一般化シフト線型方程式に対するMINRES法の適用と性能評価

日高 俊太郎*，工藤 周平*，山本 有作*

* 電気通信大学 情報理工学研究科 情報・ネットワーク工学専攻

研究目的

一般化シフト線型方程式

$$(A+\sigma_k B)\mathbf{x}^{(k)}=\mathbf{b}, \qquad (k=1,\dots,M).$$

に対する shifted MINRES法[1]の拡張およびその性能評価を行う．

行列A, Bはともに実対称・エルミート行列で σ_kは複素数であるとする．

シフト線形方程式

- (標準)シフト線形方程式

$$(A+\sigma_k I)\mathbf{x}^{(k)}=\mathbf{b}, \qquad (k=1,\dots,M). \tag{1}$$

  Krylov部分空間のシフト不変性$\mathcal{K}(A+\sigma_k I,\mathbf{b})=\mathcal{K}(A,\mathbf{b})$を持つ
  - ▶ 利用した効率的な解法が存在(e.g. shifted MINRES法)
- 一般化シフト線形方程式

$$(A+\sigma_k B)\mathbf{x}^{(k)}=\mathbf{b}, \qquad (k=1,\dots,M). \tag{2}$$

  一般化固有値問題に対するSakurai-Sugiura法で現れる

  Krylov部分空間のシフト不変性$\mathcal{K}(A+\sigma_k B,\mathbf{b})=\mathcal{K}(A,\mathbf{b})$を持たない

shifted MINRES法

1. Aに対するLanczos過程でKrylov部分空間$\mathcal{K}_n(A,\mathbf{b})$の正規直交基底を構成

$$AV_n=V_{n+1}\widehat{T}_n,\ V_n=[\mathbf{v}_1\ \cdots\ \mathbf{v}_n],\ \widehat{T}_n=\begin{bmatrix}\alpha_1 & \beta_1 & & \\ \beta_1 & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & \beta_{n-1} \\ & & \ddots & \alpha_n \\ & & & \beta_n\end{bmatrix}$$ ：三重対角行列

   $AV_n=V_{n+1}\widehat{T}_n$は$A$のLanczos分解という
   - ▶ シフト不変性により$\mathcal{K}_n(A+\sigma_k I,\mathbf{b})$の正規直交基底でもある
2. $\widehat{T}_n^{(k)}=\widehat{T}_n+\sigma_k\begin{bmatrix} I \\ \mathbf{0}^{\mathrm{T}}\end{bmatrix}$とおく
   - ▶ $(A+\sigma_k I)V_n=V_{n+1}\widehat{T}_n^{(k)}$が成り立つ
3. $\widehat{T}_n^{(k)}$のQR分解を計算する（$T_n^{(k)}=Q_nR_n$）
4. $\mathbf{y}_n^{(k)}=\|\mathbf{b}\|_2R_n^{-1}Q_n^{\mathrm{H}}\mathbf{e}_1$を求める

$$\begin{aligned}\|\mathbf{r}_n^{(k)}\|_2=\|\mathbf{b}-(A+\sigma_k I)\mathbf{x}_n\|_2&=\left\|V_{n+1}\left(\|\mathbf{b}\|_2\mathbf{e}_1-\widehat{T}_n^{(k)}\mathbf{y}_n^{(k)}\right)\right\|_2\\ &=\left\|\|\mathbf{b}\|_2\mathbf{e}_1-\widehat{T}_n^{(k)}\mathbf{y}_n^{(k)}\right\|_2\end{aligned} \tag{3}$$

