

# 行列計算における高速アルゴリズム

## - 大規模連立1次方程式の反復解法 -

---

2019年 6月 20日  
計算科学技術特論A

電気通信大学 大学院情報理工学研究科  
情報・ネットワーク工学専攻  
山本 有作

# 本講義の構成

- 第1回(6月22日)

## 「大規模連立1次方程式の反復解法」

- 代表的な行列計算である連立1次方程式の解法について、現在最も広く利用されているクリロフ部分空間法の基礎を紹介する

- 第2回(6月29日)

## 「ポストペタ時代に向けた線形計算アルゴリズムの課題と研究動向」

- 様々な行列計算について、ポストペタ計算機上での実装における課題と、その解決のための取り組みを紹介する

# 目次



1. はじめに
2. クリロフ部分空間と射影
3. 代表的なクリロフ部分空間法
4. 前処理
5. 波束シミュレーション向けの解法
6. 終わりに



# はじめに

# 大規模連立1次方程式

- 今回の講義で扱う問題
  - 連立1次方程式

$$Ax = b$$

- ただし,  $A \in \mathbf{R}^{m \times m}$ ,  $A$  は正則,  
 $b \in \mathbf{R}^m$  (右辺ベクトル),  $x \in \mathbf{R}^m$  (未知ベクトル)
- 特に  $A$  が大規模な疎行列の場合を考える
- 応用
  - 差分法・有限要素法による偏微分方程式の解法
  - 連立常微分方程式の解法(回路シミュレーションなど)
  - 連立非線形方程式の解法
  - 他の線形計算の部品(shift-and invert Lanczos 法, 櫻井-杉浦法)

# 係数行列の分類と数値解法

- 係数行列の分類

- 密行列／疎行列／帯行列／構造を持つ行列
- 対称行列／非対称行列
- 正定値行列／その他の行列

- 行列の分類に応じた解法(例)

- 幅の狭い帯行列ならば直接解法(LU分解法)が有利
- 対称正定値行列ならばコレスキー分解が利用可能
- 対称正定値行列ならば共役勾配法(CG法)が利用可能

# 直接解法と反復解法

- 直接解法

- 行列を  $A = LU$  とLU分解し,  $Ly = b$ ,  $Ux = y$  を順に解く
- $A$  が疎行列の場合, ゼロでない要素のみに対して演算を行うことで, 演算量と記憶領域を削減可能(疎行列LU分解)
- $A$  が対称正定値行列の場合, コレスキー分解  $A = LL^T$  を用いることで, 記憶領域と演算量を半分にできる

- 特徴

- 有限回の演算で解が求まる(所要時間がほぼ予測可能)
- 悪条件の問題に強い
- 行列の非零要素数に比べて、数倍～数十倍の記憶容量が必要なことが多い(フィルインの問題)
- 反復解法に比べると, 演算量大
- 1回LU分解を行えば,  $b$  のみが異なる方程式を少ないコストで解ける

# 直接解法と反復解法(続き)

- 反復解法

- 真の解  $x^*$  に収束するベクトル列  $x^{(0)}, x^{(1)}, x^{(2)}, \dots$  を順次生成していく方法

- 特徴

- 反復回数が事前にはわからない(ことが多い)
- 収束しない場合がある
- 行列  $A$  を変形せず, 行列ベクトル積  $Ap$  の形でのみ用いるため, 行列の記憶領域は  $A$  の非ゼロ要素数の分のみ
  - # ただしベクトルの記憶領域は別に必要
- うまく収束する場合, 演算量は直接解法に比べて遥かに小さい



# 定常反復法と非定常反復法

## • 定常反復法

- 線形の漸化式  $x^{(n+1)} = Cx^{(n)} + d$  ( $C$ : 定数行列,  $d$ : 定数ベクトル) により近似解を更新していく反復解法
- 上記の反復が収束し, 収束先が真の解  $x^*$  になるように  $C, d$  を選ぶ  
#  $A = M - N$  ( $M$  は正則行列) とし,  $C = M^{-1}N, d = M^{-1}b$  とする
- 収束次数は1次。収束率は  $C$  の絶対値最大の固有値に依存
- ガウス-ザイデル法, SOR法, ADI法, マルチグリッド法など  
# マルチグリッド法は非定常反復法として使うことも可能

## • 非定常反復法

- $x^{(n)} \rightarrow x^{(n+1)}$  の漸化式が,  $x^{(n)}$  に関して非線形・非定常な反復解法
- 一般に, 定常反復法よりも収束が速い
- **クリロフ部分空間法**, チェビシェフ準反復法など

# 行列の特異値と条件数

## • 行列の特異値

- $A \in \mathbf{R}^{m \times m}$  に対し,  $A^T A$  は対称非負定値行列であり, その  $m$  個の固有値はすべて 0 以上の実数となる
- これらの平方根を大きい順に  $\sigma_1(A) \geq \sigma_2(A) \geq \dots \geq \sigma_m(A) \geq 0$  と書き,  $A$  の特異値と呼ぶ
- 行列  $A$  が正則  $\Leftrightarrow \sigma_m(A) > 0$

## • 行列の条件数

- 正則行列  $A \in \mathbf{R}^{m \times m}$  に対し,  $\kappa(A) = \sigma_1(A)/\sigma_m(A)$  を  $A$  の条件数と呼ぶ
- 単位行列の条件数は 1
- 条件数の大きな連立1次方程式は, 次の2つの意味で解きにくい
  - # 残差  $r^{(n)} = Ax^{(n)} - b$  が小さくても,  $x^{(n)}$  が真の解から遠い場合がある
  - # クリロフ部分空間法が収束しにくい



