) V_m c_m(t) \\
&\quad + \frac{1}{\gamma} h_{m+1,m} (e_m^T H_m^{-1} c_m(t)) (B + \gamma A) v_{m+1} - \frac{1}{\gamma} R_m H_m^{-1} c_m(t) \quad (\because \text{式 (4.2)}) \\
&= \frac{1}{\gamma} h_{m+1,m} (e_m^T H_m^{-1} c_m(t)) (B + \gamma A) v_{m+1} - \frac{1}{\gamma} R_m H_m^{-1} c_m(t)
\end{aligned}$$

よって，次式が成り立つ．

$$\|r_{exp,m}^{real}\| \leq \frac{1}{\gamma} \|h_{m+1,m} (e_m^T H_m^{-1} c_m(t))\| \|(B + \gamma A) v_{m+1}\| + \frac{1}{\gamma} \|R_m H_m^{-1} c_m(t)\| \quad (4.5)$$

ここで，次の命題が成り立つ．

Proposition 4.1 $f(z) := \beta z^{-1} e^{-\frac{t}{\gamma}(z^{-1}-1)}$ とおく． H_m を正方な上ヘッセンベルグ行列とし

$$W(H_m) \subset \{z \in \mathbb{C}; \operatorname{Re}(z) > 0\} \quad (4.6)$$

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．

$$\left| (f(H_m))_{i,j} \right| < K \lambda^{i-j} \quad (i \geq j) \quad (4.7)$$

Proof: H_m と f は Benzi ら [6] の Theorem 11 の仮定を満たす．実際， $W(H_m)$ は有界凸だから， $W(H_m) \subset \mathcal{F} \subset \{z \in \mathbb{C}; \operatorname{Re}(z) > 0\}$ 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 $\{w \in \bar{\mathbb{C}}; |w| > \rho\}$ ($\rho > 0$) への全射な等角写像 Φ (すなわち双正則写像 [20, pp. 137–138]) で， $\Phi(\infty) = \infty$ ， $\lim_{z \rightarrow \infty} (\Phi(z)/z) = 1$ を満たすものが存在する [6]． $\partial \mathcal{F}$ は Jordan 閉曲線であるから，Carathéodory の定理 [15] 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 は上ヘッセンベルグであるから，Benzi ら [6] の Theorem 11 より命題が成立する．□

Remark 4.1 Proposition 4.1 は，式 (4.6) で表される仮定が満たされれば， $f(H_m)$ がヘッセンベルグ行列に近い形となることを示している．また， K と λ は \mathcal{F} のみに依存する．

Proposition 4.1 より，式 (4.5) の第 1 項目は次式のようになる．

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\gamma} |h_{m+1,m} (e_m^T f(H_m) e_1)| \|(B + \gamma A)v_{m+1}\| \\ & \leq \frac{1}{\gamma} |h_{m+1,m}| |(f(H_m))_{m,1}| \|(B + \gamma A)\| \|v_{m+1}\| \\ & \leq \frac{1}{\gamma} |h_{m+1,m}| \|(B + \gamma A)\| K \lambda^{m-1} \end{aligned}$$

ここで，次式が成立する．

$$\begin{aligned} |h_{m+1,m}| &= \|(B + \gamma A)^{-1} B v_m - f_m - h_{1,n} v_1 - \cdots - h_{m,m} v_m\| \\ &\leq \|(B + \gamma A)^{-1} B v_m\| + \|f_m\|, \\ \|f_m\| &\leq \|(B + \gamma A)^{-1}\| \|r_{sys,m}\| \end{aligned}$$

よって，

$$\|r_{sys,m}\| \leq \delta \quad (\delta > 0) \quad (4.8)$$

とすると，次式が成立する．

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\gamma} |h_{m+1,m} (e_m^T f(H_m) e_1)| \|(B + \gamma A)v_{m+1}\| \\ & \leq \frac{1}{\gamma} (\|B\| + \delta) \kappa(B + \gamma A) K \lambda^{m-1} \end{aligned}$$

よって，式 (4.5) の第 1 項目は m の増加とともに任意に小さくなる．

上の議論では式 (4.6) と式 (4.8) の 2 つを仮定している．式 (4.8) に関しては， m 回目の外部反復において，これを満たすように線形方程式 $(B + \gamma A)x_m = Bv_m$ を解けばよいから特に問題はない．式 (4.6) を保証するために，次の補題を利用する．

