

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 情報理工学研究所 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

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

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

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

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

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

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)

- 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

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

- ▶ 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

- $k = 1, 2, \dots, M$

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

$$2.2 \quad \hat{T}_n^{(k)} \text{ の QR 分解を計算する } (T_n^{(k)} = Q_n R_n)$$

$$2.3 \quad \mathbf{y}_n^{(k)} = \|\mathbf{b}\|_2 R_n^{-1} Q_n^H \mathbf{e}_1 \text{ を求める}$$

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

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

- 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おこなう

- 行列 B が**正定値**として Cholesky 分解 $B = LL^H$ が可能であるとする

- ▶ 標準シフト線形方程式 $(L^{-1}AL^{-H} + \sigma_k I)\mathbf{x}^{(k)} = L^{-1}\mathbf{b}$ が導かれる

- ▶ $L^{-1}AL^{-H}$ に対する Lanczos 過程から $L^{-1}AL^{-H}V_n = V_{n+1}\hat{T}_n$

- ▶ $W_n = L^{-H}V_n$ とおくと $AW_n = BW_{n+1}\hat{T}_n$

- ▶ $(A + \sigma_k B)W_n = BW_{n+1}(\hat{T}_n + \sigma_k [I \quad \mathbf{0}]^T)$ が成り立つ

このような W_n, \hat{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)

$$1: \beta_0 = 0, \quad \mathbf{w}_1 = B^{-1}\mathbf{b}/\|\mathbf{b}\|_{B^{-1}}$$

$$2: \text{for } i = 1 \text{ to } n \text{ do}$$

$$3: \quad \alpha_i = \langle \mathbf{w}_i, A\mathbf{w}_i \rangle$$

$$4: \quad \mathbf{w}' = A\mathbf{w}_i - \alpha_i B\mathbf{w}_i - \beta_{i-1} B\mathbf{w}_{i-1}$$

$$5: \quad \beta_i = \|\mathbf{w}'\|_{B^{-1}} = \sqrt{\mathbf{w}'^H B^{-1} \mathbf{w}'} \quad (\text{線形方程式の求解})$$

$$6: \quad \mathbf{w}_{i+1} = B^{-1}\mathbf{w}'/\beta_i$$

$$7: \text{end for}$$

- 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

$$\langle \mathbf{w}_i, \mathbf{w}_j \rangle_B = \mathbf{w}_i^H B \mathbf{w}_j = \mathbf{v}_i^H L^{-1} L L^H L^{-H} \mathbf{v}_j = \mathbf{v}_i^H \mathbf{v}_j = \delta_{i,j} \quad (4)$$

- ▶ 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

- ▶ 内部反復として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(5), (6)となる

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

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

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

- 使用する行列[3]

- VCNT90000: 90000 次実対称行列, $\sigma_k = 0.01 \exp\left(\frac{2\pi i}{50}(k - 0.5)\right)$, ($M = 50$)
- VCNT10800h: 10800 次エルミート行列, $\sigma_k = (0.4 + \frac{k-1}{1000}i) + 0.01i$, ($M = 1001$)

- 計算環境

富岳 A64FX, 48 cores, 2.0 GHz 1node, Fujitsu C Compiler

- 実験内容

- 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)
- 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^{-13} 以下になるまで反復

