5G-07

発展方程式のためのParallel Shift-invert Rational Krylov法

橋本 悠香 †
慶應義塾大学理工学研究科 †

野寺 隆 ‡
慶応義塾大学理工学部 ‡

1 序論

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

$$\begin{cases} \dfrac{\partial^l u}{\partial t^l} = \mathcal{D}u & \text{in } (0,T]\times\Omega, \\ u = \xi & \text{on } \{0\}\times\overline{\Omega} \\ u = \eta & \text{on } (0,T]\times\partial\Omega_1 \\ \dfrac{\partial u}{\partial n_b} = \tau_1 u + \tau_2 & \text{on } (0,T]\times\partial\Omega_2 \end{cases} \tag{1}$$

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，$\mathcal{D}$ は $\mathcal{V}$ 上の微分作用素である．また，ξ，η，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行列形式の常微分方程式が得られる．この常微分方程式の解を求める方法として，Exponential Integrator が注目されている．Exponential Integrator では，以下で定義される ϕ 関数の行列関数とベクトルの積を計算する必要がある [2].

$$\phi_k(x) := \frac{\phi_{k-1}(x) - \frac{1}{(k-1)!}}{x} \quad k = 1,2,\ldots$$

ただし，$\phi_0(x) := e^x$ である．記号の煩雑性を避けるため，本稿では以下を計算することを考える．

$$\phi_k(A)v \quad A \in \mathbb{R}^{n\times n} \tag{2}$$

式 (2) を計算する方法として，Rational Krylov (RK) 法 [1] が提案されており，並列な実装も研究されている．しかし，Rational Krylov 法はシフトを選択する必要があり，最適なシフトを選択するのは困難である．これを改善するため，我々は Shift-invert Rational Krylov (SIRK) 法を提案している [3]．SIRK 法はシフト選択の必要がなく，計算も効率的である．SIRK 法は RK 法と同様並列化が可能な方法であるが，並列化により計算が不安定になりやすい．そこで，SIRK 法に適した計算が不安定になりにくい方法，Parallel Shift-invert Rational Krylov (PSIRK) 法を提案する．

Parallel Shift-invert Rational Krylov method for evolution equations
†Yuka Hashimoto–Graduate School of Science and Technology, Keio University
‡Takashi Nodera–Faculty of Science and Technology, Keio University

2 SIRK 法

m ステップの SIRK 過程により，次式が得られる．

$$\begin{aligned} V_m^*(\gamma_m I - A)^{-1}V_m &= H_m(T_m - H_m D_m + \gamma_m H_m)^{-1} \\ &=: H_m K_m^{-1} \end{aligned} \tag{3}$$

ただし，$\gamma_j = N - j\ (1 \le j \le m)$，$N$ は $N - m > 0$ を満たす自然数，H_m，$T_m \in \mathbb{R}^{m\times m}$ は上 Hessenberg 行列と三角行列，$D_m = \mathrm{diag}\{\gamma_1,\ \gamma_2 \ldots \gamma_m\} \in \mathbb{R}^{m\times m}$ である．T_m は任意に設定できる．また，$V_m \in \mathbb{R}^{n\times m}$ は，列ベクトルが次式で与えられる m 次元 Krylov 部分空間の正規直交基底から成る行列である．

$$\begin{aligned} Q_m(A,v) := \mathrm{span}\{v,\ &(\gamma_1 I - A)^{-1}V_m t_1,\ \ldots, \\ &(\gamma_m I - A)^{-1}V_m t_m\} \\ = \mathrm{span}\{v,\ &(I + (m-1)X_m)^{-1}X_m v,\ \ldots, \\ &(I + X_m)^{-1}X_m v,\ X_m v\} \end{aligned} \tag{4}$$

ここで，$X_j = ((N-j)I - A)^{-1}$．式 (3) を用いて次式のように近似する．

$$\phi_k(A)v \approx V_m f_m(K_m H_m^{-1})V_m^* v \tag{5}$$

ただし，$f_m(z) = \phi_k(\gamma_m - x)$．式 (3) の近似は，$\phi_k(A)$ を A の関数ではなく，$(\gamma_m I - A)^{-1}$ の関数とみなしたことによる近似である．

