虚数シフトを行った実対称行列のための一般化MINRES法

1631073 清藤 博暉
山本 有作研究室

研究目的

時間依存型シュレディンガー方程式の求解

$$\begin{cases} \dfrac{\partial\psi}{\partial t} = iH\psi \\ H \equiv -\dfrac{h^2}{2m}\nabla^2 + V(\boldsymbol{r}) \end{cases}$$

本研究では時間発展の際に出現する連立一次方程式の解法について、従来解法に代わる新たな手法を提案する

時間依存シュレディンガー方程式の解法

・空間離散化

$$\frac{dx}{dt} = iH\boldsymbol{x} \quad (H \in \mathbb{R}^{n\times n}: \text{ハミルトニアン行列}, \boldsymbol{x} \in \mathbb{C}^n)$$

解析解

$$\boldsymbol{x}(t+\Delta t) = \exp(iH\Delta t)\,\boldsymbol{x}(t)$$

・時間離散化

クランク・ニコルソン法

$$\boxed{\begin{aligned} \frac{\boldsymbol{x}(t+\Delta t) - \boldsymbol{x}(t)}{\Delta t} &= \frac{1}{2}\{iH\boldsymbol{x}(t) + iH\boldsymbol{x}(t+\Delta t)\} \\ \boldsymbol{x}(t+\Delta t) &= \left(I - \frac{1}{2}iH\Delta t\right)^{-1}\left(I - \frac{1}{2}iH\Delta t\right)\boldsymbol{x}(t) \end{aligned}}$$

クランク・ニコルソン法を用いる理由

⇒波動関数のノルムを厳密に保存

⇒時間に対して2次精度

時間発展に現れる連立一次方程式の構造

・上式を変形

$$\underline{\left(I - \frac{1}{2}iH\Delta t\right)}\boldsymbol{x}(t+\Delta t) = \left(\mathrm{I} + \frac{1}{2}\mathrm{i}H\Delta t\right)\boldsymbol{x}(t)$$

・係数行列(赤線部)について

⇒疎行列かつ非エルミート

⇒i倍すると$A + \sigma I$(A:エルミート行列,σ:複素数のシフト)の形

・ここで解くべき方程式は$(A + \sigma I)\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$の形になり、この方程式をシフト線形方程式と呼ぶ

シフト線形方程式の数値解法

・シフト線形方程式に対する従来解法

- GMRES法[1]
  非エルミート行列として扱い計算
- COCG(Conjugate Orthogonal CG)法[2]
  シフト線形方程式の構造を利用して計算

	計算量	残差
GMRES法	多い	単調減少する
COCG法	少ない	単調減少しない

・これら2手法の利点を併せ持つ手法 : シフト付きMINRES法

⇒COCG法と同程度の計算量であり、且つ残差が単調減少

・クリロフ部分空間のシフト不変性を利用

シフト付きMINRES法のアルゴリズム

1. Lanczos法によりクリロフ部分空間$K_k(A;\boldsymbol{b})$の正規直交基底を作る

$$AQ_k = Q_{k+1}T_k^+, Q_k = [\boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_2, \ldots \boldsymbol{q}_k], T_k^+ = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & \\ \beta_1 & \ddots & \\ & & \alpha_k \\ & & \beta_k \end{bmatrix}$$

⇒$K_k(A;\boldsymbol{b})$は$A + \sigma I$に対するクリロフ部分空間$K_k(A + \sigma I;\boldsymbol{b})$でもある

⇒Aはエルミート行列なので計算量が少ない

2. $\bar{T}_k^+ = T_k^+ + \sigma\begin{bmatrix} I_k \\ 0 \end{bmatrix}$とおく
3. $\bar{T}_k^+$のQR分解を求める
4. $\boldsymbol{y}_k = \|\boldsymbol{b}\|R_k^{-1}U_k^H\boldsymbol{e}_1$より$\boldsymbol{y}_k$を求める
5. $\boldsymbol{x}_k = Q_k\boldsymbol{y}_k$より$\boldsymbol{x}_k$を求める

