# 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

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


## 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 $\sigma_k$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
4. 最小残差解 $\mathbf{x}_n^{(k)} = \|\mathbf{b}\| V_n R_n^{-1} Q_n^{\mathrm{H}} \mathbf{e}_1$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

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)

```
1: β_0 = 0, w_1 = B^{-1} b / ||b||_{B^{-1}}
2: for i = 1 to n do
3:     α_i = <w_i, A w_i>
4:     w' = A w_i − α_i B w_i − β_{i−1} B w_{i−1}
5:     β_i = ||w'||_{B^{-1}}
6:     w_{i+1} = B^{-1} w' / β_i
7: 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

$$\langle \mathbf{w}_i, \mathbf{w}_j \rangle_B = \mathbf{w}_i^{\mathrm{H}} B \mathbf{w}_j = \mathbf{v}_i^{\mathrm{H}} L^{-1} LL^{\mathrm{H}} L^{-\mathrm{H}} \mathbf{v}_j = \mathbf{v}_i^{\mathrm{H}} \mathbf{v}_j = \delta_{i,j} \tag{3}$$

▶ 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

aaaaaaaaaaaaaaa bbbbbbbbbbbbbbb ccccccccccccccc ddddddddddddddd eeeeeeeeeeeeeee

## 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 et.al., 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.