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*

国立大学法人 電気通信大学 The University of Electro-Communications

* 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

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

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

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

  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，shifted COCG法)
- 一般化シフト線形方程式

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

  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

  既存手法としてGeneralized shifted COCG法（$A+\sigma_k B$が複素対称）[2]

shifted MINRES法(標準シフト線形方程式)

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

$$AV_n=V_{n+1}\widehat{T}_n,\ V_n=[\mathbf{v}_1\ \cdots\ \mathbf{v}_n],\ \widehat{T}_n=\begin{bmatrix}\alpha_1 & \beta_1 & & \\ \beta_1 & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & \beta_{n-1} \\ & & \beta_{n-1} & \alpha_n \\ & & & \beta_n\end{bmatrix}:\text{三重対角行列} \tag{3}$$

   ▶ 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. $k=1,2,\ldots,M$

   2.1 $\widehat{T}_n^{(k)}=\widehat{T}_n+\sigma_k\begin{bmatrix}I\\ \mathbf{0}^{\mathrm{T}}\end{bmatrix}$とおく（$(A+\sigma_k I)V_n=V_{n+1}\widehat{T}_n^{(k)}$が成り立つ）

   2.2 $\widehat{T}_n^{(k)}$のQR分解を計算する（$T_n^{(k)}=Q_nR_n$）

   2.3 $\mathbf{y}_n^{(k)}=\|\mathbf{b}\|_2R_n^{-1}Q_n^{\mathrm{H}}\mathbf{e}_1$を求める

$$\|\mathbf{r}_n^{(k)}\|_2=\|\mathbf{b}-(A+\sigma_k I)\mathbf{x}_n\|_2=\left\|V_{n+1}\left(\|\mathbf{b}\|_2\mathbf{e}_1-\widehat{T}_n^{(k)}\mathbf{y}_n^{(k)}\right)\right\|_2 =\left\|\|\mathbf{b}\|_2\mathbf{e}_1-\widehat{T}_n^{(k)}\mathbf{y}_n^{(k)}\right\|_2 \tag{4}$$

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

- 残差の2–ノルム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過程による三重対角化
  - ▶ Lanczos過程の一般化シフト線形方程式に適した拡張をおこなう
- 行列Bが正定値としてCholesky分解$B=LL^{\mathrm{H}}$が可能であるとする
  - ▶ 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)

1: $\beta_0=0,\ \mathbf{w}_1=B^{-1}\mathbf{b}/\|\mathbf{b}\|_{B^{-1}}$
2: **for** $i=1$ to n **do**
3: $\quad\alpha_i=\langle\mathbf{w}_i,A\mathbf{w}_i\rangle$
4: $\quad\mathbf{w}'=A\mathbf{w}_i-\alpha_iB\mathbf{w}_i-\beta_{i-1}B\mathbf{w}_{i-1}$
5: $\quad\beta_i=\|\mathbf{w}'\|_{B^{-1}}=\sqrt{\mathbf{w}'^{\mathrm{H}}B^{-1}\mathbf{w}'}$ （線形方程式の求解）
6: $\quad\mathbf{w}_{i+1}=B^{-1}\mathbf{w}'/\beta_i$
7: **end for**

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

$$\langle\mathbf{w}_i,\mathbf{w}_j\rangle_B=\mathbf{w}_i^{\mathrm{H}}B\mathbf{w}_j=\mathbf{v}_i^{\mathrm{H}}L^{-1}LL^{\mathrm{H}}L^{-\mathrm{H}}\mathbf{v}_j=\mathbf{v}_i^{\mathrm{H}}\mathbf{v}_j=\delta_{i,j} \tag{5}$$

  - ▶ 一般化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
  - ▶ 内部反復として1回の線形方程式の求解が必要

Generalized shifted MINRES法(一般化シフト線形方程式)

第n反復での残差のB^{-1}–ノルムおよびその最小残差解は式(7)となる

$$\|\mathbf{r}_j^{(k)}\|_{B^{-1}}=\|\mathbf{b}-(A+\sigma_k B)\mathbf{x}_j\|_{B^{-1}}=\|\mathbf{b}-(A+\sigma B)W_j\mathbf{z}_j\|_{B^{-1}} =\left\|\|\mathbf{b}\|_{B^{-1}}\mathbf{e}_1-\hat{T}_j^{(k)}\mathbf{z}_j\right\|_2 \tag{6}$$

$$\Rightarrow\ \mathbf{x}_n^{(k)}=\|\mathbf{b}\|_{B^{-1}}W_jR_j^{-1}Q_j^{\mathrm{H}}\mathbf{e}_1 \tag{7}$$

式(6)は式(4)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

- 使用する行列[3]
  1. VCNT90000：90000次実対称行列，$\sigma_k=0.01\exp\left(\frac{2\pi\mathrm{i}}{50}(k-0.5)\right)$，$(M=50)$
  2. VCNT10800h：10800次エルミート行列，$\sigma_k=(0.4+\frac{k-1}{1000})+0.001\mathrm{i}$，$(M=1001)$
- 計算環境

  富岳 A64FX, 48 cores, 2.0 GHz 1node, Fujitsu C Compiler
- 実験内容
  1. Generalized shifted COCG法との比較（アルゴリズム上での相対残差と真の相対残差$\frac{\|\mathbf{b}-(A+\sigma_k B)\mathbf{x}_n^{(k)}\|_2}{\|\mathbf{b}\|_2}$，実行時間と収束までの反復回数）
  2. 内部反復の精度と外部反復の反復回数・真の相対残差の関係の調査

