

複数右辺ベクトルを持つシフト線形方程式に対する 多項式前処理の有効性の検証

関川 悠太* 二村 保徳* 今倉 暁* 櫻井 鉄也*
* 筑波大学システム情報工学研究科

概要. 複数右辺ベクトルをもつシフト線形方程式の解法として、シフト不変性を利用した Block Krylov 部分空間法に対する多項式前処理について考える。右辺ベクトルが1本の場合、一般に多項式前処理は、計算時間の観点からは必ずしも有効とはいえない。本論文では、多項式前処理が多くの右辺ベクトルをもつシフト線形方程式に対して、計算時間の観点から有効となることを示す。

Polynomial Preconditioner for Linear Systems with Multiple Right-Hand Sides and Multiple Shifts

Yuta Sekikawa* Yasunori Futamura* Akira Imakura* Tetsuya Sakurai*
*Graduate School of Systems and
Information Engineering, University of Tsukuba

Abstract. We consider polynomial preconditioners for block Krylov subspace methods with shift-invariance property for a solver to a shifted linear systems with multiple right-hand sides and multiple shifts. In general, polynomial preconditioner for shifted Krylov subspace methods is not necessarily effective from the viewpoint of calculation time. In this paper, we show that applying polynomial preconditioner to block Krylov subspace methods with shift-invariance property is effective from the viewpoint of calculation time for solving shifted linear systems with multiple right-hand sides and multiple shifts.

1. はじめに

本論文では、以下の式で表される L 本の右辺ベクトルをもつ線形方程式の解法について考える。

$$(1.1) \quad AX = B,$$

$$(1.2) \quad (A + \sigma_j I)X^{\sigma_j} = B, \quad j = 1, 2, \dots, M.$$

ここで、 $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$, $X, X^{\sigma_j}, B \in \mathbb{C}^{n \times L}$, $\sigma_j \in \mathbb{C}$ であり、 I は n 次の単位行列である。また A は疎行列であり、 L は n に比べ十分小さいとする。式 (1.1) はシード方程式、式 (1.2) はシフト方程式と呼ばれる。この問題は第一原理電子状態計算や周回積分型固有値解法の部分問題、格子量子色力学などに現れる。これらの分野では大規模な線形方程式を求解する必要があり、式 (1.1), (1.2) の求解がボトルネックとなる。したがって式 (1.1), (1.2) を高速

に解くことが求められる。

式 (1.1), (1.2) を求解する最も単純な方法として, 各右辺ベクトル, 各シフト方程式についてそれぞれ Krylov 部分空間法 [11] を適用して方程式を一つずつ求解する方法が考えられる。この場合には $L \times (M + 1)$ 個の方程式を解く必要がある。また Block Krylov 部分空間 [16] のシフト不変性を利用した Shifted Block Krylov 部分空間法を用いることが考えられる。それにより各右辺ベクトル, 各シフト方程式をまとめて扱うことができ, 方程式を一つずつ求解する方法に比べて効率が良くなる場合がある。このような解法として Shifted Block CG 法 [3] や Shifted Block BiCGStab(ℓ) 法 [12] などが提案されている。

Krylov 部分空間法で線形方程式を求解する際, 収束性を高めるために前処理 [11] を適用する場合がある。一般的にはシフト不変性を利用した解法に前処理を適用することは困難であるが, 適用が可能な前処理として Shift-and-Invert 前処理 [1], 多項式前処理 [1], Flexible 前処理 [2] などが提案されている。本論文では多項式処理をとりあげる。

多項式前処理では, ベクトルへの前処理行列の作用を疎行列ベクトル積, スカラーベクトル積, ベクトル同士の和という 3 種類の演算のみで計算することができる。シフト線形方程式を求解するのに, 短い漸化式による Krylov 部分空間法のように, 計算時間において疎行列ベクトル積の占める割合が大きい解法を用いると, 全体の求解時間に対する多項式前処理の計算時間の占める割合が大きくなる。このため, 前処理により収束性を改善しても一般には全体の求解時間は増加してしまうため, 計算時間の観点からは必ずしも有効であるとは言えない。それに比べて, 複数の右辺ベクトルに対するシフト線形方程式を Shifted Block Krylov 部分空間法でまとめて求解するならば, 求解時間全体に対する疎行列ベクトル積の計算時間の占める割合を小さくできる。したがって, Shifted Block Krylov 部分空間法に多項式前処理を適用することで, 全体での求解時間の削減が期待される。

そこで, 本研究では, 式 (1.1), (1.2) を求解するため, 多項式前処理を Shifted Block Krylov 部分空間法と組み合わせ, 数値実験によりその有効性を検証するシフトが複素数であるシフト線形方程式の求解に用いる Shifted Block Krylov 部分空間法としては, 係数行列が実または複素対称である場合にはその性質を利用した Shifted Block COCG 法を用い, 係数行列が非対称行列である場合には Shifted Block BiCGStab 法を用いることとする。

本論文は次のような構成になっている。第 2 節では Block Krylov 部分空間とそのシフト不変性, Shifted Block COCG 法および Shifted Block BiCGStab 法について述べる。第 3 節ではシフト線形方程式のための前処理とその具体例として多項式前処理について述べる。第 4 節では多項式前処理を Shifted Block Krylov 部分空間反復法に適用する方法を述べる。第 5 節ではいくつかの数値実験により, 計算時間, 近似解の精度について考察する。第 6 節では, 本研究の結論および今後の課題を述べる。

本論文では以下の定義および記号を用いる。Frobenius ノルムを $\|\cdot\|_F$, n 次元の単位行列を I_n , $n \times m$ の零行列を $O_{n \times m}$ と表す。行列 $V \in \mathbb{C}^{n \times m}$ を $Q \in \mathbb{C}^{n \times m}$, $R \in \mathbb{C}^{m \times m}$ を用いて $V = QR$ と QR 分解する操作を $[Q, R] = \text{qr}(V)$ と表す。ここで $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ を疎行列,

$X, Y \in \mathbb{C}^{n \times m}$ および $\alpha \in \mathbb{C}^{m \times m}$ を密行列とする. また $a \in \mathbb{C}$ とする. このとき AX を Block SpMV, $X + Y\alpha$ を Block AXPY, $X + aY$ を Block Sum と呼ぶ.