(2.–5.) $K_k(A + \sigma I;\boldsymbol{b})$中での最小残差解の導出

漸化式による計算

・Lanczos法をそのまま用いた実装の問題点

⇒ k本のn次元ベクトルを保持する必要がある

・漸化式でkステップ目の近似解$\boldsymbol{x}_k$を計算

・$\boldsymbol{x}_k = Q_k y_k \Rightarrow \boldsymbol{x}_k = \|\boldsymbol{b}\|Q_k R_k^{-1}U_k\boldsymbol{e}_1$から

$$\begin{aligned} \boldsymbol{x}_k &= \|\boldsymbol{b}\|Q_k R_k^{-1}U_k\boldsymbol{e}_1 \\ &= \|\boldsymbol{b}\|[Q_{k-1}^{-1}R_{k-1}^{-1}(\boldsymbol{q}_k - r_{k-2,k}\boldsymbol{p}_{k-2} + r_{k-1,k}\boldsymbol{p}_{k-1})/r_{kk}]\begin{bmatrix} U_{k-1}^H\boldsymbol{e}_1 \\ c_k f_k^{k-1} \end{bmatrix} \\ &= \|\boldsymbol{b}\|Q_{k-1}R_{k-1}^{-1}U_{k-1}^H\boldsymbol{e}_1 + \frac{\|\boldsymbol{b}\|c_k f_k^{(k-1)}}{r_{kk}}(\boldsymbol{q}_k - r_{k-2,k}\boldsymbol{p}_{k-2} + r_{k-1,k}\boldsymbol{p}_{k-1}) \\ &= \boldsymbol{x}_{k-1} + \frac{\|\boldsymbol{b}\|c_k f_k^{(k-1)}}{r_{kk}}\boldsymbol{p}_k \qquad (\boldsymbol{p}_k = \boldsymbol{q}_k - r_{k-2,k}\boldsymbol{p}_{k-2} + r_{k-1,k}\boldsymbol{p}_{k-1}) \end{aligned}$$

・この漸化式は直近の基底ベクトルと補助ベクトルを保持するだけで計算が可能

数値実験

・与えた行列

1. A: 300×300ランダム実対称行列 , σ: $0.5 + i$
2. A: 1次元の量子系(導電性高分子) , σ: 任意
   行列のサイズ N: 3594,7194

・用いた計算機

– Intel Xeon Processor E5-2660 v2 (25M Cache, 2.20 GHz)

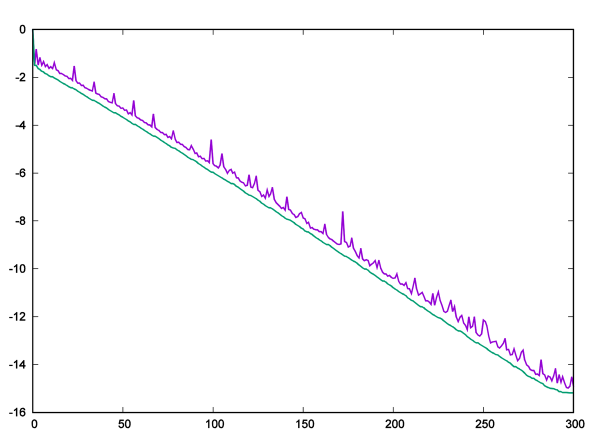
・実験内容

– 相対残差$\log_{10}\left(\frac{\|A\boldsymbol{x}_k - \boldsymbol{b}\|}{\|\boldsymbol{b}\|}\right)$の値を観察しCOCG法と比較