# クリロフ部分空間と射影

# クリロフ部分空間

- 定義

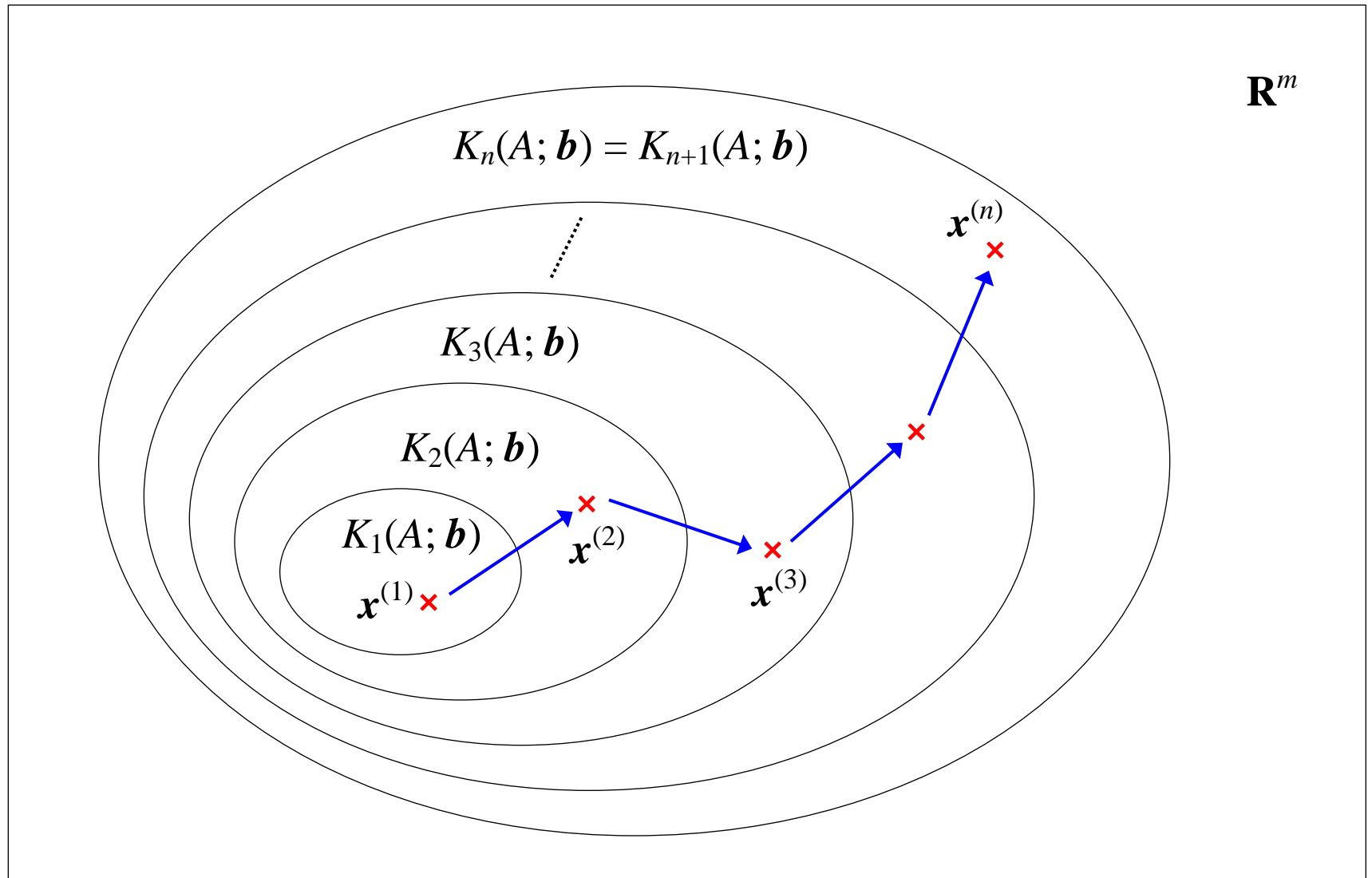
- 行列  $A \in \mathbf{R}^{m \times m}$ , ベクトル  $b \in \mathbf{R}^m$  に対し, 次のように定義される  $\mathbf{R}^m$  の部分空間  $K_n(A; b)$  を  $A, b$  に関する  $n$  次のクリロフ部分空間と呼ぶ

$$K_n(A; b) = \text{span}\{b, Ab, A^2b, \dots, A^{n-1}b\}$$

- クリロフ部分空間法

- $x^{(0)} = \mathbf{0}$  から始めて,  $x^{(n)} \in K_n(A; b)$  ( $n \geq 1$ ) となるように近似解の列  $\{x^{(n)}\}$  を構成していく反復解法を, クリロフ部分空間法と呼ぶ
  - #  $\mathbf{0}$  以外の初期値から始める方法もある
- $K_1(A; b) \subseteq K_2(A; b) \subseteq \dots \subseteq K_n(A; b)$  なので, クリロフ部分空間法では, 探索する空間を広げながら近似解を更新していくことになる
- $K_n(A; b)$  の中で, どのような基準で近似解  $x^{(n)}$  を定めるかにより, 様々なクリロフ部分空間法がある

# クリロフ部分空間法



# クリロフ部分空間内での解の存在

## • クリロフ部分空間の拡大

- $K_n(A; \mathbf{b}) \subseteq K_{n+1}(A; \mathbf{b})$  は明らか
- $K_n(A; \mathbf{b}) = K_{n+1}(A; \mathbf{b})$  となると、空間はそれ以上拡大しない
- これにより、解に到達できなくなることはないか？

## • 定理

- $A$  を正則行列とする。このとき、 $K_n(A; \mathbf{b}) = K_{n+1}(A; \mathbf{b})$  を満たす最小の  $n$  に対し、 $Ax = \mathbf{b}$  の解  $x^*$  は  $K_n(A; \mathbf{b})$  に含まれる

## • 証明

- 仮定より、 $A^n \mathbf{b} = c_0 \mathbf{b} + c_1 A \mathbf{b} + \cdots + c_{n-1} A^{n-1} \mathbf{b}$  を満たす  $c_1, c_2, \dots, c_{n-1}$  が存在する。ここで、 $c_0 = 0$  とすると、 $A$  の正則性より、 $n$  が最小であることと矛盾が生じるので、 $c_0 \neq 0$ 。そこで、両辺を  $c_0$  で割って整理すると、 $A((1/c_0)A^{n-1} \mathbf{b} - (c_{n-1}/c_0)A^{n-2} \mathbf{b} - \cdots - (c_1/c_0) \mathbf{b}) = \mathbf{b}$ 。これは  $x^* \in K_n(A; \mathbf{b})$  を意味する

# 残差多項式

- 残差の表式

- $K_n(A; b)$  における近似解を  $x^{(n)} = d_0b + d_1Ab + \cdots + d_{n-1}A^{n-1}b$  と定めたとする
- このとき, 残差  $r^{(n)} = Ax^{(n)} - b$  は次のように書ける

$$r^{(n)} = -b + d_0Ab + d_1A^2b + \cdots + d_{n-1}A^nb = \varphi_n(A)b$$

ただし,

$$\varphi_n(z) = -1 + d_0z + d_1z^2 + \cdots + d_{n-1}z^n \quad \text{定数項が } -1 \text{ の } n \text{ 次多項式}$$

これを**残差多項式**と呼ぶ

- $K_n(A; b)$  で  $x^{(n)}$  を1つ定めるとは, 残差多項式を1つ定めることと等価
- 残差多項式は, クリロフ部分空間法の解析で重要な役割を果たす

# クリロフ部分空間の正規直交基底の生成

- 正規直交基底の必要性

- 近似解  $x^{(n)}$  を  $K_n(A; b)$  の基底ベクトルの線形結合として表す
- 基底として**正規直交基底**を用いると, 解法の理論的導出のし易さでも, 数値的安定性の面からも有利

- 正規直交基底の生成

- 考え方

- $b$  を正規化して  $q_1 = b / \| b \|_2$  を作成
- $v_2 = Aq_1$
- $v_2$  を  $q_1$  に対して直交化し, 正規化して  $q_2$  を作成
- $v_3 = Aq_2$
- $v_3$  を  $q_1, q_2$  に対して直交化し, 正規化して  $q_3$  を作成
- $\vdots$

- これは, 逐次的に生成されるベクトル  $\{v_n\}$  に対し, グラム・シュミット法による直交化を行っていることに相当
- これを **Arnoldi 過程** と呼ぶ



# クリロフ部分空間の正規直交基底の生成(続き)

- Arnoldi 過程

```
[Arnoldi process]
```

$$\mathbf{q}_1 = \mathbf{b} / \|\mathbf{b}\|_2$$

```
for  $n = 1, 2, 3, \dots$ 
```

$$\mathbf{v} = A\mathbf{q}_n$$

```
for  $j = 1$  to  $n$ 
```

$$h_{jn} = \mathbf{q}_j^T \mathbf{v}$$

$$\mathbf{v} = \mathbf{v} - h_{jn}\mathbf{q}_j$$

```
end for
```

$$h_{n+1,n} = \|\mathbf{v}\|_2$$

$$\mathbf{q}_{n+1} = \mathbf{v} / h_{n+1,n}$$

```
end for
```

} 新たなベクトルの生成(空間の拡張)

