

# 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  $\sigma_k$  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

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

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

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

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

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

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

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

2.4 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  $AW_n = BW_{n+1}\hat{T}_n$

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

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

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

- ▶ 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  $10^{-12}$  以下になるまで反復

## 実験結果

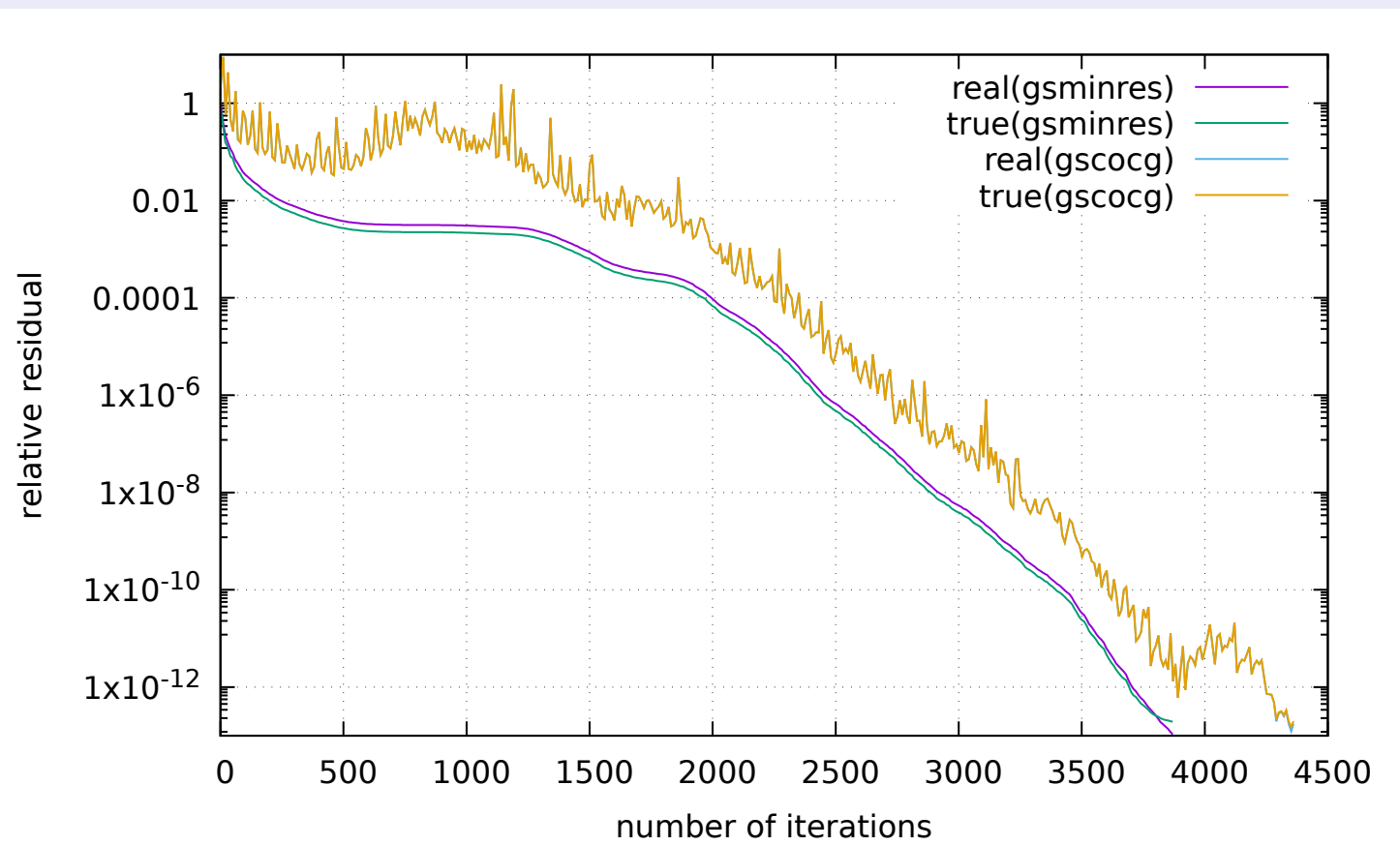


図 1:  $k = 1$  における相対残差の比較



図 2: 内部反復の精度と反復回数の比較

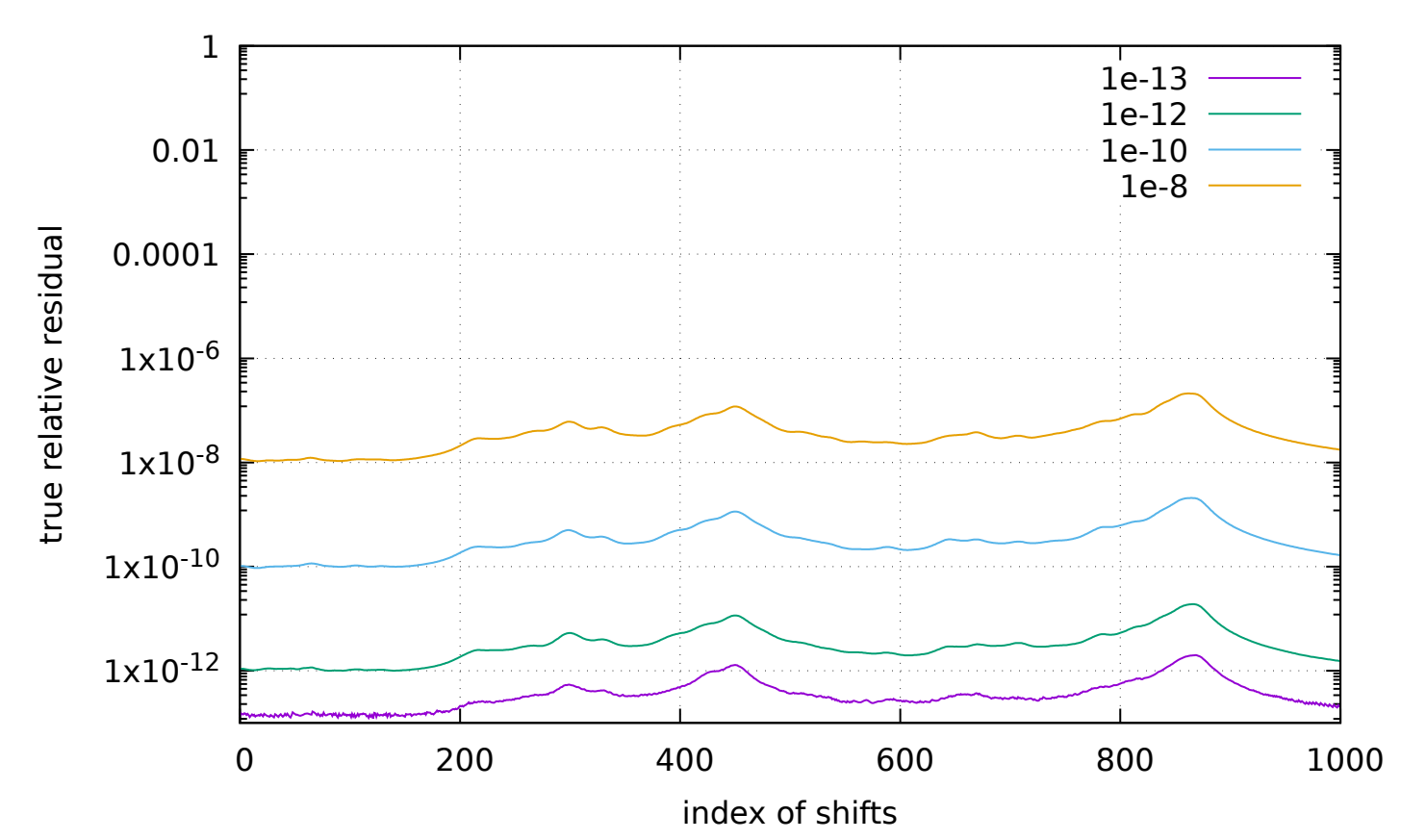


図 3: 内部反復の精度の相対残差の関係

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