2. Shifted Block Krylov 部分空間反復法

本節では, Block Krylov 部分空間のシフト不変性およびそれを利用した解法である Shifted Block Krylov 部分空間法について述べる.

行列 A および行列 $V = [v_1, v_2, \dots, v_L] \in \mathbb{C}^{n \times L}$ の積によって構成される以下の空間を Block Krylov 部分空間と呼ぶ.

$$(2.1) \quad \mathcal{K}_k(A, V) = \text{range}([V, AV, \dots, A^{k-1}V]).$$

式 (1.1) の初期解を X_0 , 初期残差を $R_0 = B - AX_0$, 式 (1.2) の初期解を $X_0^{\sigma_j}$, 初期残差を $R_0^{\sigma_j} = B - (A + \sigma_j I)X_0^{\sigma_j}$ とする. ここで, $\mathcal{K}_k(A, R_0)$, $\mathcal{K}_k(A + \sigma_j I, R_0^{\sigma_j})$ について, ある正則な行列 $\xi_0^{\sigma_j} \in \mathbb{C}^{L \times L}$ を用いて, $R_0^{\sigma_j} = R_0(\xi_0^{\sigma_j})^{-1}$ と表せるとき, 以下の関係が成り立つ.

$$(2.2) \quad \mathcal{K}_k(A, R_0) = \mathcal{K}_k(A + \sigma_j I, R_0^{\sigma_j}).$$

この関係を Block Krylov 部分空間のシフト不変性と呼ぶ. この関係から, 残差行列 R_k と $R_k^{\sigma_j}$ は以下の関係をもつことが導ける.

$$(2.3) \quad R_k^{\sigma_j} = R_k(\xi_k^{\sigma_j})^{-1}, \quad \xi_k^{\sigma_j} \in \mathbb{C}^{L \times L}.$$

次に Shifted Block Krylov 部分空間法として, Shifted Block COCG 法および Shifted Block BiCGStab 法について述べる.

2.1 Shifted Block COCG 法

Block Krylov 部分空間法の一つである Block COCG 法 [15] をシフト線形方程式向けに拡張した解法が, Shifted Block COCG 法である. Shifted Block COCG 法は複素対称行列 $A = A^T \in \mathbb{C}^{n \times n} (A \neq A^H)$ を係数行列にもち, かつ複数の右辺ベクトルをもつシフト線形方程式のための解法である.

Block Krylov 部分空間法では, 右辺ベクトルの数が増えると, 収束性や近似解の精度に問題が生じる場合があることが知られている. 改善策として補助行列や残差行列を反復毎に直交化する方法が提案されている [4]. Algorithm 1 に残差行列 R を Hermite 正規直交化する Shifted Block COCG 法のアルゴリズムを示す. ここで $Q_k \in \mathbb{C}^{n \times L}$ は列 Hermite 正規直交行列であり, $Q_k^H Q_k = I_L$ であるが, $Q_k^T Q_k \neq I_L$ である点に注意する.

Algorithm 1 Shifted Block COCG**Input:** $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$, $B \in \mathbb{C}^{n \times L}$, $\sigma_j \in \mathbb{C}$ ($j = 1, 2, \dots, M$)**Output:** $X_k \in \mathbb{C}^{n \times L}$, $X_k^{\sigma_j} \in \mathbb{C}^{n \times L}$ ($j = 1, 2, \dots, M$) $\mathbb{C}^{n \times L}$: $P_k, P_k^{\sigma_j}, Q_k, R_k$ $\mathbb{C}^{L \times L}$: $I_L, \alpha_k, \alpha_k^{\sigma_j}, \beta_k, \beta_k^{\sigma_j}, \delta_k, \rho_k, \xi_k^{\sigma_j}, \zeta_k^{\sigma_j}$

- 1: Initial guess $X_0 = X_0^{\sigma_j} = O_{n \times L}$, and compute $R_0 = B - AX_0$
- 2: $[Q_0, \rho_0] = \text{qr}(R_0)$
- 3: Set $P_0 = Q_0$, $\alpha_{-1} = \beta_{-1} = O_{L \times L}$
- 4: Set $P_0^{\sigma_j} = Q_0$, $(\xi_0^{\sigma_j})^{-1} = \zeta_0^{\sigma_j} = \rho_0$, $j = 1, 2, \dots, M$
- 5: **for** $k = 0, 1, \dots$, until convergence do :
- 6: $\alpha_k = (P_k^T A P_k)^{-1} (Q_k^T Q_k)$
- 7: $X_{k+1} = X_k + P_k \alpha_k \rho_k$
- 8: $[Q_{k+1}, \delta_{k+1}] = \text{qr}(Q_k - A P_k \alpha_k)$
- 9: $\rho_{k+1} = \delta_{k+1} \rho_k$
- 10: $\beta_k = (Q_k^T Q_k)^{-1} \delta_{k+1}^T (Q_{k+1}^T Q_{k+1})$
- 11: $P_{k+1} = Q_{k+1} + P_k \beta_k$
- 12: **for** $j = 1, 2, \dots, M$:
- 13: $\zeta_{k+1}^{\sigma_j} = \delta_{k+1} [I_L + \sigma_j \alpha_k + \delta_k \alpha_{k-1}^{-1} \beta_{k-1} \alpha_k - \zeta_k^{\sigma_j} \alpha_{k-1}^{-1} \beta_{k-1} \alpha_k]^{-1}$
- 14: $(\xi_{k+1}^{\sigma_j})^{-1} = \zeta_{k+1}^{\sigma_j} (\xi_k^{\sigma_j})^{-1}$
- 15: $\alpha_k^{\sigma_j} = \alpha_k \delta_{k+1}^{-1} (\zeta_{k+1}^{\sigma_j})^{-1}$
- 16: $X_{k+1}^{\sigma_j} = X_k^{\sigma_j} + P_k^{\sigma_j} \alpha_k^{\sigma_j}$
- 17: $\beta_k^{\sigma_j} = \alpha_k^{\sigma_j} \xi_k^{\sigma_j} \alpha_k^{-1} \beta_k$
- 18: $P_{k+1}^{\sigma_j} = Q_{k+1} + P_k^{\sigma_j} \beta_k^{\sigma_j}$
- 19: **end for**
- 20: if $\max(\|\rho_{k+1}\|_F, \|(\xi_{k+1}^{\sigma_j})^{-1}\|_F) \leq \text{tol}$ break
- 21: **end for**