実験結果

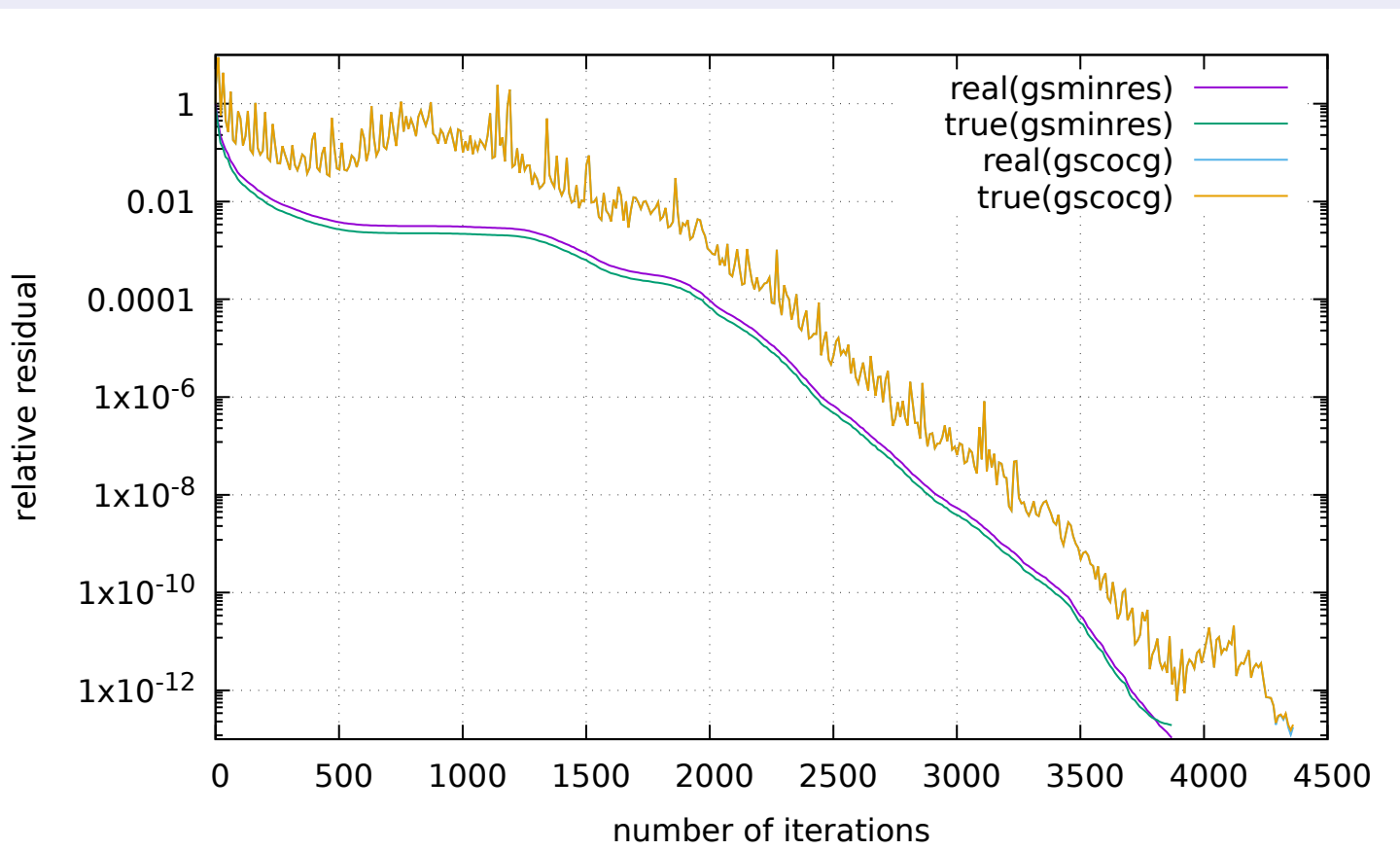


図 1: $k = 1$ における相対残差の比較

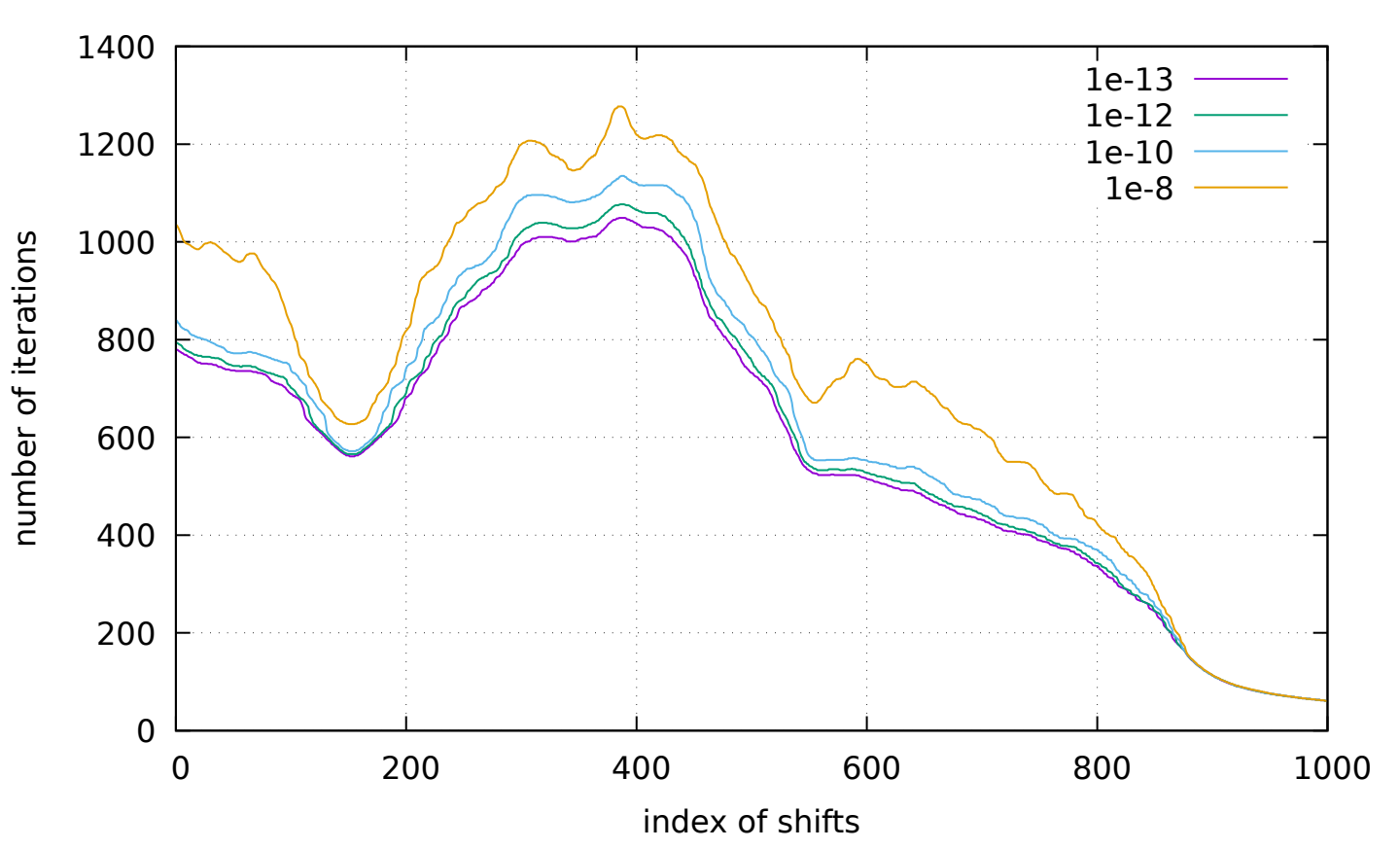


図 2: 内部反復の精度と反復回数の比較

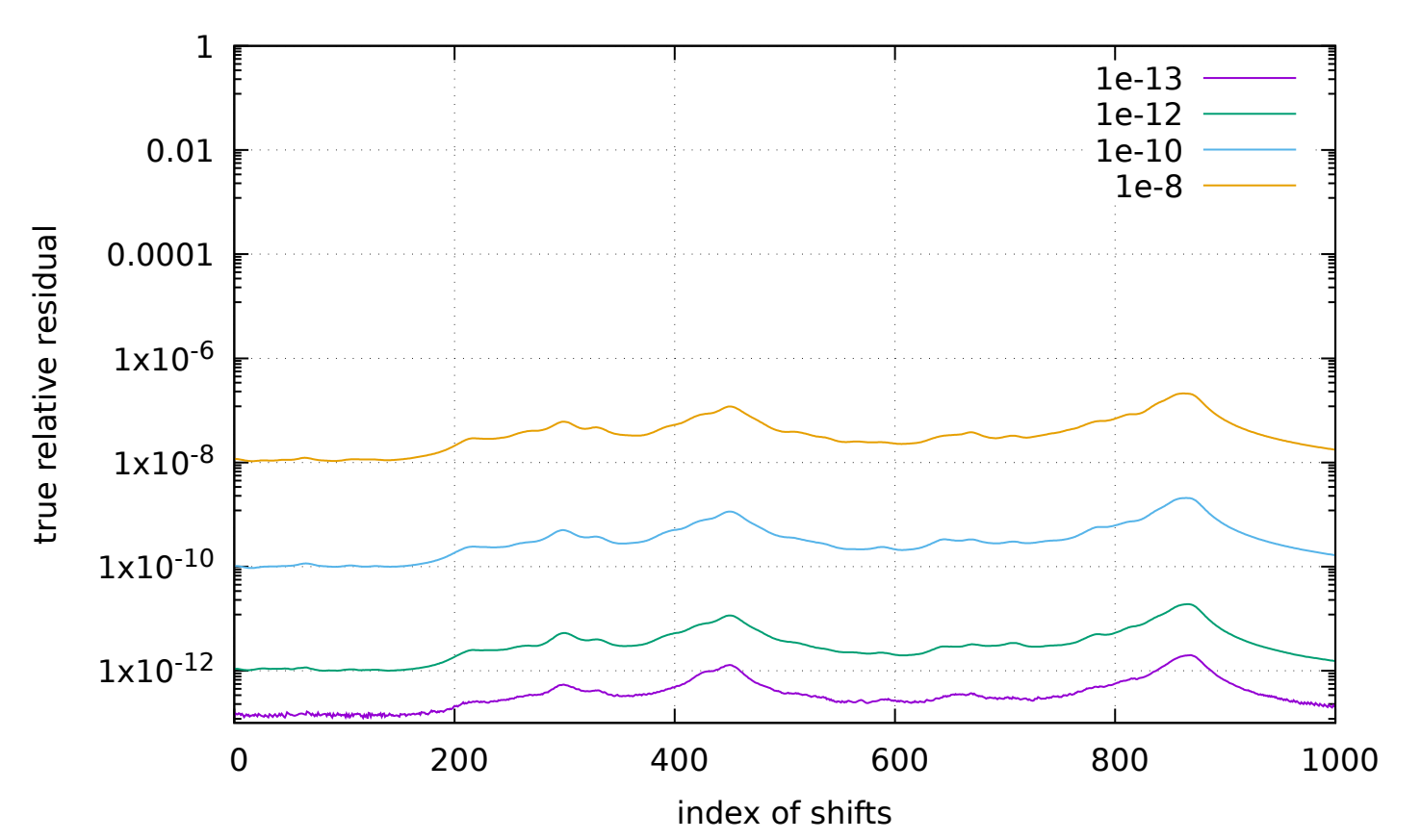


図 3: 内部反復の精度の相対残差の関係

- gsmminres は滑らかに残差が減少している

- ▶ 残差のノルムを最小化しているから

- gsmminres 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

- gsmminres が gscocg よりも少ない反復回数で収束し, 高速

- 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, ELSSES matrix library, 2019, <http://www.elses.jp/matrix/>. (accessed 13 Aug. 2024)