

# 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\*

\* 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

本研究では、標準シフト線型方程式

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

に対する解法である shifted MINRES法[1]の効率的な計算モデルの検討を行う。  
行列  $A$  は**実対称・エルミート**行列で  $\sigma_k$  は**複素数**,  $I$  は**単位行列**であるとする。

## 研究背景

標準シフト線型方程式 (1) は、量子力学や電子構造計算などに現れる．特に近年では、行列関数の計算における部分問題としても重要性が増している．  
こうした問題では、 **$10^7 \sim 10^8$ 次元を超える超大規模行列**が登場することもあり、従来の逐次的な解法では対応が困難である．  
このような制約下では、次のような特性を持つアルゴリズムが求められる：

- Matrix-free（行列全体を保持しない）
- 複数シフトに対する同時解法
- 並列計算への適用可能性

このような要請に応える手法として、Krylov部分空間法が注目されている．

## shifted MINRES法

MINRES法は、実対称またはエルミートな係数行列に対して有効な Krylov 部分空間法であり、**Lanczos過程**に基づいて最小残差解を反復的に求める．  
これをシフト線形方程式に拡張したのが shifted MINRES 法である．  
アルゴリズムの概要：

- $A$ に対して Lanczos過程を実行し、正規直交基底を構成

$$AV_n = V_{n+1}\hat{T}_n, \quad V_n = [\mathbf{v}_1 \ \cdots \ \mathbf{v}_n], \quad T_n = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & & & \\ \beta_1 & \ddots & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \beta_{n-1} & \\ & & \beta_{n-1} & \alpha_n & \end{bmatrix}, \quad \hat{T}_n = \begin{bmatrix} T_n \\ \beta_n \mathbf{e}_n^T \end{bmatrix} \quad (2)$$

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

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

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

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

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

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

特徴：

- 1回**のLanczos過程で **$M$ 個**の方程式に必要な基底が得られる
- 残差のノルムの単調減少性**と**無破綻性**を持つ
- シフトごとに**独立に**最小残差解が求められる

### Algorithm 1 shifted MINRES method

```
1:  $\mathbf{x}_0^{(\sigma)} = \mathbf{0}$ ,  $\mathbf{r}_0 = \mathbf{b} - A\mathbf{x}_0$ 
2:  $\beta_0 = 0$ ,  $\mathbf{v}_0 = \mathbf{0}$ ;  $\mathbf{v}_1 = \mathbf{r}_0 / \|\mathbf{r}_0\|_2$ 
3:  $f_1^{(\sigma)} = 1$ ,  $h_0^{(\sigma)} = \|\mathbf{r}_0\|_2$ ,  $\mathbf{p}_{-1}^{(\sigma)} = \mathbf{p}_0^{(\sigma)} = \mathbf{0}$ 
4: for  $j = 1, 2, \dots$  do
5:    $\mathbf{v}_{j+1}'' = A\mathbf{v}_j$ 
6:    $\alpha_j = \langle \mathbf{v}_j, \mathbf{v}_{j+1}'' \rangle$ 
7:    $\mathbf{v}_{j+1}' = \mathbf{v}_{j+1}'' - \alpha_j \mathbf{v}_j - \beta_{j-1} \mathbf{v}_{j-1}$ 
8:    $\beta_j = \|\mathbf{v}_{j+1}'\|_2$ 
9:    $\mathbf{v}_{j+1} = \mathbf{v}_{j+1}' / \beta_j$ 
10:  for  $k = 1, 2, \dots, M$  do
11:     $\hat{T}_{j-2,j}^{(k)} = 0$ 
12:     $\hat{T}_{j-1,j}^{(k)} = \beta_{j-1}$ ,  $\hat{T}_{j,j}^{(k)} = \alpha_j + \sigma_k$ ,  $\hat{T}_{j+1,j}^{(k)} = \beta_j$ 
13:    if  $j \geq 3$  then  $\begin{bmatrix} \hat{T}_{j,j-2}^{(k)} & \hat{T}_{j,j-1}^{(k)} \end{bmatrix}^T = G_{j-2}^{(k)} \begin{bmatrix} \hat{T}_{j,j-2}^{(k)} & \hat{T}_{j,j-1}^{(k)} \end{bmatrix}^T$  end if
14:    if  $j \geq 2$  then  $\begin{bmatrix} \hat{T}_{j,j-1}^{(k)} & \hat{T}_{j,j}^{(k)} \end{bmatrix}^T = G_{j-1}^{(k)} \begin{bmatrix} \hat{T}_{j,j-1}^{(k)} & \hat{T}_{j,j}^{(k)} \end{bmatrix}^T$  end if
15:     $\left( \hat{T}_{j,j}^{(k)}, G_j^{(k)} \right) = \text{GIVENS} \left( \hat{T}_{j,j}^{(k)}, \hat{T}_{j+1,j}^{(k)} \right)$ 
16:     $\mathbf{p}_j^{(k)} = \left( \mathbf{v}_j - \hat{T}_{j-2,j}^{(k)} \mathbf{p}_{j-2}^{(k)} - \hat{T}_{j-1,j}^{(k)} \mathbf{p}_{j-1}^{(k)} \right) / \hat{T}_{j,j}^{(k)}$ 
17:     $\mathbf{x}_j^{(k)} = \mathbf{x}_{j-1}^{(k)} + \|\mathbf{r}_0\| c_j^{(k)} f_j^{(k)} \mathbf{p}_j^{(k)}$ 
18:     $f_{j+1}^{(k)} = -\bar{s}_j f_j^{(k)}$ 
19:     $h_j^{(k)} = |-\bar{s}_j^{(k)}| \cdot h_{j-1}^{(k)}$ 
20:    Determine convergence by  $\|\mathbf{r}_j^{(k)}\| = h_j^{(k)}$ 
21:  end for
22: end for
```