2.2 Shifted Block BiCGStab 法

Block Krylov 部分空間法の一つである Block BiCG 法 [6] の収束性を加速多項式を用いて改良した解法が Block BiCGStab 法 [5] であり, さらに Block BiCGStab 法をシフト線形方程式向けに拡張した解法が, Shifted Block BiCGStab 法である. Shifted Block BiCGStab 法は非対称行列を係数行列にもち, かつ複数の右辺ベクトルをもつシフト線形方程式のための解法である. 収束性や近似精度の面から Shifted Block COCG 法と同様に, Shifted Block BiCGStab 法に対しても直交化が必要である. . . 残差行列 R および補助行列 P を直交化する Shifted Block BiCGStab 法のアルゴリズムを Algorithm 2 に示す.

Algorithm 2 Shifted Block BiCGStab**Input:** $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$, $B \in \mathbb{C}^{n \times L}$, $\sigma_j \in \mathbb{C}$ ($j = 1, 2, \dots, M$)**Output:** $X_k \in \mathbb{C}^{n \times L}$, $X_k^{\sigma_j} \in \mathbb{C}^{n \times L}$ ($j = 1, 2, \dots, M$) \mathbb{C} : $\omega_k, \omega_k^{\sigma_j}, \tau_k^{\sigma_j}$ $\mathbb{C}^{n \times L}$: $P_k, P_k^{\sigma_j} Q_k^{(P)}, Q_k^{(R)}, \tilde{R}_k, S_k, X_k, X_k^{\sigma_j}$ $\mathbb{C}^{L \times L}$: $I_L, \alpha_k, \alpha_k^{\sigma_j}, \beta_k, \beta_k^{\sigma_j}, \delta_k, \rho_k^{(P)}, \rho_k^{(R)}, \xi_k^{\sigma_j}, \zeta_k^{\sigma_j}$

- 1: Initial guess $X_0 = X_0^{\sigma_j} = O_{n \times L}$, and compute $R_0 = B - AX_0$
- 2: $[Q_0^{(R)}, \rho_0^{(R)}] = \text{qr}(R_0)$
- 3: Set $Q_0^{(P)} = Q_0^{(R)}$, $\rho_0^{(P)} = I_L$, $\alpha_{-1} = \beta_{-1} = O_{L \times L}$
- 4: Set $P_0^{\sigma_j} = Q_0^{(R)}$, $(\xi_0^{\sigma_j})^{-1} = \zeta_0^{\sigma_j} = \rho_0^{(R)}$, $\tau_0^{\sigma_j} = 1$, $j = 1, 2, \dots, M$
- 5: Choose $\tilde{R}_0 \in \mathbb{C}^{n \times L}$
- 6: **for** $k = 0, 1, \dots$, until convergence do :
 - 7: $\alpha_k = (\tilde{R}_0^H A Q_k^{(P)})^{-1} (\tilde{R}_0^H Q_k^{(R)})$
 - 8: $S_k = Q_k^{(R)} - A Q_k^{(P)} \alpha_k$
 - 9: $\omega_k = \text{Tr}[(\rho_k^{(R)})^H \{(AS_k)^H S_k\} \rho_k^{(R)}] / \text{Tr}[(\rho_k^{(R)})^H \{(AS_k)^H AS_k\} \rho_k^{(R)}]$
 - 10: $X_{k+1} = X_k + (P_k \alpha_k + \omega_k S_k) \rho_k^{(R)}$
 - 11: $[Q_{k+1}^{(R)}, \delta_{k+1}] = \text{qr}(S_k - \omega_k AS_k)$
 - 12: $\rho_{k+1}^{(R)} = \delta_{k+1} \rho_k^{(R)}$
 - 13: $\beta_k = -(\tilde{R}_0^H A Q_k^{(P)})^{-1} (\tilde{R}_0^H AS_k) \delta_{k+1}^{-1}$
 - 14: $[Q_{k+1}^{(P)}, \rho_{k+1}^{(P)}] = \text{qr}(Q_{k+1}^{(R)} + (Q_k^{(P)} - \omega_k A Q_k^{(P)}) \beta_k)$
 - 15: **for** $j = 1, 2, \dots, M$:
 - 16: $\zeta_{k+1}^{\sigma_j} = \delta_{k+1} [I_L + (\sigma_j I_L + \delta_k \alpha_{k-1}^{-1} \beta_{k-1} - \zeta_k^{\sigma_j} \alpha_{k-1}^{-1} \beta_{k-1}) (\rho_k^{(P)})^{-1} \alpha_k]^{-1}$
 - 17: $(\xi_{k+1}^{\sigma_j})^{-1} = \zeta_{k+1}^{\sigma_j} (\xi_k^{\sigma_j})^{-1}$
 - 18: $\omega_k^{\sigma_j} = \frac{\omega_k}{1 + \omega_k \sigma_j}$
 - 19: $\tau_{k+1}^{\sigma_j} = \frac{1}{1 + \omega_k \sigma_j} \tau_k^{\sigma_j}$
 - 20: $\alpha_k^{\sigma_j} = (\rho_k^{(P)})^{-1} \alpha_k \delta_{k+1}^{-1} (\xi_{k+1}^{\sigma_j})^{-1}$
 - 21: $X_{k+1}^{\sigma_j} = X_k^{\sigma_j} + P_k^{\sigma_j} \alpha_k^{\sigma_j} + \omega_k^{\sigma_j} \tau_k^{\sigma_j} S_k \delta_{k+1}^{-1} (\xi_{k+1}^{\sigma_j})^{-1}$
 - 22: $\beta_k^{\sigma_j} = \alpha_k^{\sigma_j} \xi_k^{\sigma_j} \alpha_k^{-1} \beta_k (\xi_{k+1}^{\sigma_j})^{-1}$
 - 23: $P_{k+1}^{\sigma_j} = \tau_{k+1}^{\sigma_j} Q_{k+1}^{(R)} + [P_k^{\sigma_j} + \omega_k^{\sigma_j} \tau_k^{\sigma_j} \{S_k \delta_{k+1}^{-1} \zeta_{k+1}^{\sigma_j} - Q_k^{(R)}\} (\xi_k^{\sigma_j})^{-1} (\alpha_k^{\sigma_j})^{-1}] \beta_k^{\sigma_j}$
 - 24: **end for**
 - 25: if $\max(\|\rho_{k+1}\|_F, |\tau_{k+1}^{\sigma_j}| \|(\xi_{k+1}^{\sigma_j})^{-1}\|_F) \leq \text{tol}$ break
 - 26: **end for**