} 直交化

} 正規化

- Arnoldi 過程の変種

- 直交化にハウスホルダー変換を用いる方法もある
- 演算量は多くなるが、基底の直交性と並列化可能性に関して優れる

# クリロフ部分空間の正規直交基底の生成(続き)

- Arnoldi 分解

- Arnoldi 過程 より,  $Aq_i$  は  $q_1, q_2, \dots, q_{i+1}$  を使って次のように書ける

$$Aq_i = h_{1i}q_1 + h_{2i}q_2 + \dots + h_{i+1,i}q_{i+1}$$

- そこで,

$$Q_n = [q_1 | q_2 | \dots | q_n], \quad (m \times n \text{ 列直交行列})$$

$$\tilde{H}_n = \begin{bmatrix} h_{11} & h_{12} & \dots & h_{1n} \\ h_{21} & h_{22} & \dots & h_{2n} \\ & \ddots & \ddots & \vdots \\ & & h_{n,n-1} & h_{nn} \\ & & & h_{n+1,n} \end{bmatrix} \quad ((n+1) \times n \text{ 行列})$$

と定義すると, 次の式が成り立つ

$$AQ_n = Q_{n+1}\tilde{H}_n$$

- これを,  $A$  の  $n$  次の **Arnoldi 分解**と呼ぶ

# クリロフ部分空間の正規直交基底の生成(続き)

- Arnoldi 分解(続き)

- Arnoldi 分解の式  $AQ_n = Q_{n+1}\tilde{H}_n$  に左から  $Q_n^T$  をかけ、 $Q_n$  の各列が直交することに注意すると、

$$\begin{aligned} Q_n^T A Q_n &= Q_n^T Q_{n+1} \tilde{H}_n \\ &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix} \tilde{H}_n \\ &= \begin{bmatrix} h_{11} & h_{12} & \cdots & h_{1n} \\ h_{21} & h_{22} & \cdots & h_{2n} \\ & \ddots & \ddots & \vdots \\ & & h_{n,n-1} & h_{nn} \end{bmatrix} \equiv H_n. \quad (n \times n \text{ ヘッセンベルグ行列}) \end{aligned}$$

- これは、 $A$  を  $\text{span}\{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \dots, \mathbf{q}_n\} = K_n(A; \mathbf{b})$  に射影した行列と見ることができる

# 固有値計算のための Arnoldi 法の原理

# 固有値計算のためのArnoldi法

- クリロフ部分空間の中での固有ベクトルの近似
  - $K_n(A; b)$  の中で  $A$  の近似固有ベクトル  $x$  を求めることとし,  $x = Qy$  ( $y \in \mathbf{R}^n$ ) とおく. また, 対応する近似固有値を  $\lambda$  とする
  - 残差  $Ax - \lambda x$  が  $K_n(A; x^{(0)})$  に直交するという条件 (Ritz-Galerkin 条件) を課すと,

$$\begin{aligned} Q_n^T(Ax - \lambda x) &= Q_n^T A Q_n y - \lambda Q_n^T Q_n y \\ &= H_n y - \lambda y = \mathbf{0}. \end{aligned}$$

したがって,  $k \times k$  行列に対する固有値問題

$$\boxed{H_n y = \lambda y} \quad \text{を解けばよい}$$

これは, **ヘッセンベルグ行列**に対する固有値問題となる

- 近似固有値は  $\lambda$ , 近似固有ベクトルは  $x = Q_n y$  で与えられる

# A が対称行列の場合

- Lanczos 過程

- $Q_n^T A Q_n = H_n$  は対称行列となるから、非ゼロ構造を考えると、

$$Q_n^T A Q_n = \begin{bmatrix} h_{11} & h_{12} & & & & \\ h_{21} & h_{22} & h_{23} & & & \\ & h_{23} & h_{33} & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & & \\ & & & \ddots & h_{n-1,n} & \\ & & & h_{n,n-1} & h_{nn} & \end{bmatrix} \equiv T_n$$

となり、 $H_n$  は対称3重対角行列  $T_n$  となる

- これは、Arnoldi 過程において計算した内積  $h_{ji}$  ( $i \geq j+1$ ) が自動的に 0 になることを意味する
- すなわち、 $Aq_i$  は  $q_i$  と  $q_{i-1}$  に対してのみ直交化すればよい
- これを利用して Arnoldi 過程の計算量を減らした方法を Lanczos 過程と呼ぶ

# A が対称行列の場合 (続き)

- Lanczos 過程

[Lanczos process] $\beta_0 = 0, \mathbf{q}_0 = \mathbf{0}, \mathbf{q}_1 = \mathbf{b}/\ \mathbf{b}\ _2$ for $n = 1, 2, 3, \dots$ $\mathbf{v} = A\mathbf{q}_n$ $\alpha_n = \mathbf{q}_n^T \mathbf{v}$ $\mathbf{v} = \mathbf{v} - \beta_{n-1}\mathbf{q}_{n-1} - \alpha_n\mathbf{q}_n$ $\beta_n = \ \mathbf{v}\ _2$ $\mathbf{q}_{n+1} = \mathbf{v}/\beta_n$ end for	} 新たなベクトルの生成 (空間の拡張) } 直交化 } 正規化
-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	----------------------------------------

- ただし,  $\alpha_n = h_{nn}, \beta_n = h_{n+1,n} = h_{n,n+1}$  とおいた

- Lanczos 過程の特徴

- $\mathbf{q}_n$  と  $\mathbf{q}_{n-1}$  のみから  $\mathbf{q}_{n+1}$  が求まる (3項間漸化式)
- 1反復あたりの演算量は  $n$  によらず一定

# 固有値計算のためのLanczos法

- クリロフ部分空間の中での固有ベクトルの近似
  - $K_n(A; b)$  の中で  $A$  の近似固有ベクトル  $x$  を求めることとし,  $x = Qy$  ( $y \in \mathbf{R}^n$ ) とおく. また, 対応する近似固有値を  $\lambda$  とする
  - 残差  $Ax - \lambda x$  が  $K_n(A; x^{(0)})$  に直交するという条件 (Ritz-Galerkin 条件) を課すと,

$$\begin{aligned} Q_n^T(Ax - \lambda x) &= Q_n^T A Q_n y - \lambda Q_n^T Q_n \\ &= T_n y - \lambda y = \mathbf{0}. \end{aligned}$$

したがって,  $k \times k$  行列に対する固有値問題

$$\boxed{T_n y = \lambda y} \quad \text{を解けばよい}$$

これは, **3重対角行列**に対する固有値問題となる

- 近似固有値は  $\lambda$ , 近似固有ベクトルは  $x = Q_n y$  で与えられる

# クリロフ部分空間内での近似解の決定

- 近似解の選び方

- 近似解  $x^{(n)}$  としてクリロフ部分空間  $K_n(A; b)$  内のどんなベクトルを選ぶかは、自由度がある
- 主に、**残差最小化**、**Ritz-Galerkin 法**、**Petrov-Galerkin 法**の3種類の原理が使われる
- どの原理を使うかによって、クリロフ部分空間法の様々な変種が生まれる



# 近似解の決定法 I: 残差最小化

- 方法

- 残差  $r^{(n)} = Ax^{(n)} - b$  が最小になる  $x^{(n)}$  を  $K_n(A; b)$  の中で選ぶ
- 最も自然なアプローチ
  - # 本当は誤差  $e^{(n)} = x^{(n)} - x^*$  を最小にしたいが, 一般には困難
- **GMRES法**, MINRES法などがこのタイプに属する