3 PSIRK 法

SIRK 法は式 (4) で表される Krylov 部分空間を生成する．よって，各 m 番目の基底を生成するために線形方程式 $(\gamma_m I - A)x = V_m t_m$ を解く必要がある．$t_m = e_1$ とすれば，この方程式を解くためには $m-1$ 番目までの情報を必要としない．この場合，理論的には全ての m に対して線形方程式 $(\gamma_m I - A)x = v_1$ を並列に解くことが可能である．実際には同時に実行可能なプロセス数 P が決まっており，これに合わせた t_m の選び方が必要である．また，SIRK 法の近似には H_m^{-1} が現れる．このため，H_m が悪条件になると近似の計算が不安定となる．よって，H_m の条件数をできるだけ抑えるように t_m を選ぶ必要がある．以下では m 番目の基底を生成する際の t_m の選び方について考える．$i+1$ 反復目にプロセス

番号 j $(1 \leq j \leq P)$ は，$(\gamma_{Pi+j}I - A)x = V_{Pi+1}t_{Pi+j}$ を解くことになる．ただし，$t_{Pi+j} \in \mathbb{R}^{Pi+1}$．$1 \leq j \leq P$ に対して上記の線形方程式の解が求まったら，これらの解を正規直交化し，$V_{P(i+1)+1}$ と $H_{P(i+1)}$ を構成する．次の補題が成立する．

補題 3.1 $A, B \in \mathbb{R}^{m \times m}$ に対して，$\kappa(AB) \leq \kappa(A)\kappa(B)$．ただし，$\kappa(A)$ は A の 2 ノルム条件数である．

補題 3.1 と式 (3) より，H_m の条件数に関して次式が成立する．ただし，$m = Pi + j$ である．

$$\kappa(H_m) \leq \kappa(V_m^*(\gamma_m I - A)^{-1}V_m)\kappa(K_m) \qquad (6)$$

行列 $V_m^*(\gamma_m I - A)^{-1}V_m$ は $m-1$ 番目までの基底の情報のみで決定する．$K_m e_m = t_m$ で，K_m の m 列目以外は $m-1$ 番目までの基底の情報のみで決定する．よって，H_m の条件数を抑えるために，K_m の条件数を抑えるような t_m を選ぶことを考える．次の命題が成立する．

命題 3.2 $A = [a_1 \dots a_m] \in \mathbb{R}^{m \times m}$ は正則であるとすると，$\sigma_{\min}(A) \leq \sigma_{\min}([a_1 \dots a_{m-1}])$．さらに，$a_m \perp \mathrm{Span}\{a_1, \dots, a_{m-1}\}$ かつ $\|a_m\|_2 = 1$ ならば，$\sigma_{\min}(A) = \min\{1, \sigma_{\min}([a_1 \dots a_{m-1}])\}$．

$m = Pi + j$ 番目の基底を生成する際には，H_{Pi} が既知であるため K_m の 1 から Pi 列目は既知である．K_m は Hessenberg であることと $K_m e_m = t_m$ に注意すると，命題 3.2 より，以下のように t_m を選べば K_{Pi+1} の最小特異値に関しては最善となることがわかる．$j \neq 1$ に対しても，K_m の m 列目を K_m のできるだけ多くの列と直交化させることで最小特異値ができるだけ減少しないようにする．

$$t_m = e_{Pi+1} - \tilde{k}_{Pi+1,Pi}\tilde{k}_{Pi}$$

ただし，$\tilde{k}_{Pi+1}$ は K_{Pi} の Pi 列目を正規化したベクトル，$\tilde{k}_{Pi+1,Pi}$ はその $Pi+1$ 番目の成分である．

4 数値実験

数値実験は，OS：Ubuntu14.04LTS，CPU：Intel(R) Xeon(R) X5690 3.47GHz，プログラム言語：C で行った．また，Open MPI により並列処理を実現した．