3. シフト線形方程式のための前処理

本節ではシフト線形方程式のための前処理について述べ、その具体例として多項式前処理について述べる。

式 (1.1), (1.2) を解く代わりに正則な前処理行列 K , $K^{\sigma_j} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ を適用した, 以下の方程式を解くことを考える.

$$(3.1) \quad AKY = B, \quad X = KY,$$

$$(3.2) \quad (A + \sigma_j I)K^{\sigma_j}Y^{\sigma_j} = B, \quad X^{\sigma_j} = K^{\sigma_j}Y^{\sigma_j}, \quad j = 1, 2, \dots, M.$$

ここで $Y, Y^{\sigma_j} \in \mathbb{C}^{n \times L}$ である. シフト線形方程式の前処理ではシフト不変性を利用するため, 式 (3.1), (3.2) に関する Block Krylov 部分空間を一致させるように K, K^{σ_j} を決定する必要がある.

$$(3.3) \quad \mathcal{K}_k(AK, R_0) = \mathcal{K}_k((A + \sigma_j I)K^{\sigma_j}, R_0^{\sigma_j}).$$

このためには, 以下の式を満たすように K, K^{σ_j} を決定すればよい.

$$(3.4) \quad (A + \sigma_j I)K^{\sigma_j} = AK + \eta_j I, \quad \eta_j \in \mathbb{C}.$$

3.1 多項式前処理

多項式前処理 [1, 11] は以下のように行列 A の多項式で前処理行列を構成する方法である.

$$(3.5) \quad p_m(A) = \sum_{i=0}^m \gamma_i A^i, \quad \gamma_i \in \mathbb{C}, \quad i = 0, 1, \dots, m.$$

式 (3.4) を満たす前処理行列 K, K^{σ_j} が構成できることを示す. 前処理行列を $K = p_m(A) = \sum_{i=0}^m \gamma_i A^i$, $K^{\sigma_j} = p_m^{\sigma_j}(A) = \sum_{i=0}^m \gamma_i^{\sigma_j} A^i$ とすると, 式 (3.4) は以下ようになる.

$$(3.6) \quad (A + \sigma_j I) \sum_{i=0}^m \gamma_i^{\sigma_j} A^i = A \sum_{i=0}^m \gamma_i A^i + \eta_j I.$$

展開して整理すると以下ようになる.

$$(3.7) \quad \sigma_j \gamma_0^{\sigma_j} I - \eta_j I + \gamma_m^{\sigma_j} A^{m+1} - \gamma_m A^{m+1} + \sum_{i=1}^m (\sigma_j \gamma_i^{\sigma_j} + \gamma_{i-1}^{\sigma_j} - \gamma_{i-1}) A^i = O_{n \times n}.$$

式 (3.7) が A によらずに成立するならば, 左辺の A についての多項式の各次の係数は零になることから, $\gamma_i^{\sigma_j}, \eta_j$ は以下の (3.8) の中の各式を順に右辺を計算して左辺に代入することで求めることができる.

$$(3.8) \quad \begin{aligned} \gamma_m^{\sigma_j} &= \gamma_m, \\ \gamma_{i-1}^{\sigma_j} &= \gamma_{i-1} - \sigma_j \gamma_i^{\sigma_j}, \quad i = m, m-1, \dots, 1, \\ \eta_j &= \sigma_j \gamma_0^{\sigma_j}. \end{aligned}$$

シフト方程式の前処理行列多項式の係数 $\gamma_i^{\sigma_j}, i = 0, 1, \dots, m$ および η_j は, シード方程式の前処理行列多項式の係数 $\gamma_i, i = 0, 1, \dots, m$ およびシフト点 σ_j に依存して決定されることがわかる.

3.2 漸化式による多項式前処理の計算方法

多項式前処理では前処理行列 $p_m(A)$ を陽に生成する必要はなく、ベクトル $\mathbf{v} \in \mathbb{C}^n$ への作用 $p_m(A)\mathbf{v}$ を漸化式を用いて以下のように計算することができる..

$$(3.9) \quad p_i(A)\mathbf{v} = Ap_{i-1}(A)\mathbf{v} + \gamma_{m-i}\mathbf{v}, \quad i = 0, 1, \dots, m.$$

ただし $p_{-1}(A)\mathbf{v} = \mathbf{0}$ である。したがって、多項式前処理は行列ベクトル積、ベクトルの和、スカラーベクトル積の3種類の演算を用いて計算できる。