# 近似解の決定法 II: Ritz-Galerkin法

## • 方法

- 残差  $\mathbf{r}^{(n)} = A\mathbf{x}^{(n)} - \mathbf{b}$  が  $K_n(A; \mathbf{b})$  に直交するように  $\mathbf{x}^{(n)}$  を選ぶ

$$A\mathbf{x}^{(n)} - \mathbf{b} \perp K_n(A; \mathbf{b})$$

- これは、残差のうち  $K_n(A; \mathbf{b})$  に正射影した成分が 0 であることを示す

## • 残差の直交性

- $K_1(A; \mathbf{b}) \subset K_2(A; \mathbf{b}) \subset \cdots \subset K_n(A; \mathbf{b})$  (真部分空間) とするとき、残差  $\mathbf{r}^{(0)} = \mathbf{b}, \mathbf{r}^{(1)}, \mathbf{r}^{(2)}, \dots, \mathbf{r}^{(n-1)}$  は  $K_n(A; \mathbf{b})$  の直交系をなす

#  $\mathbf{r}^{(n-1)} \in K_n(A; \mathbf{b})$  を用いて、 $n$  に関する帰納法により容易に示せる

# 近似解の決定法 II: Ritz-Galerkin法 (続き)

- $A$  が対称正定値行列の場合の意味付け

- $\phi(x) = (1/2) x^T A x - x^T b$  とおくと,  $Ax = b$  の解は  $\phi(x)$  の最小値
- ここで,  $x^{(n)} \in K_n(A; b)$  と制限すると,  $x^{(n)} = Q_n y^{(n)}$  ( $y^{(n)} \in \mathbf{R}^n$ ) と基底の線形結合で書けるので,  $\phi(x^{(n)}) = (1/2) (Q_n y^{(n)})^T A Q_n y^{(n)} - (Q_n y^{(n)})^T b$
- これを最小にする  $y^{(n)}$  は, 微分して  $Q_n^T (A Q_n y^{(n)} - b) = \mathbf{0}$  より求まる
- これは, ちょうど  $Ax^{(n)} - b \perp K_n(A; b)$  と等価
- すなわち, Ritz-Galerkin法は  $\phi(x^{(n)})$  を最小化する  $x^{(n)}$  を求めている

# 近似解の決定法 II: Ritz-Galerkin法 (続き)

- $A$  が対称正定値行列の場合の意味付け (続き)

- いま, 誤差  $e^{(n)} = x^{(n)} - x^*$  の  $A$  ノルムを考えると,

$$\begin{aligned}\|e^{(n)}\|_A^2 &\equiv e^{(n)T} A e^{(n)} = (x^{(n)} - x^*)^T A (x^{(n)} - x^*) \\ &= x^{(n)T} A x^{(n)} - 2x^{(n)T} A x^* + x^{*T} A x^* \\ &= x^{(n)T} A x^{(n)} - 2x^{(n)T} A x^* + x^{*T} b \\ &= 2\phi(x^{(n)}) + \text{const.}\end{aligned}$$

- したがって, Ritz-Galerkin法は, 誤差の  $A$  ノルムを最小化する  $x^{(n)}$  を求めていると考えることもできる

- Ritz-Galerkin 法に基づく解法

- 対称正定値行列向け: CG法 (共役勾配法)
- 非対称行列向け: FOM法

# Ritz-Galerkin 法は関数空間での近似 (有限要素法など) にも使われる

# 近似解の決定法 III: Petrov-Galerkin法

- 方法

- $\mathbf{R}^m$  の適当な部分空間の列  $L_1 \subset L_2 \subset L_3 \subset \dots$  ( $L_n$  は  $n$  次元空間) を用意し, 残差  $\mathbf{r}^{(n)} = \mathbf{A}\mathbf{x}^{(n)} - \mathbf{b}$  が  $L_n$  に直交するように  $\mathbf{x}^{(n)}$  を選ぶ

$$\mathbf{A}\mathbf{x}^{(n)} - \mathbf{b} \perp L_n$$

- これは, 残差のうち空間  $L_n$  に正射影した成分が 0 であることを示す
- $L_n$  としては,  $\mathbf{b}^*$  を適当なベクトルとし,  $\mathbf{A}^T$  と  $\mathbf{b}^*$  に対するクリロフ部分空間  $K_n(\mathbf{A}^T; \mathbf{b}^*)$  を使うことが多い

- Petrov-Galerkin 法に基づく解法

- Bi-CG法, QMR法
  - # Petrov-Galerkin 法は関数空間での近似にも使われる
- Petrov-Galerkin 法から派生した解法: CGS法, Bi-CGSTAB法, GPBi-CG法

# 残差多項式による書き換え

- 残差最小化

- 定数項が  $-1$  の  $n$  次多項式の集合を  $P_n$  とする
- このとき、残差最小化は、各  $n$  における残差多項式  $\varphi_n(z)$  を、次の最小化問題の解になるように選ぶアプローチだと解釈できる

$$\min_{\varphi_n \in P_n} \|\varphi_n(A)\mathbf{b}\|_2$$


- Ritz-Galerkin法 ( $A$  が対称正定値行列の場合)

- $\mathbf{x}^{(n)}$  の誤差を  $\mathbf{e}^{(n)} = \mathbf{x}^{(n)} - \mathbf{x}^*$  とすると、 $A\mathbf{e}^{(n)} = A\mathbf{x}^{(n)} - \mathbf{b} = \mathbf{r}^{(n)}$
- よって、

$$\begin{aligned} \mathbf{e}^{(n)\top} A \mathbf{e}^{(n)} &= \mathbf{r}^{(n)\top} A^{-1} \mathbf{r}^{(n)} = \mathbf{b}^\top \varphi_n(A) A^{-1} \varphi_n(A) \mathbf{b} \\ &= \mathbf{b}^\top A^{-1} \varphi_n(A) A \varphi_n(A) A^{-1} \mathbf{b} \\ &= \mathbf{e}^{(0)\top} \varphi_n(A) A \varphi_n(A) \mathbf{e}^{(0)} = \|\varphi_n(A)\mathbf{e}^{(0)}\|_A \end{aligned}$$

- すなわち、Ritz-Galerkin 法は次の最小化問題を解いている

$$\min_{\varphi_n \in P_n} \|\varphi_n(A)\mathbf{e}^{(0)}\|_A$$



# 代表的なクリロフ部分空間法

# 代表的なクリロフ部分空間法

- 残差最小化に基づく解法
  - **GMRES法** (Generalized Minimum Residual, 一般化最小残差法)
  - MINRES法 (Minimum Residual, 最小残差法)
- Ritz-Galerkin 法に基づく解法
  - **CG法** (Conjugate Gradient, 共役勾配法)
  - FOM法 (Full Orthogonalization Method, 完全直交化法)
- Petrov-Galerkin 法に基づく解法
  - **Bi-CG法** (Bi-Conjugate Gradient, 双共役勾配法)
  - QMR法 (Quasi Minimal Residual, 準最小残差法)
  - CGS法 (Conjugate Gradient Squared, 自乗共役勾配法)
  - Bi-CGSTAB法 (Stabilized Bi-CG, 安定化双共役勾配法)