Lemma 4.1 A を正方行列とし， $A^{sym} := (A + A^T)/2$ ， $A^{skew} := (A - A^T)/2$ とすると，次式が成立する．

$$W(A) \subseteq W(A^{sym}) + W(A^{skew})$$

ここで， $W(A^{sym}) \subseteq \mathbb{R}$ ， $W(A^{skew}) \subseteq i\mathbb{R}$ である．

Proof: $x \in W(A)$ とすると， $\exists u \in \mathbb{C}$ に対して次式が成立する．

$$x = u^* A u = u^* A^{sym} u + u^* A^{skew} u \in W(A^{sym}) + W(A^{skew})$$

後半部分は， A^{sym} は対称行列， A^{skew} は歪対称行列であることから得られる．□

これより，行列 $H_m^{sym} = (H_m + H_m^T)/2$ の最小固有値が正になれば，式 (4.6) で表される仮定が満たされることがわかる．よって，各外部反復において，行列 H_m^{sym} の最小固有値が正になっているかを確認すればよい．実際， $F_m = O$ であれば， $W(H_m) \subseteq W((I + \gamma B^{-1} A)^{-1}) \subset \{z \in \mathbb{C}; \operatorname{Re}(z) > 0\}$ だから，正にならない場合， δ をより小さくし，内部反復の精度を上げるか， γ を小さくし，行列 $(I + \gamma B^{-1} A)^{-1}$ の値域がより原点から離れるようにすればよい．

Remark 4.2 $W(B^{-1}A) \subset \Sigma_{\beta, \theta}$ より, $\forall x \in W(B^{-1}A)$ に対して $\exists \alpha > 0, \exists \phi \in (0, \theta)$, $x = \beta + \alpha e^{i\phi}$ だから, $\forall u \in \mathbb{C}^n, \|u\| = 1$ に対して次式が成立する.

$$\begin{aligned}
& \operatorname{Re}(u^*(I + \gamma B^{-1}A)^{-1}u) \\
&= \operatorname{Re}(u^*(I + \gamma B^{-1}A)^{-*}u) \\
&= \operatorname{Re}(u^*(I + \gamma B^{-1}A)^{-*}(I + \gamma B^{-1}A)(I + \gamma B^{-1}A)^{-1}u) \\
&= \operatorname{Re}(\{(I + \gamma B^{-1}A)^{-1}u\}^*(I + \gamma B^{-1}A)\{(I + \gamma B^{-1}A)^{-1}u\}) \\
&= \|(I + \gamma B^{-1}A)^{-1}u\|^2 \operatorname{Re}\left(1 + \gamma \frac{\{(I + \gamma B^{-1}A)^{-1}u\}^* B^{-1}A \{(I + \gamma B^{-1}A)^{-1}u\}}{\|(I + \gamma B^{-1}A)^{-1}u\|^2}\right) \\
&= \|(B + \gamma A)^{-1}Bu\|^2 \operatorname{Re}(1 + \gamma(\beta + \alpha e^{i\phi})) \quad (\exists \alpha > 0, \exists \phi \in (0, \theta))
\end{aligned}$$

よって, $1 + \gamma\beta > 0$ となるように γ を選べば次式が成立する.

$$\operatorname{Re}(u^*(I + \gamma B^{-1}A)^{-1}u) \geq \sigma_{\min}((B + \gamma A)^{-1}B)^2 |1 + \gamma\beta|$$

ただし, $\sigma_{\min}(A)$ は行列 A の最小特異値である. よって, $\sigma_{\min}((B + \gamma A)^{-1}B)^2 |1 + \gamma\beta| > \|F_m\|$ ならば, $\forall u \in \mathbb{C}^n, \|u\| = 1$ に対して, 次式が成立する.

$$\begin{aligned}
\operatorname{Re}(u^* H_m u) &= \operatorname{Re}(u^* (V_m^T (I + \gamma B^{-1}A)^{-1} V_m) - V_m^T F_m) u) \\
&\geq \operatorname{Re}(u^* V_m^T (I + \gamma B^{-1}A)^{-1} V_m u) - |u^* V_m^T F_m u| \\
&\geq \operatorname{Re}(u^* V_m^T (I + \gamma B^{-1}A)^{-1} V_m u) - \|F_m\| \\
&\geq \sigma_{\min}((B + \gamma A)^{-1}B)^2 |1 + \gamma\beta| - \|F_m\| \quad (\because \|V_m u\|^2 = u^* V_m^T V_m u = 1) \\
&> 0
\end{aligned}$$