  アルゴリズム上での相対残差のノルムが 10^{-12} 以下になるまで反復

実験結果

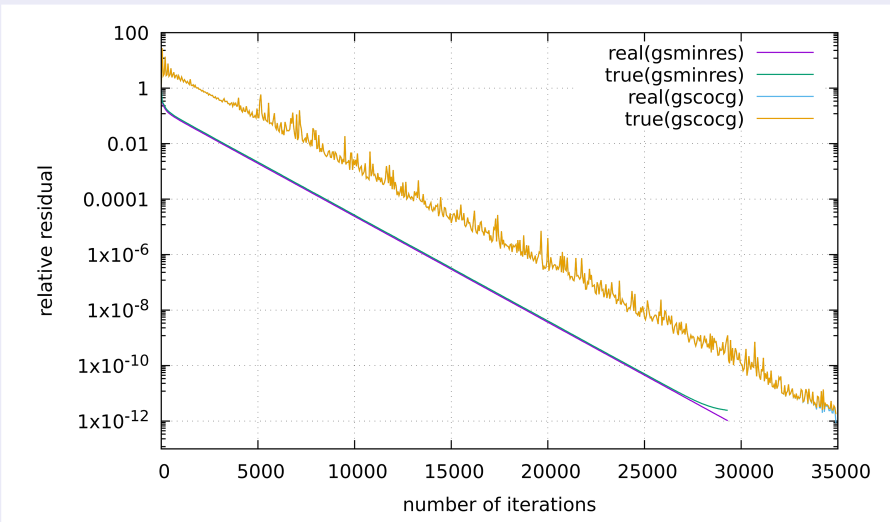

図 1: $k=1$における相対残差の比較

表 1: 実行時間と反復回数の比較

	実行時間(秒)	反復回数
gsminres	11874	29342
gscocg	14457	34815

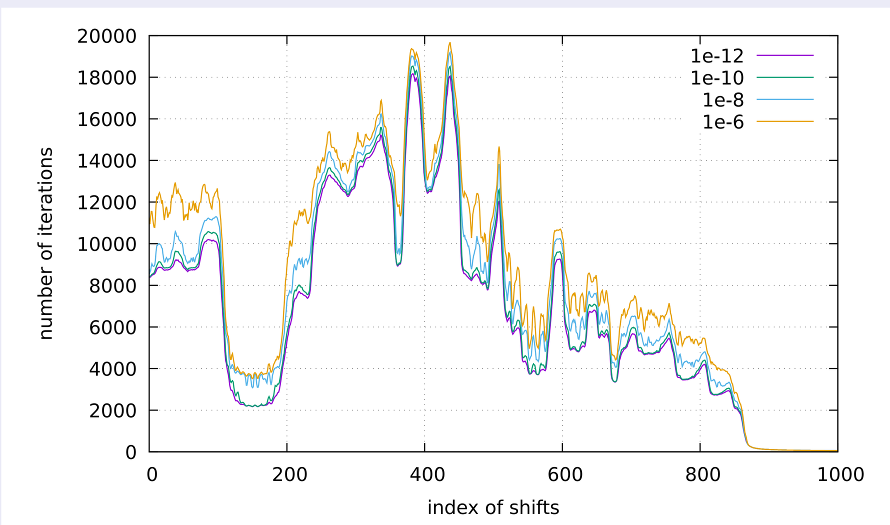

図 2: 内部反復の精度と反復回数の比較

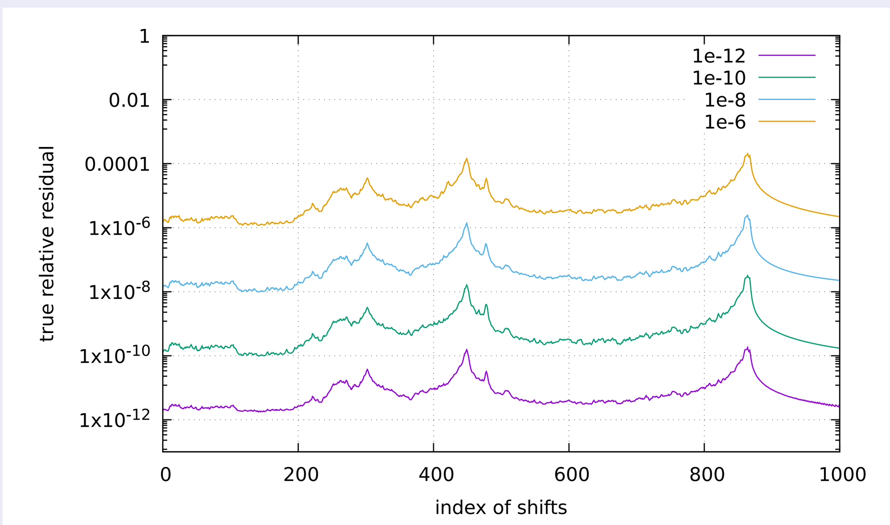

図 3: 内部反復の精度と真の相対残差の関係

- gsminresは滑らかに残差のノルムが減少している
  - ▶ 残差のノルムを最小化しているから
- gsminresはアルゴリズム上での残差(real)と真の残差(true)で乖離がある
  - ▶ 2–ノルムではなくB^{-1}–ノルムの最小化であるから
- gsminresがgscocgよりも少ない反復回数で収束し，高速である
- 外部反復の精度は内部反復の精度程度しかでない

まとめと今後の展望

- 一般化シフト線形方程式に対するGeneralized shifted MINRES法を構築した
  - ▶ 一般化Lanczos過程に基づき，残差のB^{-1}–ノルムを最小化する
  - ▶ A,Bがエルミート行列（Bは正定値）である場合にも適用可能である
- 更なる数値実験による優位性の検証
- 理論的な収束特性の評価をおこなう

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.

[3] T. Hoshi, ELSES matrix library, 2019, http://www.elses.jp/matrix/. (accessed 13 Aug. 2024)