# GMRES法

## • 原理

- $K_n(A; \mathbf{b})$  の中で残差  $\mathbf{r}^{(n)} = A\mathbf{x}^{(n)} - \mathbf{b}$  を最小にする  $\mathbf{x}^{(n)}$  を選ぶ
- $\mathbf{x}^{(n)} \in K_n(A; \mathbf{b})$  より  $\mathbf{x}^{(n)} = Q_n \mathbf{y}^{(n)}$  ( $\mathbf{y}^{(n)} \in \mathbf{R}^n$ ) と書くと,

$$\begin{aligned}\|A\mathbf{x}^{(n)} - \mathbf{b}\|_2 &= \|AQ_n \mathbf{y}^{(n)} - \mathbf{b}\|_2 \\ &= \|Q_{n+1} \tilde{H}_n \mathbf{y}^{(n)} - \mathbf{b}\|_2 \\ &= \|Q_{n+1} (\tilde{H}_n \mathbf{y}^{(n)} - \|\mathbf{b}\|_2 \mathbf{e}_1)\|_2 \\ &= \|\tilde{H}_n \mathbf{y}^{(n)} - \|\mathbf{b}\|_2 \mathbf{e}_1\|_2.\end{aligned}$$

- ただし, 第2の等号では Arnoldi 分解の式  $AQ_n = Q_{n+1} \tilde{H}_n$  を用いた
- 第3の等号では,  $\mathbf{q}_1 = \mathbf{b} / \|\mathbf{b}\|_2$  であることを用いた
- 第4の等号では,  $Q_{n+1}$  が列直交行列であることから,  $Q_{n+1}$  を除いても2ノルムが変わらないことを用いた
- 最後の式の  $\|\cdot\|_2$  の中は  $n+1$  次元ベクトル,  $\mathbf{y}^{(n)}$  は  $n$  次元ベクトルであるから, 残差の最小化は  $\mathbf{y}^{(n)}$  に関する**最小2乗問題**となる

# GMRES法(続き)

## • 最小2乗問題の解法

- 最小2乗問題  $\min \| \tilde{H}_n \mathbf{y}^{(n)} - \| \mathbf{b} \|_2 \mathbf{e}_1 \|_2$  を解くには, 係数行列  $\tilde{H}_n$  を  $\tilde{H}_n = U_n R_n$  ( $U_n \in \mathbf{R}^{(n+1) \times n}$ ,  $R_n \in \mathbf{R}^{n \times n}$ ) とQR分解し, 連立1次方程式  $R_n \mathbf{y}^{(n)} = U_n^T \| \mathbf{b} \|_2 \mathbf{e}_1$  を解けばよい
- $\tilde{H}_n$  は  $(n+1) \times n$  ヘッセンベルグ行列なので, そのQR分解はギブンス回転を用いて  $O(n^2)$  の計算量で行える
- さらに,  $\tilde{H}_{n-1}$  のQR分解が与えられたとき,  $\tilde{H}_n$  のQR分解は  $O(n)$  で計算できる
  - # 追加された第  $n$  列のみについて, ギブンス回転を作用させればよい

# GMRES法(続き)

- アルゴリズム

[GMRES algorithm]

$$\mathbf{q}_1 = \mathbf{b} / \|\mathbf{b}\|_2, \hat{\mathbf{b}} = \|\mathbf{b}\|_2 \mathbf{e}_1$$

for  $n = 1, 2, 3, \dots$

$$\mathbf{v} = A\mathbf{q}_n$$

for  $j = 1$  to  $n$

$$h_{jn} = \mathbf{q}_j^T \mathbf{v}, \mathbf{v} = \mathbf{v} - h_{jn} \mathbf{q}_j$$

end for

$$h_{n+1,n} = \|\mathbf{v}\|_2, \mathbf{q}_{n+1} = \mathbf{v} / h_{n+1,n}$$

$$r_{1n} = h_{1n}$$

for  $j = 2$  to  $n$

$$\gamma = c_{j-1} r_{j-1,n} + s_{j-1} h_{jn}$$

$$r_{jn} = -s_{j-1} r_{j-1,n} + c_{j-1} h_{jn}$$

$$r_{j-1,n} = \gamma$$

end for

$$\delta = \sqrt{r_{nn}^2 + h_{n+1,n}^2}, c_n = r_{nn} / \delta, s_n = h_{n+1,n} / \delta$$

$$r_{nn} = c_n r_{nn} + s_n h_{n+1,n}$$

$$\hat{\mathbf{b}}_{n+1} = -s_n \hat{\mathbf{b}}_n, \hat{\mathbf{b}}_n = c_n \hat{\mathbf{b}}_n$$

$$\rho = |\hat{\mathbf{b}}_{n+1}| (= \|A\mathbf{x}^{(n)} - \mathbf{b}\|_2)$$

if  $\rho$  is small enough break

end for

for  $j = n, n-1, \dots, 1$

$$y_j = (\hat{\mathbf{b}}_j - \sum_{i=j+1}^n r_{ji} y_i) / r_{jj}$$

end for

$$\mathbf{x} = \sum_{i=1}^n y_i \mathbf{q}_i$$

Arnoldi 過程による  $K_n(A; \mathbf{b})$  の  
正規直交基底の生成

ギブンス回転による  $\tilde{H}_n$  のQR分解  
( $\tilde{H}_n$  のQR分解の結果を用いる)

$U_n^T \|\mathbf{b}\|_2 \mathbf{e}_1$  の計算

後退代入により

$R_n \mathbf{y}^{(n)} = U_n^T \|\mathbf{b}\|_2 \mathbf{e}_1$  を解く

$\mathbf{x}^{(n)} = Q_n \mathbf{y}^{(n)}$  の計算

# GMRES法(続き)

## • GMRES法の特徴

- ・ 計算の途中で破綻が起こることはない
- ・ 残差が  $n$  とともに**単調に減少**
  - # 非対称行列向けのクリロフ部分空間法としては、最も頑健な方法
- ・ 所要メモリ量と1反復あたりの演算量が  $n$  に**比例して増加**
  - #  $q_n$  を  $q_1, q_1, \dots, q_{n-1}$  に対して直交化する必要があるため
  - # 所要メモリ・演算量を削減する方法として**リスタート**がある

## • MINRES法

- ・ 対称行列(必ずしも正定値でない)のための残差最小化法
- ・  $\tilde{H}_n$  が3重対角行列になることを利用し、所要メモリ量と1反復あたりの演算量を  $n$  に依存しない**定数**にできる
- ・ 丸め誤差に弱く、 $x^{(n)}$  中に  $(\kappa(A))^2$  のオーダーで丸め誤差が混入\*

\* H. A. van der Vorst: "Iterative Krylov Methods for Large Linear Systems", Cambridge Univ. Press, 2003.