ここで, $\|F_m\| \leq \sqrt{m} \max_{1 \leq j \leq m} \|f_j\|$ が成立するから, $j = 1, \dots, m$ に対し次式が成立すれば仮定は満たされる.

$$\|f_j\| < \frac{\sigma_{\min}((B + \gamma A)^{-1}B)^2 |1 + \gamma\beta|}{\sqrt{m_{\max}}}$$

$\|f_j\| \leq \|(B + \gamma A)^{-1}\| \|r_j\|$ ($j = 1, \dots, m$) より, $\|r_j\|$ に対して次式が成立すればよい.

$$\|r_j\| \leq \frac{|1 + \gamma\beta|}{\sqrt{m_{\max}} \|(B + \gamma A)^{-1}\| \|B^{-1}(B + \gamma A)\|^2} \quad (4.9)$$

よって, 式 (4.9) を満たすように δ を定めれば, 仮定 (4.6) は満たされる. ただし, この値を計算するにはコストがかかりすぎる. さらに, 上の一連の導出には多くの不等式評価が含まれる. よって, 実際の計算では, 式 (4.9) の右辺より大きな値を δ として選んでも問題ない.

式 (4.5) の第 2 項目については, 次の定理が成立する.

Theorem 4.1 $(f(H_m))_{i,j} =: g_{i,j}^m$ とし, $tol_{exp} > 0$ を外部反復の収束判定条件とする．その他の記号はこれまでの定義に従うものとする．このとき

$$\|r_{sys,1}\| \leq \frac{\gamma \cdot tol_{exp}}{m_{max} \|H_m^{-1} c_m(t)\|}, \quad (4.10)$$

$$\|r_{sys,j}\| \leq \frac{|g_{1,1}^m|}{|g_{j-1,1}^m|} \|r_{sys,1}\| \quad (2 \leq j \leq m) \quad (4.11)$$

ならば, 次式が成立する．

$$\frac{1}{\gamma} \|R_m f(H_m) e_1\| \leq tol_{exp}$$

Proof: 次式が成立する．

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\gamma} \|R_m f(H_m) e_1\| \\ & \leq \frac{1}{\gamma} |g_{1,1}^m| \|r_{sys,1}\| + |g_{2,1}^m| \|r_{sys,2}\| + \cdots + |g_{m,1}^m| \|r_{sys,m}\| \end{aligned}$$

ここで, 式 (4.10), 式 (4.11) より次式が成立するから定理が成立する．

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\gamma} |g_{1,1}^m| \|r_{sys,1}\| + |g_{2,1}^m| \|r_{sys,2}\| + \cdots + |g_{m,1}^m| \|r_{sys,m}\| \\ & \leq \frac{1}{\gamma} |g_{1,1}^m| \|r_{sys,1}\| + |g_{2,1}^m| \frac{|g_{1,1}^m|}{|g_{1,1}^m|} \|r_{sys,1}\| + |g_{3,1}^m| \frac{|g_{1,1}^m|}{|g_{2,1}^m|} \|r_{sys,1}\| \\ & \quad + \cdots + |g_{m,1}^m| \frac{|g_{1,1}^m|}{|g_{m-1,1}^m|} \|r_{sys,1}\| \\ & = \frac{1}{\gamma} |g_{1,1}^m| \|r_{sys,1}\| \left(1 + \frac{|g_{2,1}^m|}{|g_{1,1}^m|} + \frac{|g_{3,1}^m|}{|g_{2,1}^m|} + \cdots + \frac{|g_{m,1}^m|}{|g_{m-1,1}^m|} \right) \\ & \leq \frac{1}{\gamma} \|f(H_m) e_1\| \|r_{sys,1}\| (1 + \lambda + \lambda + \cdots + \lambda) \quad (\because \text{式 (4.7)}) \\ & \leq \frac{1}{\gamma} \|H_m^{-1} c_m(t)\| \|r_{sys,1}\| \cdot m_{max} \\ & \leq tol_{exp} \quad \square \end{aligned}$$