5. 最小残差解 $\mathbf{x}_n^{(k)}=V_n\mathbf{y}_n^{(k)}$を求める

- 残差の単調減少性と無破綻性を持つ
- 漸化式で計算することで効率的に計算できる

一般化Lanczos過程

一般化シフト線形方程式に対するMINRES法の拡張を考える

- ▶ MINRES法の本質はLanczos分解による三重対角化
- ▶ Lanczos過程の一般化シフト線形方程式に適した拡張を

行列Bが正定値としてCholesky分解$B=LL^{\mathrm{H}}$をおこなう

- ▶ 標準シフト線形方程式 $(L^{-1}AL^{-\mathrm{H}}+\sigma_k I)\mathbf{x}'^{(k)}=L^{-1}\mathbf{b}$ が導かれる
- ▶ $L^{-1}AL^{-\mathrm{H}}$に対するLanczos過程から$L^{-1}AL^{-\mathrm{H}}V_n=V_{n+1}\widehat{T}_n$
- ▶ $W_n=L^{-\mathrm{H}}V_n$とおくと$AW_n=BW_{n+1}\widehat{T}_n$
- ▶ $(A+\sigma_k B)W_n=BW_{n+1}(\widehat{T}_n+\sigma_k[I\ \ \mathbf{0}]^{\mathrm{T}})$ が成り立つ

このような $W_n,\ \widehat{T}_n$ を構成する一般化Lanczos過程は次のようになる

Algorithm 1 Generalized Lanczos process (B–Lanczos process)

```
β_0 = 0,  w_1 = B^{-1} b / ||b||_{B^{-1}}
for i = 1 to n do
    α_i = ⟨w_i, A w_i⟩
    w' = A w_i − α_i B w_i − β_{i−1} B w_{i−1}
    β_i = ||w'||_{B^{-1}}
    w_{i+1} = B^{-1} w' / β_i
end for
```

得られる $\{\mathbf{w}_1,\mathbf{w}_2,\dots,\mathbf{w}_n\}$ は行列Bについて直交する

$$\langle\mathbf{w}_i,\mathbf{w}_j\rangle_B=\mathbf{w}_i^{\mathrm{H}}B\mathbf{w}_j=\mathbf{v}_i^{\mathrm{H}}L^{-1}LL^{\mathrm{H}}L^{-\mathrm{H}}\mathbf{v}_j=\mathbf{v}_i^{\mathrm{H}}\mathbf{v}_j=\delta_{i,j} \tag{4}$$

- ▶ 拡張Lanczos過程はB–内積についての正規直交基底を生成している

Generalized shifted MINRES法

第n反復での残差のB^{-1}–ノルムは式(6)となる

$$\begin{aligned}\|\mathbf{r}_j^{(k)}\|_{B^{-1}}=\|\mathbf{b}-(A+\sigma_k B)\mathbf{x}_j\|_{B^{-1}}&=\|\mathbf{b}-(A+\sigma B)W_j\mathbf{z}_j\|_{B^{-1}}\\ &=\left\|\|\mathbf{b}\|_{B^{-1}}\mathbf{e}_1-\hat{T}_j^{(k)}\mathbf{z}_j\right\|_2\end{aligned} \tag{5}$$

$$\Rightarrow\ \ \mathbf{x}_n^{(k)}=\|\mathbf{b}\|_{B^{-1}}W_jR_j^{-1}Q_j^{\mathrm{H}}\mathbf{e}_1 \tag{6}$$

これは式(3)とノルム$\|\mathbf{b}\|_2$および基底V_jを除いて一致した形をしている

- ▶ 同様の漸化式が導かれる（Lanczos過程を一般化Lanczos過程に置き換える）
- ▶ 残差のB^{-1}–ノルムの単調減少性と無破綻性を持つ

数値実験

aaaaaaaaaaaaaaa bbbbbbbbbbbbbbb ccccccccccccccc ddddddddddddddd eeeeeeeeeeeeeee

実験結果

aaaaaaaaaaaaaaa bbbbbbbbbbbbbbb ccccccccccccccc ddddddddddddddd eeeeeeeeeeeeeee

まとめと今後の展望

aaaaaaaaaaaaaaa bbbbbbbbbbbbbbb ccccccccccccccc ddddddddddddddd eeeeeeeeeeeeeee

参考文献

[1] S. Hiroaki, T. Hoshi, and Y. Yamamoto, On using the shifted minimal residual method for quantum-mechanical wave packet simulation, JSIAM Let., **11** (2019), 13–16.

[2] S. Tomohiro, T. Hoshi, S. -L. Zhang, and T. Fujiwara, A fast numerical method for generalized shifted linear systems with complex symmetric matrices, 数理解析研究所講究録., **1719** (2010), 106–117.