- 原理

- $A$  は対称正定値行列とする
- 残差  $\mathbf{r}^{(n)} = A\mathbf{x}^{(n)} - \mathbf{b} \in K_{n+1}(A; \mathbf{b})$  が  $K_n(A; \mathbf{b})$  に直交するよう  $\mathbf{x}^{(n)}$  を選ぶ

- Lanczos過程との関係

- Lanczos過程では, 基底ベクトル  $\mathbf{q}_{n+1} \in K_{n+1}(A; \mathbf{b})$  を,  $K_n(A; \mathbf{b})$  に直交するよう選ぶ
- したがって, Lanczos過程を実行し,  $\mathbf{q}_{n+1}$  を適当にスケールリングすれば, CG法の残差  $\mathbf{r}^{(n)}$  が得られるはずである
- 残差  $\mathbf{r}^{(n)}$  の計算法が決まれば, 解  $\mathbf{x}^{(n)}$  の計算法も決まる (p. 14)

# CG法(続き)

- Lanczos過程における基底ベクトルのスケージング

- $q_{n+1}$  は3項漸化式を満たすから、それをスケージングした  $r^{(n)}$  も3項漸化式を満たすはず

$$Ar^{(n-1)} = \gamma_{n-2}r^{(n-2)} + \delta_{n-1}r^{(n-1)} + \epsilon_{n-1}r^{(n)}$$

- $r^{(n)}$  が  $r^{(n-1)}$ ,  $r^{(n-2)}$  と直交するという条件より,

$$\delta_{n-1} = \frac{r^{(n-1)\top} Ar^{(n-1)}}{r^{(n-1)\top} r^{(n-1)}}, \quad \gamma_{n-2} = \frac{r^{(n-2)\top} Ar^{(n-1)}}{r^{(n-2)\top} r^{(n-2)}}$$

- さらに、両辺の各項を  $\{b, Ab, \dots, A^n b\}$  で展開したときの  $b$  の係数を考えると、左辺は0, 右辺の  $r^{(n-1)}$ ,  $r^{(n-2)}$ ,  $r^{(n)}$  はそれぞれ  $-1$  (p. 14) であるから,

$$\epsilon_{n-1} = -(\gamma_{n-2} + \delta_{n-1})$$

- これらにより  $r^{(n)}$  の漸化式が定まる

# CG法(続き)

- CG法のアルゴリズム(3項漸化式)

- $\mathbf{r}^{(n)}$  の漸化式に  $\mathbf{r}^{(n)} = A\mathbf{x}^{(n)} - \mathbf{b}$  を代入して  $\mathbf{x}^{(n)}$  の漸化式を導出

[CG method (3-term recurrence)]

$$\gamma_{-1} = 0, \mathbf{r}^{(-1)} = \mathbf{0}, \mathbf{r}^{(0)} = -\mathbf{b}, \mathbf{x}^{(-1)} = \mathbf{x}^{(0)} = \mathbf{0}$$

for  $n = 1, 2, 3, \dots$

$$\mathbf{v} = A\mathbf{r}^{(n-1)}$$

$$\delta_{n-1} = \frac{\mathbf{r}^{(n-1)\top} A\mathbf{r}^{(n-1)}}{\mathbf{r}^{(n-1)\top} \mathbf{r}^{(n-1)}}$$

$$\mathbf{v} = \mathbf{v} - \gamma_{n-2}\mathbf{r}^{(n-2)} - \delta_{n-1}\mathbf{r}^{(n-1)}$$

$$\epsilon_{n-1} = -(\gamma_{n-2} + \delta_{n-1})$$

$$\mathbf{x}^{(n)} = (\mathbf{r}^{(n-1)} - \gamma_{n-2}\mathbf{x}^{(n-2)} - \delta_{n-1}\mathbf{x}^{(n-1)})/\epsilon_{n-1}$$

$$\mathbf{r}^{(n)} = \mathbf{v}/\epsilon_{n-1}$$

$$\gamma_{n-1} = \frac{\mathbf{r}^{(n-1)\top} A\mathbf{r}^{(n)}}{\mathbf{r}^{(n-1)\top} \mathbf{r}^{(n-1)}}$$

end for

# CG法(続き)

- アルゴリズム(連立2項漸化式)

[CG algorithm]

$$\mathbf{x}_0 = \mathbf{0}, \quad \mathbf{r}_0 = \mathbf{b}, \quad \mathbf{p}_0 = \mathbf{r}_0$$

for  $n = 1, 2, 3, \dots$

$$\alpha_n = (\mathbf{r}_{n-1}^T \mathbf{r}_{n-1}) / (\mathbf{p}_{n-1}^T A \mathbf{p}_{n-1})$$

$$\mathbf{x}_n = \mathbf{x}_{n-1} + \alpha_n \mathbf{p}_{n-1}$$

$$\mathbf{r}_n = \mathbf{r}_{n-1} - \alpha_n A \mathbf{p}_{n-1}$$

$$\beta_n = (\mathbf{r}_n^T \mathbf{r}_n) / (\mathbf{r}_{n-1}^T \mathbf{r}_{n-1})$$

$$\mathbf{p}_n = \mathbf{r}_n + \beta_n \mathbf{p}_{n-1}$$

end for

ステップ幅の決定

探索方向に向かって  $x_n$  を動かす  
残差の計算

次の探索方向の決定

- 最小化問題の解法としての解釈

- 関数  $\phi(\mathbf{x}) = (1/2) \mathbf{x}^T A \mathbf{x} - \mathbf{x}^T \mathbf{b}$  を最小化

- $\mathbf{p}_{n-1}$  が第  $n$  ステップでの探索方向

- $\mathbf{p}_{n-1}$  方向に進んで関数値が極小になるように, ステップ幅を  $\alpha_n$  を決定



# CG法(続き)

## CG法の性質

- $K_n(A; \mathbf{b}) = \text{span}\{\mathbf{b}, A\mathbf{b}, A^2\mathbf{b}, \dots, A^{n-1}\mathbf{b}\} = \text{span}\{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n\}$   
 $= \text{span}\{\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_{n-1}\} = \text{span}\{\mathbf{p}_0, \mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_{n-1}\}$
- 残差の直交性:  $\mathbf{r}_n^T \mathbf{r}_j = 0 \quad (j < n)$
- 探索方向の  $A$ -共役性:  $\mathbf{p}_n^T A \mathbf{p}_j = 0 \quad (j < n)$ 
  - # 最小化問題の解法と見たとき, 各方向  $\mathbf{p}_n$  への探索の繰り返しにより, 大域的な最小値が求まることを保証

## CG法の特徴

- 計算の途中で破綻が起こることはない
- 誤差の  $A$  ノルム  $\|\tilde{\mathbf{e}}_n\|_A = \|\mathbf{x}_n - \mathbf{x}^*\|_A$  が  $n$  とともに単調に減少
- 所要メモリ量と1反復あたりの演算量は  $n$  に依存しない
  - # 3項間漸化式により計算が行えるため

# CG法(続き)

- CG法の収束性

- 誤差の  $A$  ノルム  $\|e_n\|_A$  の減少について, 次の評価式が成り立つ

$$\frac{\|e_n\|_A}{\|e_0\|_A} \leq 2 / \left[ \left( \frac{\sqrt{\kappa} + 1}{\sqrt{\kappa} - 1} \right)^n + \left( \frac{\sqrt{\kappa} - 1}{\sqrt{\kappa} + 1} \right)^{-n} \right] \leq 2 \left( \frac{\sqrt{\kappa} - 1}{\sqrt{\kappa} + 1} \right)^n$$

ただし,  $\kappa$  は  $A$  の条件数

- 証明の概略

- 残差多項式で表現した  $\|e_n\|_A$  の最小性より,

$$\frac{\|e_n\|_A}{\|e_0\|_A} = \inf_{\phi \in P_n} \frac{\|\phi(A)e_0\|_A}{\|e_0\|_A} = \inf_{\phi \in P_n} \frac{\sqrt{\sum_{j=1}^m a_j^2 \lambda_j (\phi(\lambda_j))^2}}{\sqrt{\sum_{j=1}^m a_j^2 \lambda_j}} \leq \inf_{\phi \in P_n} \max_{\lambda \in \Lambda(A)} |\phi(\lambda)|$$