Remark 4.3 上の定理より, m 回目の外部反復において, 式 (4.10), 式 (4.11) を満たすように線形方程式 $(B + \gamma A)x_j = Bv_j$ ($1 \leq j \leq m$) が解かれていれば, 式 (4.5) の第 1 項 $\|r_{exp,m}^{comp}\| := \|h_{m+1,m} (e_m^T f(H_m) e_1)\| \|(B + \gamma A)v_{m+1}\|/\gamma$ のみを計算し, これが収束判定条件 tol_{exp} に達するまで外部反復を行えばよい．

Remark 4.4 実際の計算では, 式 (4.10), 式 (4.11) に現れる m の入っている項を事前に計

算することはできない．そこで，式 (4.10) は，次の近似式を用いて計算する．

$$\begin{aligned}
& \|H_m^{-1}c_m(t)\| \|r_{sys,1}\| \\
& \approx \|r_{sys,1}\| \|V_m^T B^{-1}(B + \gamma A)V_m c_m(t)\| \quad (\because \text{式 (4.3)}) \\
& \approx \|r_{sys,1}\| \|V_m^T B^{-1}(B + \gamma A)(y(t) - A^{-1}c)\| \quad (\because \text{式 (4.4)}) \\
& \lesssim \|r_{sys,1}\| \|B^{-1}(B + \gamma A)(v - A^{-1}c)\|
\end{aligned}$$

よって，式 (4.10) の代わりに次式を用いる．

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

式 (4.11) は，式 (4.7) の K と λ が， H_m の次元 m に依存しない集合 \mathcal{F} のみに依存して決まるから， $2 \leq j \leq m$ 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，相対残差が tol_{exp} になることを収束判定条件にしたい場合は，次式を用いればよい．

$$\|r_{exp,m}^{comp}\| \leq tol_{exp} \|B^{-1}(-Ay(t) + c)\| \approx tol_{exp} \|B^{-1}(-Av + c)\|$$

4.1 節の内容をまとめると，Algorithm 3 のようになる．ただし， $(f_m)_j$ は f_m の第 j 成分である．

4.2 ISIAE 法の誤差解析

4.1 節では，ISIAE 法が残差を収束判定条件 tol_{exp} 以下に保障することを述べた．そこで，次に誤差について考える．

式 (4.1) を帰納的に用いると，次式が導かれる．

$$(ZB)^k v_1 = V_m H_m^k e_1 + \sum_{i=0}^{k-1} (ZB)^i F_m H_m^{k-1-i} e_1 \quad (k = 1, \dots, m-1)$$

ただし， $Z = (B + \gamma A)^{-1}$ である．よって， $\forall p \in \Pi_{m-1}$ に対して次式が成立する．

$$p(ZB)v_1 = V_m p(H_m)e_1 + \sum_{j=1}^{m-1} c_j \sum_{k=0}^{j-1} (ZB)^k F_m H_m^{j-1-k} e_1$$

ただし， $p(z) = \sum_{j=0}^{m-1} c_j z^j$ である．これより，Proposition 2.1 と同様にして，次の補題が成立する．

Lemma 4.2 Proposition 2.1 と同じ仮定の下， $W(H_m) \subseteq \overline{S_{\rho,\theta}}$ ，ならば，次式が成立する．

$$\|y(t) - V_m c_m(t) - A^{-1}c\| \leq \frac{1 + \beta}{2\pi \sin(\theta^* - \theta)} \min_{p \in \Pi_{m-1}} \int_{\Gamma^*} \left| \frac{g(\lambda) - p(\lambda)}{\lambda} \right| |d\lambda| + \|G_m\|$$

ただし， $G_m := \sum_{j=1}^{m-1} c_j \sum_{k=0}^{j-1} (ZB)^k F_m H_m^{j-1-k} e_1$ である．

Algorithm 3 ISIAE 法

Require: $A, B \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $v, c \in \mathbb{R}^n$, $t \in (0, T]$, $\gamma > 0$, $\delta > 0$, $tol_{exp} > 0$, $m_{max} \in \mathbb{N}$

Ensure: $y_m(t)$ such that $\|r_{exp,m}^{real}\| \leq tol_{exp}$

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

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

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

 Compute \tilde{x} such that $\|Bv_m - (B + \gamma A)\tilde{x}\| \leq tol_{sys,m}$