– 前ステップとの残差の差が10^{-8}程度になるまで反復

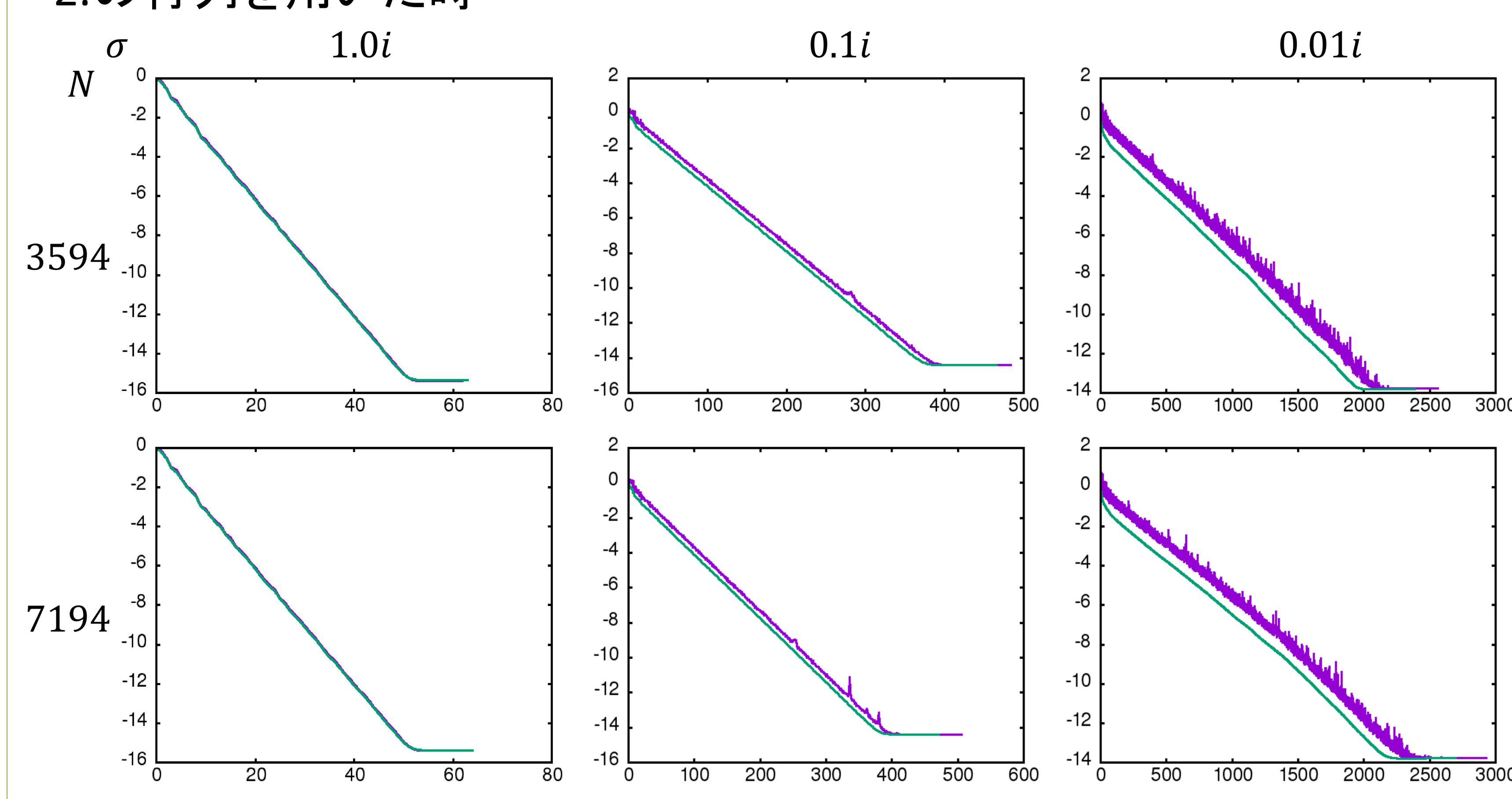
相対残差のプロット

・1.の行列を用いた時



COCG
シフト付きMINRES法
300ステップ時点での収束値
COCG法 : $10^{-14.93}$
シフト付きMINRES法 : $10^{-15.18}$

・2.の行列を用いた時



・COCG法で残差の振動が見られた条件においても、シフト付きMINRES法では残差が単調減少している

今後の展望

・行列をCRS形式で格納し、更に大規模な問題に対応する
・シフト付きMINRES法の最適化を行い、計算時間の測定を行う

References

[1]Y. Saad and M. H. Schultz: , "GMRES: A generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems", SIAM J. Sci. Stat.Comput., Vol. 7, pp. 856--869 (1986).
[2]H. A. Van der Vorst and J. B. M. Melissen: "A Petrov-Galerkin type method for solving Axk=b, where A is symmetric complex", IEEE Transactions on Magnetics, Vol. 26, No. 2, pp. 706--708 (1990).