ここでは Chebyshev 多項式 [1] と Neumann 多項式 [11] を例に具体的な漸化式を示す。

Chebyshev 多項式や Neumann 多項式では、式 (3.8) を用いて係数を個別に計算する必要はなく、多項式の計算と同時に漸化式で計算することができる。また各種多項式前処理では多項式を構成する行列 A の固有値分布に制約があるため、行列 A の多項式を生成する代わりに、スケーリングパラメータ w とシフトパラメータ μ を用いて $\tilde{A} \equiv \hat{A} + \mu I$ ($\hat{A} \equiv (1/w)A$) の多項式を生成する。シフトとスケーリングを行って得られた行列 \tilde{A} の Chebyshev 多項式を用いた前処理は以下の (3.10) の漸化式で与えられる。

$$(3.10) \quad \begin{aligned} p_i(\tilde{A}) &= a_{i+1}(I - \hat{A}p_{i-1}(\tilde{A})) + (1 - a_{i+1}\mu)p_{i-1}(\tilde{A}), \\ p_i^{\sigma_j}(\tilde{A}) &= a_{i+1}(I - \hat{A}p_{i-1}(\tilde{A})) + (1 - a_{i+1}(\mu - \sigma_j))p_{i-1}^{\sigma_j}(\tilde{A}), \\ \eta_{j,i} &= a_{i+1}\sigma_j + (1 - a_{i+1}(\mu - \sigma_j))\eta_{j,i-1}, \end{aligned} \quad i = 0, 1, \dots, m.$$

ここで $p_{-1}(\tilde{A}) = O_{n \times n}$, $p_{-1}^{\sigma_j}(\tilde{A}) = O_{n \times n}$, $\eta_{j,-1} = 0$ である。 a_i は Chebyshev ノードであり、以下の式 (3.11) を用いて計算する。

$$(3.11) \quad \begin{aligned} a_i &= \frac{2}{v + \ell - (v - \ell)\cos(\pi b_i)}, \\ b_i &= \frac{2i - 1}{2(m + 1)}, \end{aligned} \quad i = 1, 2, \dots, m + 1.$$

ここで ℓ と v はそれぞれ、 \tilde{A} の固有値が複素平面上で一直線に並ぶ場合ではその固有値分布の下端と上端とする。その他の場合ではすべての固有値を包含する楕円の二つの焦点とする。

シフト、スケールを行った Neumann 多項式前処理の漸化式は以下のようになる。

$$(3.12) \quad \begin{aligned} p_i(\tilde{A}) &= 1 - \hat{A}p_{i-1}(\tilde{A}) + (1 - \mu)p_{i-1}(\tilde{A}), \\ p_i^{\sigma_j}(\tilde{A}) &= 1 - \hat{A}p_{i-1}(\tilde{A}) + (1 - \mu + \sigma_j)p_{i-1}^{\sigma_j}(\tilde{A}), \\ \eta_{j,i} &= \sigma_j + (1 - \mu + \sigma_j)\eta_{j,i-1}, \end{aligned} \quad i = 0, 1, \dots, m.$$

ここで $p_{-1}(\tilde{A}) = O_{n \times n}$, $p_{-1}^{\sigma_j}(\tilde{A}) = O_{n \times n}$, $\eta_{j,-1} = 0$ である。

前処理行列の作用を具体的に計算する方法を Algorithm 3 に示す。このように計算することで、前処理行列 $K = p_m(A)$ や $K^{\sigma_j} = p_m^{\sigma_j}(A)$ を構成することなく残差行列あるいは補

Algorithm 3 Application part of polynomial preconditioner

-
- 1: Let $F \in \mathbb{C}^{n \times L}$ be a residual matrix or auxiliary matrix. (For Chebyshev polynomial preconditioner, a_i is a Chebyshev node. For Neumann polynomial preconditioner, all $a_i = 1$.)
 ——Seed part——
 - 2: $G_0 = a_1 F$
 - 3: Store intermediate result $T_0 = G_0$
 - 4: **for** $i = 1, 2, \dots, m$:
 - 5: Store intermediate result $T_i = a_{i+1}(F - AG_{i-1})$
 - 6: $G_i = T_i + (1 - \mu a_{i+1})G_{i-1}$
 - 7: **end for**
 ——Shift part——
 - 8: $G_0^{\sigma_j} = T_0$
 - 9: **for** $i = 1, 2, \dots, m$:
 - 10: $G_i^{\sigma_j} = T_i + (1 - a_i(\mu - \sigma_j))G_{i-1}^{\sigma_j}$
 - 11: **end for**
-

助行列の F に乗じた作用の結果である $G_m = KF$ あるいは $G_m^{\sigma_j} = K^{\sigma_j}F$ を求めることができる。

4. 多項式前処理付き Shifted Block Krylov 部分空間反復法

本節では多項式前処理付き Shifted Block Krylov 部分空間反復法のアルゴリズムについて述べる。また、そのパラメータの推定法について述べる。

4.1 多項式前処理付き Shifted Block COCG 法および多項式前処理付き Shifted Block BiCGStab 法

多項式前処理付き Shifted Block COCG 法では多項式前処理行列 $p_m(A)$ あるいは $p_m^{\sigma_j}(A)$ を残差行列 R_k に掛けることで前処理を実現する。

$$(4.1) \quad \begin{aligned} R_{k+1} &\rightarrow Z_{k+1} = p_m(A)R_{k+1}, \\ &\rightarrow Z_{k+1}^{\sigma_j} = p_m^{\sigma_j}(A)R_{k+1}. \end{aligned}$$

多項式前処理行列の R_{k+1} への作用の実際の計算には、Algorithm 3 を用いる。Algorithm 1 をもとにした多項式前処理付き Shifted Block COCG 法のアルゴリズムを、Algorithm 4 に示す。

多項式前処理付き Shifted Block BiCGStab 法では残差行列 R_{k+1} 、補助行列 S_k 、行列

AP_k に多項式前処理行列 $p_m(A)$ や $p_m^{\sigma_j}(A)$ を掛けることで前処理を実現する (以下の式 (4.2) を参照).

$$\begin{aligned}
 R_{k+1} &\rightarrow Z_{k+1} = p_m(A)R_{k+1}, \\
 &\rightarrow Z_{k+1}^{\sigma_j} = p_m^{\sigma_j}(A)R_{k+1}, \\
 S_k &\rightarrow W_k = p_m(A)S_k, \\
 &\rightarrow W_k^{\sigma_j} = p_m^{\sigma_j}(A)S_k, \\
 AP_k &\rightarrow V_k = p_m(A)AP_k.
 \end{aligned}
 \tag{4.2}$$

実際の計算では前処理行列の R_{k+1} , S_k , AP_k への作用には, Algorithm 3 を用いる. また V_k は以下のように計算することができる.

$$(4.3) \quad V_k = p_m(A)AP_k = (p_m(A)R_k - p_m(A)S_k)\alpha_k^{-1} = (Z_k - W_k)\alpha_k^{-1}.$$

Algorithm 2 をもとにした多項式前処理付き Shifted Block BiCGStab 法のアルゴリズムを, Algorithm 5 に示す.