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

$h_{m+1,m} = \|\tilde{x}\|$, $v_{m+1} = \tilde{x}/h_{m+1,m}$

if $\lambda_{min}((H_m + H_m^T)/2) \leq 0$ **then**

print Warning

end if

$f_m = H_m^{-1} e^{-\frac{t}{\gamma}(H_m^{-1} - I)} e_1$

$r = |h_{m+1,m}(f_m)_m| \|(B + \gamma A)v_{m+1}\|/\gamma$

$tol_{sys,m+1} = \min\{tol_{sys,1} |(f_m)_1|/|(f_m)_m|, \delta\}$

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

これより，次の定理が成立する．

Theorem 4.2 $m \gg 1$ に対して $\gamma = O(\|v - A^{-1}c\|/\|B^{-1}\|)$ かつ $\max_{0 \leq k \leq m-2} \|((B + \gamma A)^{-1}B)^k\| \leq O(1)$ となるように γ をとれば， $\|G_m\| \leq O(tol_{exp})$ が成立する．

Proof: 次式が成立する．

$$\begin{aligned} \|G_m\| &= \left\| \sum_{k=0}^{m-2} \sum_{j=k+1}^{m-1} c_j (ZB)^k F_m H_m^{j-1-k} e_1 \right\| \\ &\leq \sum_{k=0}^{m-2} \|(ZB)^k\| \|F_m\| \sum_{j=k+1}^{m-1} c_j H_m^{j-1-k} e_1 \end{aligned}$$

ここで， $p_k(z) := \sum_{j=k+1}^{m-1} c_j z^{j-1-k}$ と定めると， p_k は多項式だから \mathbb{C} で正則である．よって，Benzi ら [6] の Theorem 11 よりある定数 $K'_k > 0$ と $0 < \lambda'_k < 1$ が存在して，次式が成立する．

$$|(p_k(H_m))_{i,j}| \leq K'_k \lambda'_k{}^{i-j} \quad (i \geq j)$$

p_k が \mathbb{C} で正則であることから, Benzi ら [6] の Theorem 9 より, Proposition 4.1 の λ に対して $\lambda'_k \ll \lambda$ ($k = 0, \dots, m-2$) ととることができる. よって, $\lambda' := \max_{0 \leq k \leq m-2} \lambda'_k$, $K' := \max_{0 \leq k \leq m-2} K'_k$ と定めれば $k = 0, \dots, m-2$ に対して次式が成立する.

$$\begin{aligned}
\|F_m p_k(H_m)e_1\| &\leq K'\|f_1\| + K'\lambda'\|f_2\| + \dots + K'\lambda'^{m-1}\|f_m\| \\
&\leq K'\|Z\|(\|r_{sys,1}\| + \lambda'\|r_{sys,2}\| + \dots + \lambda'^{m-1}\|r_{sys,m}\|) \\
&\leq K'\|Z\|\|r_{sys,1}\| \left(1 + \lambda' + \frac{\lambda'^2}{\lambda} + \dots + \frac{\lambda'^{m-1}}{\lambda^{m-2}}\right) \quad (\because \text{式 (4.11)}) \\
&\leq K'\|Z\| \frac{\gamma tol_{exp}}{m_{max}\|H_m^{-1}c_m(t)\|} \left(1 + \frac{\lambda'}{1 - \lambda'/\lambda}\right) \quad (\because \text{式 (4.10)}, \lambda'/\lambda < 1)
\end{aligned}$$

ここで, $\det(A) \neq 0$ なる正方行列 A と $k = 0 \dots m-2$ に対して $A \mapsto (A^{-1}B)^k$ という写像は $\|\cdot\|$ に関して連続であるから, $\forall \epsilon_k > 0$ と B に対して $\gamma\|A\|$ が十分小さくなるように γ をとれば, 次式が成立する.

$$\begin{aligned}
\|(ZB)^k\| &\leq \|((B + \gamma A)^{-1}B)^k - (B^{-1}B)^k\| + \|I\| \\
&\leq \epsilon + 1 \quad (k = 0 \dots m-2)
\end{aligned} \tag{4.12}$$

よって, $\max_{0 \leq k \leq m-2} \|(ZB)^k\| = O(1)$ なる γ をとることができる. また, 次式が成立する.