ただし,  $P_n$  は定数項が1の  $n$  次多項式,  $\Lambda(A)$  は  $A$  の固有値の集合

- ここで, 特に  $\phi(\lambda)$  をチェビシェフ多項式に取って最右辺を評価すると上の定理が得られる

# CG法(続き)

## • CG法の収束性(続き)

- $A$  の相異なる固有値の個数が  $m^*$  の場合, CG法は高々  $m^*$  回で収束する
  - # 前ページの  $\phi(\lambda)$  として, これら  $m^*$  個の固有値で 0 となる  $m^*$  次多項式が取れるから,  $n = m^*$  のとき, 最右辺は 0 となる
- 固有値が少数のクラスターに固まっている場合も, 収束は速い
  - # これらのクラスター上で小さな値を取る低次の多項式が作れるから

## • 前処理

- 固有値を1個あるいは少数個のクラスターに集中させることができれば, CG法の収束は速くなる
- この目的のため,  $Ax = b$  を別の(対称正定値な係数行列を持つ)連立1次方程式に変形して解く前処理(後述)が行われる

# Bi-CG法

- 原理

- ・ 方程式  $\begin{bmatrix} O & A \\ A^T & O \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{x} \\ \hat{\mathbf{x}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{b} \\ \hat{\mathbf{b}} \end{bmatrix}$  に対して形式的にCG法を適用する

- アルゴリズム

[Bi-CG algorithm]

$\mathbf{x}_0 = \mathbf{0}$ ,  $\mathbf{p}_0 = \mathbf{r}_0 = \mathbf{b}$ ,  $\mathbf{q}_0 = \mathbf{s}_0 = \text{arbitrary}$

for  $n = 1, 2, 3, \dots$

$$\alpha_n = (\mathbf{s}_{n-1}^T \mathbf{r}_{n-1}) / (\mathbf{q}_{n-1}^T A \mathbf{p}_{n-1})$$

$$\mathbf{x}_n = \mathbf{x}_{n-1} + \alpha_n \mathbf{p}_{n-1}$$

$$\mathbf{r}_n = \mathbf{r}_{n-1} - \alpha_n A \mathbf{p}_{n-1}$$

$$\mathbf{s}_n = \mathbf{s}_{n-1} - \alpha_n A^T \mathbf{q}_{n-1}$$

$$\beta_n = (\mathbf{s}_n^T \mathbf{r}_n) / (\mathbf{s}_{n-1}^T \mathbf{r}_{n-1})$$

$$\mathbf{p}_n = \mathbf{r}_n + \beta_n \mathbf{p}_{n-1}$$

$$\mathbf{q}_n = \mathbf{s}_n + \beta_n \mathbf{q}_{n-1}$$

end for

# Bi-CG法 (続き)

## • Breakdown

- $r_n$  と  $s_n$  とが直交すると, アルゴリズム中で分母が0になり, 計算を続行できなくなる。これは, 双直交基底を生成できないことに相当する。これを**第1種の breakdown** と呼ぶ
- 一方,  $T_n$  のLU分解において, ピボットが0になることに相当する breakdown もある。これを**第2種の breakdown** と呼ぶ
- これらは, いずれもアルゴリズム上の工夫によって回避可能

## • Bi-CG法の特徴

- 残差は必ずしも  $n$  とともに**単調に減少しない**
- 所要メモリ量と1反復あたりの演算量は  $n$  に**依存しない**
  - # GMRES法と比べた場合の大きな長所
  - # 3項間漸化式により計算が行えるため
- $A$  と  $A^T$  の両方による乗算が必要
  - # 反復当たりの行列ベクトル積の回数はGMRES法の2倍

# Bi-CG法から派生した解法

## • CGS法

- Bi-CG法を変形し,  $\mathbf{r}_n = (R_n(A))^2\mathbf{b}$ ,  $\mathbf{s}_n = \mathbf{b}^*$  となるように工夫した手法
  - #  $\mathbf{s}_n^T \mathbf{r}_n$  は不変なので, 様々な係数は Bi-CG 法と同じに計算できる
- 残差多項式が2乗されるため, 収束が速くなると予想される
  - # ただし, 収束の不規則性も2乗で効くため, Bi-CG法より不安定
- $A$  による乗算が2回となり,  $A^T$  による乗算は不要

## • Bi-CGSTAB法

- $S_n(z) = (1 - \omega_0 z)(1 - \omega_1 z) \cdots (1 - \omega_{n-1} z)$  という形の  $n$  次多項式  $S_n(z)$  (安定化多項式) を用いて,  $\mathbf{r}_n = S_n(A)R(A)\mathbf{b}$ ,  $\mathbf{s}_n = \mathbf{b}^*$  となるように工夫した手法
  - # この場合も, 様々な係数は Bi-CG 法と同じに計算できる
- 各ステップで局所的に残差を最小化するように  $\omega_n$  を決めることで, CGS法よりも収束が安定化される

# Bi-CG法から派生した解法

- GPBi-CG法

- Bi-CGSTAB法における安定化多項式  $S_n(z)$  として, 3項漸化式により生成される多項式を用いた方法
- 一般に, Bi-CGSTAB 法よりもさらに優れた収束性を持つ

- QMR法

- Bi-CG法において, 残差を擬似的に最小化するようにした方式
- 一般に, 残差の収束は Bi-CG 法よりもスムーズ(振動が少ない)
  - # 収束は, Bi-CG法に比べて必ずしも速くない
  - # しかし, 残差の振動が少ないほうが丸め誤差の点で有利



# 前处理



# 前処理の概念

- 前処理

- 行列  $K$  が、行列  $A$  を何らかの意味で近似しているとする
- このとき、方程式  $K^{-1}Ax = K^{-1}b$  を考えると、その係数行列  $K^{-1}A$  は  $A$  と比べて単位行列に近くなっていると考えられる。これにより、クリロフ部分空間法の収束はより速くなると期待できる
- このような方程式の変形を**前処理**(左前処理)と呼ぶ
- 各反復では、 $Ap$  の代わりに  $K^{-1}Ap$  を計算する

- 右前処理, 左前処理,

- 右前処理:  $AK^{-1}y = b, x = K^{-1}y$
- 両側前処理:  $K_1^{-1}AK_2^{-1}y = K_1^{-1}b, x = K_2^{-1}y$

- 前処理行列  $K$  に求められる性質

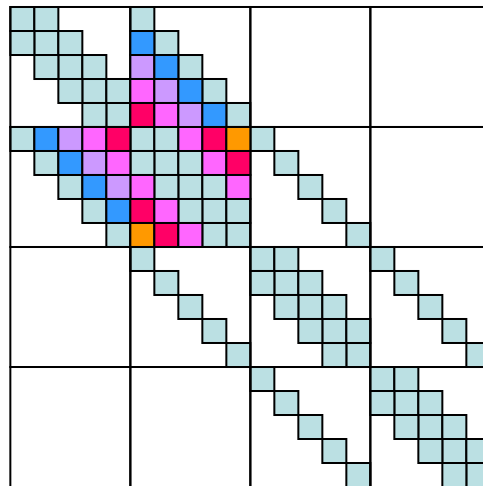
- $K^{-1}A$  ができるべく単位行列に近いこと
- $K$  の生成が容易であること
- $K^{-1}x$  の計算が容易であること