次に各種解法の計算量について述べる. Table 1 と Table 2 にそれぞれ (前処理付き)Shifted Block COCG と (前処理付き)Shifted Block BiCGStab の一反復の中で特に計算量の大きい, Block SpMV, Block AXPY, Block Sum について示す. Table 1 および Table 2 より, 多項式前処理付きの場合では前処理なしの場合に比べ, Block SpMV の回数が $m+1$ 倍になっており, Block sum の回数も増加していることが分かる. 一方 Block AXPY の回数は, 多項式前処理付き Shifted Block BiCGStab 法のシード方程式求解部分で, V_k の計算のために, Block AXPY が 1 回増加するが, その他の部分では変化しない. ここで Block SpMV や Block sum の計算量は L に比例し, Block AXPY の計算量は L^2 に比例する. したがって, L が大きく, またシフトの数が多い場合は, 多項式前処理の適用による 1 反復あたりの計算量増加が相対的に小さくなるため, 前処理による反復回数の減少が, 計算時間の減少に寄与しやすくなる.

4.2 パラメータの推定

式 (3.10) で計算される Chebyshev 多項式前処理では, \tilde{A} のすべての固有値の実部が正である必要がある. また式 (3.12) で計算される Neumann 多項式前処理では $I - \tilde{A}$ のスペクトル半径が 1 未満である必要がある. したがってこの条件を満たすようにスケーリングパラメータとシフトパラメータを決定する必要がある. また Chebyshev 多項式ではパラメータとして, 多項式を構成する行列の固有値が複素平面上で一直線に並ぶ場合では, その固有値分布の両端を, その他の場合では, すべての固有値を包含する楕円の焦点を与える必要がある.

固有値の存在範囲は Gershgorin の定理を用いて求めることができる. また Lanczos 法や Arnoldi 法により近似的に推定された固有値分布を用いてパラメータを決定する方法が

Table 1. Main arithmetic count per iteration of Shifted Block COCG and Preconditioned Shifted Block COCG. n is the matrix size. nnz is the number of nonzero elements. L is the block size. M is the number of shift points. m is the polynomial degree. (Cheby) and (Neum) mean the Chebyshev polynomial preconditioner and the Neumann polynomial preconditioner.

	Shifted Block COCG		Preconditioned Shifted Block COCG	
	Seed part	Shift part	Seed part	Shift part
Block SpMV	$2(\text{nnz})L$	0	$2(m+1)(\text{nnz})L$	0
Block AXPY	$4nL^2$	$4nML^2$	$4nL^2$	$4nML^2$
Block sum	0	0	$4mnL$ (Cheby) $3mnL$ (Neum)	$2mnML$

Table 2. Main arithmetic count per iteration of Shifted Block BiCGStab and Preconditioned Shifted Block BiCGStab. n is matrix size. nnz is number of nonzero elements. L is block size. M is number of shift point. m is polynomial degree. (Cheby) and (Neum) mean the Chebyshev polynomial preconditioner and the Neumann polynomial preconditioner.

	Shifted Block BiCGStab		Preconditioned Shifted Block BiCGStab	
	Seed part	Shift part	Seed part	Shift part
Block SpMV	$4(\text{nnz})L$	0	$4(m+1)(\text{nnz})L$	0
Block AXPY	$8nL^2$	$10nML^2$	$10nL^2$	$10nML^2$
Block sum	$4nL$	$2nML$	$(5+8m)nL$ (Cheby) $(5+6m)nL$ (Neum)	$(2+4m)nML$

示されている [7,8]. 楕円の推定には文献 [10] に示されている Khachiyan 法を用いることができる.

推定された行列 A の固有値分布を用いて, A からシフトとスケールで \tilde{A} を作ると, その固有値を任意の範囲に納めることができる. 行列 \tilde{A} の固有値の範囲によって多項式前処理の性能は変わるため, 範囲を適切に決める必要がある.

Algorithm 4 Preconditioned shifted block COCG**Input:** $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$, $B \in \mathbb{C}^{n \times L}$, $\sigma_j \in \mathbb{C}$ ($j = 1, 2, \dots, M$)**Output:** $X_k \in \mathbb{C}^{n \times L}$, $X_k^{\sigma_j} \in \mathbb{C}^{n \times L}$ ($j = 1, 2, \dots, M$) $\mathbb{C}^{n \times L}$: $P_k, P_k^{\sigma_j}, Q_k, R_k, X_k, X_k^{\sigma_j}, Z_k, Z_k^{\sigma_j}$ $\mathbb{C}^{L \times L}$: $I_L, \alpha_k, \alpha_k^{\sigma_j}, \beta_k, \beta_k^{\sigma_j}, \delta_k, \rho_k, \xi_k^{\sigma_j}, \zeta_k^{\sigma_j}$