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\|H_m^{-1}c_m(t)\|} &\leq \frac{1}{\sigma_{min}(H_m^{-1})\|V_m c_m(t)\|} \\
&= \frac{\|H_m\|}{\|V_m c_m(t)\|} \\
&\leq \frac{\|ZB\|}{\|V_m c_m(t)\|} \\
&= O\left(\frac{1}{\|v - A^{-1}c\|}\right)
\end{aligned}$$

さらに, 式 (4.12) の ϵ に対して次式が成立する.

$$\|Z\| \leq \|(B + \gamma A)^{-1}B\| \|B^{-1}\| \leq (\epsilon + 1) \|B^{-1}\|$$

以上より, 次式が成立するから定理が成立する.

$$\begin{aligned}
\|G_m\| &\leq O\left(mK'\|B^{-1}\| \left(1 + \frac{\lambda\lambda'}{\lambda - \lambda'}\right) \frac{\gamma tol_{exp}}{m_{max}\|H_m^{-1}c_m(t)\|}\right) \\
&\leq O\left(\|B^{-1}\| \frac{\gamma tol_{exp}}{\|v - A^{-1}c\|}\right) \quad \square
\end{aligned}$$

以上より, 適切な γ をとれば, 誤差は tol_{exp} を閾値として m の増加とともに減少していくことがわかる.

Remark 4.5 理論的には γ を十分に小さくとおけば Theorem 4.2 の仮定は満たされる。しかし、実際の計算では γ があまりにも小さいと $(B + \gamma A)^{-1}B$ が I とほぼ等しくなる。このため、 $H_m = V_m^T (B + \gamma A)^{-1} B V_m$ が I とほぼ等しくなり、 $H_m^{-1} - I$ の計算において桁落ちが発生する可能性がある。

第 5 章

数値実験

本章では、数値実験により 3 章、4 章で述べた解法の有効性を示す。全ての数値実験は以下の環境で行った。

- 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

第 6 章

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 法を用いて解を計算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 の値や離散化により生じた行列の次元に依存しない反復回数で解を計算できる．また，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 1 回の反復を少ない計算時間で行うことができる．さらに，反復を進めれば残差や誤差が欲しい精度にまで減少した解を求めることができる．よって，特に，細かいメッシュでの離散化が必要な問題や大きな t の値に対する解が必要な場合はこの方法が有効である．今後は， A ， B ， c が t に依存する場合や， A が正則でない場合の拡張について検討したい．また，別な種類の偏微分方程式に対しても，Krylov 部分空間法を用いて解を計算する効率的なアルゴリズムを検討したい．

謝辞

本稿を作成するにあたり，野寺 隆先生には大変お世話になりました．また，野寺研究室の皆様には多くの助言をいただくとともに，大学生活においても様々なことで助けていただきました．この場を借りて感謝申し上げます．

参 考 文 献

- [1] Lee, S., Pang, H., and Sun, H., “*Shift-invert Arnoldi approximation to the Toeplitz matrix exponential*,” SIAM Journal on Scientific Computing, Vol. 32, pp. 774–792, 2010.
- [2] Feng, T., Gang, W., and Yimin, W., “*An inexact shift-and-invert Arnoldi algorithm for Toeplitz matrix exponential*,” Numerical Linear Algebra with Applications, Vol. 22, pp. 777–792, 2015.
- [3] Gallopoulos, E. and Saad, Y., “*Efficient Solution Of Parabolic Equations By Krylov Approximation Methods*,” SIAM Journal on Scientific Statistics, Vol. 13, pp. 1236–1264, 1992.
- [4] Moler, C. and Van Loan, C. F., “*Nineteen dubious ways to compute the exponential of a matrix, twenty-five years later*,” SIAM Review, Vol. 45, pp. 3–49, 2003.
- [5] Moret, I. and Novati, P., “*RD-rational approximations of the matrix exponential*,” BIT Vol. 44, pp. 595–615, 2004.
- [6] Benzi, M. and Poito, P., “*Decay properties for functions of matrices over C^* -algebras*,” Linear Algebra and its Applications, Vol. 456, pp. 174–198, 2014.
- [7] Forsythe, G. E. and Wasow, R. W., “*Finite-difference methods for partial differential equations*,” John Wiley & Sons Inc., New York·London·Sydney, 1960.
- [8] Evans, L. C., “*Partial Differential Equations Second Edition*,” AMS, Providence, 2010.
- [9] Van der Vorst, “*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, Vol. 13, pp. 631–644, 1992.
- [10] Albery, J., Carstensen, C., and Funken, S. A., “*Remarks around 50 lines of Matlab: short finite element implementation*,” Numerical Algorithms, Vol. 20, pp. 117–137, 1999.