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

$$\begin{cases} \dfrac{\partial^2 u}{\partial t^2} - c^2 \Delta u = f(x,t) & \text{in } (0,T] \times \Omega, \\ u = g & \text{on } \{0\} \times \Omega, \\ u = 0 & \text{on } (0,T] \times \partial\Omega_1, \\ \dfrac{\partial u}{\partial n} = 0 & \text{on } (0,T] \times \partial\Omega_2, \end{cases} \qquad (7)$$

Algorithm 1 PSIRK 法

$\beta = \|v\|_2$, $v_1 = v/\beta$
for $i = 1, 2, \dots$ **do**
  for $j = 1, 2, \dots, P$ (in parallel) **do**
    $m = Pi + j$, $t_{Pi+1} = e_{Pi+1} - \tilde{k}_{Pi+1,Pi}\tilde{k}_{Pi}$
    Solve $(\gamma_m I - A)x = V_{Pi+1}t_m$, $v_{m+1} = x$
    for $k = 1, 2, \dots, Pi$ **do**
      $h_{k,m} = v_{m+1}^* v_k$, $v_{m+1} = v_{m+1} - h_{k,m}v_k$
    end for
    for $k = 1, 2, \dots, P$ **do**
      if $j = k$ **then**
        $h_{m+1,m} = \|v_{m+1}\|_2$, $v_{m+1} = x/h_{m+1,m}$
        Broadcast v_{m+1}, h_m, t_m
      else if $j > k$ **then**
        $h_{k,m} = v_{m+1}^* v_k$, $v_{m+1} = v_{m+1} - h_{k,m}v_k$
      end if
    end for
    $y_m = V_m \phi_k((H_m D_m - I)H_m^{-1})V_m^* v$
  end for
end for

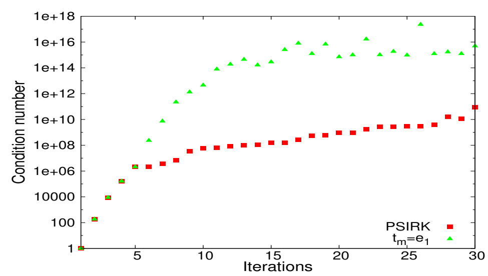

図 1: 反復回数 m と $\kappa(H_m)$ の関係 $(P = 5)$

ただし，$\partial\Omega_1 = [-1.5, 1.5] \times \{1, -1\}$，$\partial\Omega_2 = \partial\Omega \backslash \partial\Omega_1$，$f(x,t) = -10^4 \sin(t) e^{(x_1-0.8)^2+(x_2-0.8)^2}$，$g(x) = e^{-10(x_1-0.5)^2-10(x_2-0.5)^2}$，$c = \sqrt{0.1}$．この問題を有限要素法により $n = 20992$ の行列に離散化し，Exponential Integrator に現れる行列 ϕ_1 関数とベクトルの積を計算した．PSIRK 法と $t_m = e_1$ と選んだ SIRK 法で計算した際の，反復回数と H_m の 2 ノルム条件数の関係を図 1 に示す．PSIRK 法が H_m の条件数をうまく抑えながら計算を進めていることがわかる．計算時間は，$P = 5$ の際に $P = 1$ の際の 2.5 倍以上のスピードを達成した．

5 結 論

PSIRK 法は行列の条件数を抑えながら計算を進めるため，安定な並列計算を実現する．

参考文献

[1] Güttel, S., *"Rational Krylov methods for operator functions,"* Technischen Universität Bergakademie Freiberg, 2010, Ph.D. thesis.

[2] Hashimoto, Y. and Nodera, T., *"Inexact shift-invert Arnoldi method for evolution equations,"* ANZIAM Journal, 58(E): E1–E27, 2016.

[3] Hashimoto, Y. and Nodera, T., *"Shift-invert Rational Krylov method for evolution equations,"* ANZIAM Journal, to submitted.