## shifted MINRES法の並列化モデル

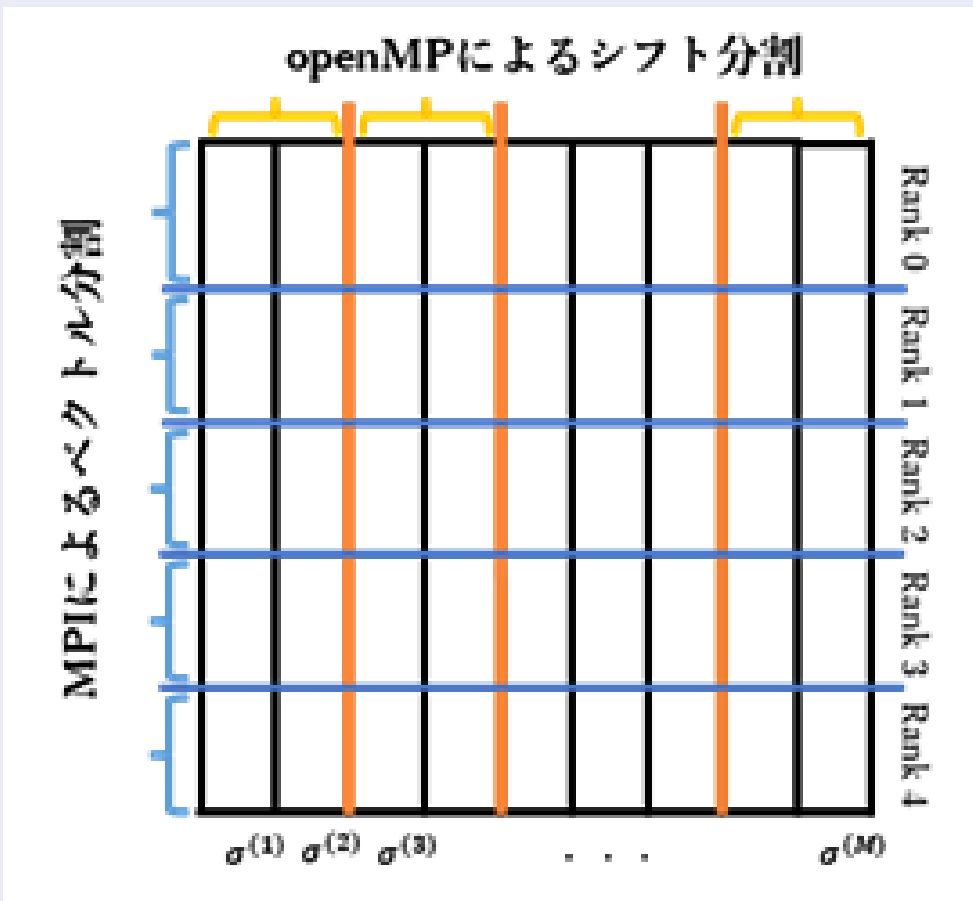


図 1: 並列化モデル1

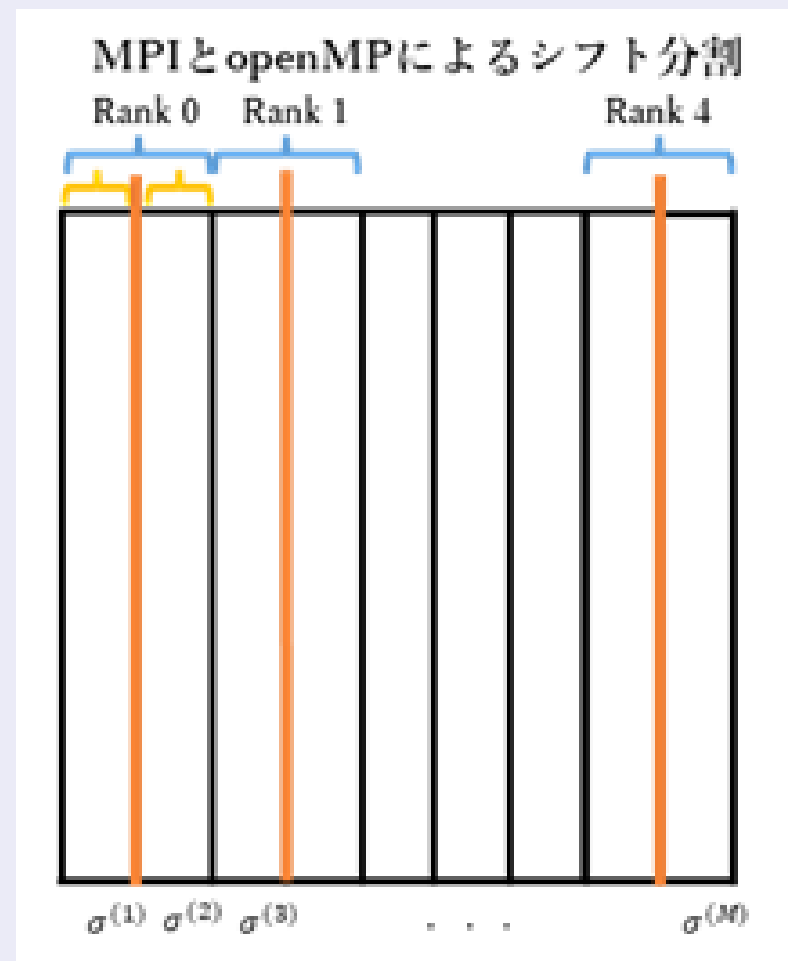


図 2: 並列化モデル2

## 数値実験

## 実験結果

## まとめと今後の展望

- shifted MINRES法に対する2種類の並列化モデルの検討をおこなった
  - あああ
  - いいい
  - ううう
- 大規模問題、実問題での性能検証
- その他の並列化モデル・最適化の検討

## 参考文献

- S. Hidaka, S. Kudo, T. Hoshi, Y. Yamamoto, Performance of the shifted minimal residual method for multiply shifted linear systems with real symmetric or complex Hermitian coefficient matrices, Comput. Phys. Comm., **314** (2025), 109679.
- T. Hoshi, ELSEs matrix library, 2019, <http://www.elses.jp/matrix/>. (accessed 22 Jun. 2025)