- 1: Initial guess $X_0 = X_0^{\sigma_j} = O_{n \times L}$, and compute $R_0 = B - AX_0$
- 2: $[Q_0, \rho_0] = \text{qr}(R_0)$
- 3: Compute $Z_0 = p_m(A)Q_0$, and set $P_0 = Z_0$, $\alpha_{-1} = \beta_{-1} = O_{L \times L}$
- 4: Compute $Z_0^{\sigma_j} = p_m^{\sigma_j}(A)Q_0$, and set $P_0^{\sigma_j} = Z_0^{\sigma_j}$, $(\xi_0^{\sigma_j})^{-1} = \zeta_0^{\sigma_j} = \rho_0$, $j = 1, 2, \dots, M$
- 5: **for** $k = 0, 1, \dots$, until convergence do :
 - 6: $\alpha_k = (P_k^T A P_k)^{-1} (Z_k^T Q_k)$
 - 7: $X_{k+1} = X_k + P_k \alpha_k \rho_k$
 - 8: $[Q_{k+1}, \delta_{k+1}] = \text{qr}(Q_k - A P_k \alpha_k)$
 - 9: $\rho_{k+1} = \delta_{k+1} \rho_k$
 - 10: $Z_{k+1} = p_m(A)Q_{k+1}$
 - 11: $\beta_k = (Z_k^T Q_k)^{-1} \delta_{k+1}^T (Z_{k+1}^T Q_{k+1})$
 - 12: $P_{k+1} = Z_{k+1} + P_k \beta_k$
 - 13: **for** $j = 1, 2, \dots, M$:
 - 14: $\zeta_{k+1}^{\sigma_j} = \delta_{k+1} [I_L + \eta_j \alpha_k + \delta_k \alpha_{k-1}^{-1} \beta_{k-1} \alpha_k - \zeta_k^{\sigma_j} \alpha_{k-1}^{-1} \beta_{k-1} \alpha_k]^{-1}$
 - 15: $(\xi_{k+1}^{\sigma_j})^{-1} = \zeta_{k+1}^{\sigma_j} (\xi_k^{\sigma_j})^{-1}$
 - 16: $\alpha_k^{\sigma_j} = \alpha_k \delta_{k+1}^{-1} (\xi_{k+1}^{\sigma_j})^{-1}$
 - 17: $X_{k+1}^{\sigma_j} = X_k^{\sigma_j} + P_k^{\sigma_j} \alpha_k^{\sigma_j}$
 - 18: $\beta_k^{\sigma_j} = \alpha_k^{\sigma_j} \xi_k^{\sigma_j} \alpha_k^{-1} \beta_k$
 - 19: $Z_{k+1}^{\sigma_j} = p_m^{\sigma_j}(A)Q_{k+1}$
 - 20: $P_{k+1}^{\sigma_j} = Z_{k+1}^{\sigma_j} + P_k^{\sigma_j} \beta_k^{\sigma_j}$
 - 21: **end for**
 - 22: if $\max(\|\rho_{k+1}\|_F, \|(\xi_{k+1}^{\sigma_j})^{-1}\|_F) \leq \text{tol}$ break
 - 23: **end for**

Algorithm 5 Preconditioned shifted block BiCGStab**Input:** $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$, $B \in \mathbb{C}^{n \times L}$, $\sigma_j \in \mathbb{C}$ ($j = 1, 2, \dots, M$)**Output:** $X_k \in \mathbb{C}^{n \times L}$, $X_k^{\sigma_j} \in \mathbb{C}^{n \times L}$ ($j = 1, 2, \dots, M$) \mathbb{C} : $\omega_k, \omega_k^{\sigma_j}, \tau_k^{\sigma_j}$ $\mathbb{C}^{n \times L}$: $P_k, P_k^{\sigma_j}, Q_k^{(P)}, Q_k^{(R)}, \tilde{R}_k, S_k, V_k, W_k, W_k^{\sigma_j}, X_k, X_k^{\sigma_j}, Z_k, Z_k^{\sigma_j}$ $\mathbb{C}^{L \times L}$: $I_L, \alpha_k, \alpha_k^{\sigma_j}, \beta_k, \beta_k^{\sigma_j}, \delta_k, \rho_k^{(P)}, \rho_k^{(R)}, \xi_k^{\sigma_j}, \zeta_k^{\sigma_j}$ 1: Initial guess $X_0 = X_0^{\sigma_j} = O_{n \times L}$, and compute $R_0 = B - AX_0$ 2: $[Q_0^{(R)}, \rho_0^{(R)}] = \text{qr}(R_0)$ 3: Compute $Z_0 = p_m(A)Q_0^{(R)}$, $[Q_0^{(P)}, \rho_0^{(P)}] = \text{qr}(Z_0)$, and set $\alpha_{-1} = \beta_{-1} = O_{L \times L}$ 4: Compute $Z_0^{\sigma_j} = p_m^{\sigma_j}(A)Q_0^{(R)}$, and set $P_0^{\sigma_j} = Z_0^{\sigma_j}$,

$$(\xi_0^{\sigma_j})^{-1} = \zeta_0^{\sigma_j} = \rho_0^{(R)}, \quad \tau_0^{\sigma_j} = 1, \quad j = 1, 2, \dots, M$$