- [11] Segal, Ir. A., “Finite element methods for the incompressible Navier-Stokes equations,” Delft Institute of Applied Mathematics, Delft, The Netherlands, 2015.
- [12] Mathworks, Matlab Documentation (parabolic), Mathworks (online), available from <<http://jp.mathworks.com/help/pde/ug/parabolic.html>> (accessed 2016-01-15).
- [13] Shampine, L. F. and Reichelt, M. W., “*The MATLAB ODE Suite*,” SIAM Journal on Scientific Computing, Vol. 18, pp. 1-22, 1997.
- [14] Saad, Y., “Iterative Methods for Sparse Linear Systems Second Edition,” SIAM, Philadelphia, 2003.
- [15] Carathéodory, C., “Über die gegenseitige Beziehung der Ränder bei der konformen Abbildung des Inneren einer Jordanschen Kurve auf einen Kreis,” Mathematische Annalen, Vol. 73, pp. 305–320, 1913.
- [16] Toshio, K., “Perturbation Theory for Linear operators,” Springer, New York, 1966.
- [17] Spijker, M. N., “Numerical Ranges and Stability Estimates,” Applied Numerical Mathematics, Vol. 13, pp. 241–249, 1993.
- [18] Svoboda, Z., “The Convective-diffusion Equation and Its Use In Building Physics,” International Journal on Architectural Science, Vol. 1, pp. 68–79, 2000.
- [19] António, A., Adérito, A. and Ercília, S., “Application of the Advection-dispersion Equation to Characterize the Hydrodynamic Regime in a Submerged Packed Bed Reactor,” Advances in Computational & Experimental Engineering & Sciences (Atluri, S. N. and Tadeu, A. J. B., eds.), Maderia, Portugal, ICCES, Tech Science Press, pp. 548–553, 2004.
- [20] 小平邦彦, “複素解析”, 岩波書店, 1991.

付 録 A

ISIAE法

```
function y=isiae(gamma,t,A,B,v,c,tol,delta,mmax)

%%%initialize%%%
C=B+gamma*A;
[L,U]=ilu(C);
[L1,U1]=ilu(A);
d=mybicgstab(L1,U1,A,c,10^(-14));
init=v-d;
beta=norm(init);
V(:,1)=init/beta;
[L2,U2]=ilu(B);
u=mybicgstab(L2,U2,B,C*init,10^(-14));
tolsys=gamma*tol/(norm(u)*mmax);
tol1=tolsys;
j=0;
r=1;
flag=0;

%%%start the iteration%%%
while r>tol&& j<=mmax

    j=j+1;
    b=B*V(:,j);

    %%%solve Cu=b for u inexactly%%%
    u=mybicgstab(L,U,C,b,min(tol1,delta));

    %%%compute the Arnoldi process%%%
    for k=1:j
        H(k,j)=V(:,k)'*u;
```

```
        u=u-H(k,j)*V(:,k);
    end
    H(j+1,j)=norm(u,2);
    V(:,j+1)=u/H(j+1,j);

    %%%check the condition for convergence%%%
    J=(H(1:j,1:j)+H(1:j,1:j)')/2;
    se=eigs(J,1,'sa');
    if se<eps
        if flag==0
            sprintf('Warning:Please set delta smaller value, or set gamma
            smaller value.')
            flag=1;
        end
    end

    %%%compute the approximation and the residual%%%
    y=beta*expm(-(t/gamma)*(H(1:j,1:j)\eye(j)-eye(j)));
    y=y(:,1);
    f=H(1:j,1:j)\y;
    tol1=tolsys*abs(f(1))/abs(f(j));
    v=C*V(:,j+1);
    r=abs(H(j+1,j)/gamma*(f(j)))*norm(v,2);

end

%%compute the solution%%
y=V(:,1:j)*y+d;
```

付 録 B

BiCGStab法

```
function x=mybicgstab(L,U,A,b,tol)

n=length(b);
x=zeros(n,1);
rj=b-A*x0;
r0=rj;
p=rj;

while norm(rj)>tol
    Ap=A*(U\ (L\p));
    alpha=(rj'*r0)/(Ap'*r0);
    s=rj-alpha*Ap;
    As=A*(U\ (L\s));
    w=(As'*s)/(As'*As);
    x=x+alpha*p+w*s;
    rj1=s-w*As;
    beta=alpha/w*(rj1'*r0)/(rj'*r0);
    p=rj1+beta*(p-w*Ap);
    rj=rj1;
end

x=U\ (L\x);
```