# 疎行列に対するLU分解とフィルイン

- フィルインのレベル

- 元々の非ゼロ要素  $a_{ij}$  に対して, そのレベルを  $l(a_{ij}) = 0$  と定義する
- フィルインにより  $a_{ij} \neq 0$  となったとき,  $a_{ij}$  のレベルを次式で定義する

$$l(a_{ij}) = \max(l(a_{ik}), l(a_{kj})) + 1$$



- レベル 0
- レベル 1
- レベル 2
- レベル 3
- レベル 4
- レベル 5

# 様々な前処理

## • 不完全LU分解

- 行列  $A$  のLU分解の際に、フィルインを無視して近似的に  $A \doteq LU$  と分解し、 $K = LU$  とおく。これを **ILU(0)** 前処理と呼ぶ
  - # 1段階のみのフィルインを許す ILU(1) 前処理, 2段階のフィルイン(フィルインによって生じたフィルイン)までを許すILU(1) 前処理も定義される
- 対称正定値行列の場合は、**不完全コレスキー分解型前処理**(IC(0)前処理)が使われる
- 幅広いクラスの行列に対して効果がある
- 一般に並列化は困難
  - #  $K^{-1}x$  の計算で, 前進消去  $L^{-1}x$ , 後退代入  $U^{-1}y$  が必要となるため
  - # 並列化向きの不完全LU分解についても, 多くの研究がある
- フィルインの絶対値の大きさによって無視するかどうかを決める **ILUT前処理**,  $U^{-1}$  の列ノルムの大きさによって無視するかどうかを決める **ILUC 前処理**もあり, 悪条件の問題で有効

# 様々な前処理(続き)

- 近似逆行列前処理 (SPAI; SParse Approximate Inverse)
  - 行列  $A$  そのものでなく,  $A^{-1}$  を直接近似する行列  $M$  を求める
  - 具体的には,  $M$  の非零要素位置を適当に決めた上で, 最小化問題  $\min_M \|I - AM\|_F$  を最小2乗法により解く
  - 不完全LU分解に比べ, 並列化が容易
  - ILU 分解と同程度の効果を出すには, 一般により多くの非零が必要
- 対角スケールリング
  - 対角行列  $D_1, D_2$  により  $A \rightarrow D_1^{-1}AD_2^{-1}$  と変換し, 対角要素を1とする
  - 簡単で並列化も容易だが, 問題によっては有効
- 行と列の並べ替え
  - 適当な並べ替えを行った後に不完全LU分解を行うと, 収束性が改善することがある60



# 波束シミュレーション への応用

# 時間依存シュレディンガー方程式とその離散化

- 波束シミュレーションの基礎方程式

- 時間依存シュレディンガー方程式

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = iH\psi$$

- $H$ : エルミート演算子 (ハミルトニアン)
- 以下では簡単のため,  $H$  が  $\psi, t$  に依存しない場合を考える

- 空間離散化

- 差分法



$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = iH\mathbf{x}, \quad H \in \mathbf{R}^{m \times m}, \quad \mathbf{x} \in \mathbf{R}^m$$

以下ではこちらを扱う

- Ritz-Galerkin法 (有限要素法 / 基底関数による展開)

$$\Rightarrow B \frac{d\mathbf{x}}{dt} = iH\mathbf{x}, \quad H, B \in \mathbf{R}^{m \times m}, \quad \mathbf{x} \in \mathbf{R}^m \quad (B: \text{重なり行列})$$

# クランク・ニコルソン法

- 導出

- (1,1)次パデ近似:  $\exp(iH\Delta t) \doteq (I - (1/2)iH\Delta t)^{-1}(I + (1/2)iH\Delta t)$
- 標準的な導出法: 時刻  $t + (1/2)\Delta t$  での中心差分

$$\frac{\mathbf{x}(t + \Delta t) - \mathbf{x}(t)}{\Delta t} = \frac{1}{2} \{iH\psi(t) + iH\psi(t + \Delta t)\}$$

$$\mathbf{x}(t + \Delta t) = \left(I - \frac{1}{2}iH\Delta t\right)^{-1} \left(I + \frac{1}{2}iH\Delta t\right) \mathbf{x}(t).$$

- 特徴

- 時間発展のために連立1次方程式を解くことが必要
- 時間に関して2次精度
- 波動関数のノルムを厳密に保存

- 時間発展演算子の固有値の絶対値は  $\left| \frac{1 + i\epsilon_k \Delta t}{1 - i\epsilon_k \Delta t} \right| = 1.$

シュレディンガー方程式の時間発展の計算に最適

# クランク・ニコルソン法に現れる連立1次方程式

- 方程式

$$\underline{\left( I - \frac{1}{2}iH\Delta t \right) \mathbf{x}(t + \Delta t) = \mathbf{y}, \quad \mathbf{y} = \left( I + \frac{1}{2}iH\Delta t \right) \mathbf{x}(t).}$$

- 係数行列の性質

- 大規模・疎行列・非エルミート
- $i$ 倍すると  $A + \sigma I$  ( $A$ : 正定値エルミート行列,  $\sigma$ : 複素数)の形

- 数値解法

- 直接法: ガウスの消去法(帯行列向け解法, スパースソルバなど)
- 反復法: クリロフ部分空間法(GMRES法, BiCG法など)

係数行列の構造を利用した効率的なアルゴリズムの設計を考える



# $A + \sigma I$ に対するGMRES法

- $A$  のエルミート性を利用

- GMRES法は, クリロフ部分空間  $K_n(A; \mathbf{b}) = \text{span}\{\mathbf{b}, A\mathbf{b}, \dots, A^{n-1}\mathbf{b}\}$  ( $n = 1, 2, \dots$ ) の中で残差を最小にする解を探索
- クリロフ部分空間のシフト不変性  $K_n(A + \sigma I; \mathbf{b}) = K_n(A; \mathbf{b})$  より, エルミート行列  $A$  に対するクリロフ部分空間が使える
- ランチョス法と同様, 直近の3本の基底ベクトルのみを用いて  $K_n(A + \sigma I; \mathbf{b})$  の正規直交基底を生成可能

- 得られる解法の特徴

- 3項間漸化式に基づく解法 → 演算量・メモリ量の負担軽減
- 残差最小性を持つ → スムーズな収束性

- 問題点

- 前処理を行うと, シフト不変性が崩れてしまう
- 前処理なしで, どの程度の収束性が得られるかが鍵



**終わりに**

# 終わりに

- 本発表では, まずクリロフ部分空間とその基底の生成法を説明し, 方程式  $Ax = b$  をクリロフ部分空間に射影する3種類の方法を述べた
- これに基づき, GMRES法, CG法, Bi-CG法の3つのアルゴリズムと, その変種を説明した
- また, 収束を加速させるための前処理法について, 代表的な手法を説明した
- 実際の問題にクリロフ部分空間法を適用するには, 係数行列の分類を検討した後, Lis や PETScなどのパッケージを使って様々な解法・前処理を試してみるのがよい



# 参考文献

# 参考文献

- L. N. Trefethen and D. Bau III: “Numerical Linear Algebra”, SIAM, Philadelphia, 1997.
- H. A. van der Vorst: “Iterative Krylov Methods for Large Linear Systems”, Cambridge University Press, Cambridge, 2003.
- Y. Saad: “Iterative Methods for Sparse Linear Systems”, 2nd Ed., SIAM, Philadelphia, 2003.
- R. Barrett et al.: “Templates for the Solution of Linear Systems: Building Blocks for Iterative Methods”, SIAM, Philadelphia, 1994.
- 藤野清次, 張紹良: “反復法の数理”, 朝倉書店, 1996.
- 杉原正顯, 室田一雄: “線形計算の数理”, 岩波書店, 2009.