5: Set $\tilde{R}_0 = Z_0$ 6: **for** $k = 0, 1, \dots$, until convergence do :7: $\alpha_k = (\tilde{R}_0^H A Q_k^{(P)})^{-1} (\tilde{R}_0^H Q_k^{(R)})$ 8: $S_k = Q_k^{(R)} - A Q_k^{(P)} \alpha_k$ 9: $W_k = p_m(A)S_k$ 10: $\omega_k = \text{Tr}[(\rho_k^{(R)})^H \{(AW_k)^H S_k\} \rho_k^{(R)}] / \text{Tr}[(\rho_k^{(R)})^H \{(AW_k)^H AW_k\} \rho_k^{(R)}]$ 11: $X_{k+1} = X_k + (Q_k^{(P)} \alpha_k + \omega_k W_k) \rho_k^{(R)}$ 12: $[Q_{k+1}^{(R)}, \delta_{k+1}] = \text{qr}(S_k - \omega_k AW_k)$ 13: $\rho_{k+1}^{(R)} = \delta_{k+1} \rho_k^{(R)}$ 14: $\beta_k = -(\tilde{R}_0^H A Q_k^{(P)})^{-1} (\tilde{R}_0^H A S_k) \delta_{k+1}^{-1}$ 15: $Z_{k+1} = p_m(A)Q_{k+1}^{(R)}$ 16: $V_k = (Z_k - W_k) \alpha^{-1}$ 17: $[Q_{k+1}^{(P)}, \rho_{k+1}^{(P)}] = \text{qr}(Z_{k+1} + (Q_k^{(P)} - \omega_k V_k) \beta_k)$ 18: **for** $j = 1, 2, \dots, M$:19: $\zeta_{k+1}^{\sigma_j} = \delta_{k+1} [I_L + (\eta_j I_L + \delta_k \alpha_{k-1}^{-1} \beta_{k-1} - \zeta_k^{\sigma_j} \alpha_{k-1}^{-1} \beta_{k-1}) (\rho_{k+1}^{(P)})^{-1} \alpha_k]^{-1}$ 20: $(\xi_{k+1}^{\sigma_j})^{-1} = \zeta_{k+1}^{\sigma_j} (\xi_k^{\sigma_j})^{-1}$ 21: $\omega_k^{\sigma_j} = \frac{\omega_k}{1 + \omega_k \eta_j}$ 22: $\tau_{k+1}^{\sigma_j} = \frac{1}{1 + \omega_k \eta_j} \tau_k^{\sigma_j}$ 23: $\alpha_k^{\sigma_j} = (\rho_{k+1}^{(P)})^{-1} \alpha_k \delta_{k+1}^{-1} (\xi_{k+1}^{\sigma_j})^{-1}$ 24: $W_k^{\sigma_j} = p_m^{\sigma_j}(A)S_k$ 25: $X_{k+1}^{\sigma_j} = X_k^{\sigma_j} + P_k^{\sigma_j} \alpha_k^{\sigma_j} + \omega_k^{\sigma_j} \tau_k^{\sigma_j} W_k^{\sigma_j} \delta_{k+1}^{-1} (\xi_{k+1}^{\sigma_j})^{-1}$ 26: $\beta_k^{\sigma_j} = \alpha_k^{\sigma_j} \xi_k^{\sigma_j} \alpha_k^{-1} \beta_k$ 27: $Z_{k+1}^{\sigma_j} = p_m^{\sigma_j}(A)Q_{k+1}^{(R)}$ 28: $P_{k+1}^{\sigma_j} = \tau_{k+1}^{\sigma_j} Z_{k+1}^{\sigma_j} + [P_k^{\sigma_j} + \omega_k^{\sigma_j} \tau_k^{\sigma_j} \{W_k^{\sigma_j} \delta_{k+1}^{-1} \zeta_{k+1}^{\sigma_j} - Z_k^{\sigma_j}\} (\xi_k^{\sigma_j})^{-1} (\alpha_k^{\sigma_j})^{-1}] \beta_k^{\sigma_j}$ 29: **end for**30: if $\max(\|\rho_{k+1}\|_F, |\tau_{k+1}^{\sigma_j}| \|(\xi_{k+1}^{\sigma_j})^{-1}\|_F) \leq \text{tol}$ break31: **end for**

Table 3. Computing environment.

OS	CentOS 6.6
CPU	Intel Xeon E5-2667v3 @ 2.67GHz (8 core/16 thread, Haswell) x2
Memory	512GB (DDR4 ECC REG 32GB x16)

Table 4. List of matrices for numerical experiment 1. nnz is the number of nonzero elements. Cond is the condition number of matrices.

Matrix name	Type	Size	nnz	Cond
VCNT800std	Real symmetric	800	32000	1.33e+03
pde900	Real unsymmetric	900	4380	2.92e+02

5. 数値実験

本節では、複数の行列を用いた数値実験により、多項式前処理を用いた **Shifted Block COCG** 法および **Shifted Block BiCGStab** 法の有効性を検証する。数値実験 1 では **Gershgorin** の定理による固有値の存在範囲の推定精度および **Lanczos** 法, **Arnoldi** 法による固有値分布の推定精度について考察を行う。数値実験 2 では **Shifted Block COCG** 法と **Shifted Block BiCGStab** 法から得られる近似解の精度を、数値実験 3 では計算時間について考察する。実験に用いた計算機環境を Table 3 に示す。数値実験はすべて、IEEE 754 の倍精度浮動小数点数を用いて行った。数値実験 1 は MATLAB/R2015a を用いて行った。数値実験 2, 3 の各解法は C++ で実装し、数値計算ライブラリとして **Eigen** [18] を用いた。コンパイラは **Intel C++ Compiler 15.0.2** を用いた。OpenMP による並列化では（スレッドの数を 1CPU あたり 8 として）スレッドの数を 16 とした。

数値実験のテスト行列は、電子状態計算から現れる行列が公開されている **ELSSES matrix library** [19] より、**VCNT800std**, **CLIQ55296std**, **NCCS430080std** を、文献 [9] の電子状態計算プログラムより **dft_si64** を、University of Florida Sparse Matrix Collection [22] より、**pde900**, **gre_512**, **coupled**, **chem_master1** である (Table 4, 5)。VCNT800std, CLIQ55296std, NCCS430080std に関しては **Matrix Market** 形式の行列ファイルを **Matrix Market** [20] から得られる **mmread** 関数を用いて読み込み、それ以外の行列に関しては MATLAB の **Mat** 形式のファイルを読み込むことで実験を行った。ここで Table 4, 5 中の条件数 (Cond) は、MATLAB の **condest** 関数を用いて求めた 2-ノルム条件数の推定値 (下限値) である。

Table 5 における各テスト行列 **CLIQ55296std_2**, **NCCS430080std_2**, **dft_si64_2** は複素対称であり、対応する実対称行列 **CLIQ55296std**, **NCCS430080std**, **dft_si64** をそれぞれ

Table 5. List of matrices for numerical experiment 2 and 3. nnz is the number of nonzero elements. Cond is the condition number of matrices.

Matrix name	Type	Size	nnz	Cond
CLIQ55296std_2	complex symmetric	55296	1652352	2.82e+03
NCCS430080std_2	complex symmetric	430080	19165216	1.99e+04
dft_si64_2	complex symmetric	21952	83613056 ^{*1}	7.44e+04
gre_512	real unsymmetric	512	1976	3.41e+02
coupled	real unsymmetric	11341	97193	1.48e+06
chem_master1	real unsymmetric	40401	201201	4.42e+03

を A_0 とするとき以下の式 (5.1) によりシフトして得られるものである。

$$(5.1) \quad A = \sigma_0 I - A_0.$$

これらのテスト行列に対する σ_0 およびシフト点 σ_j は以下のように計算する。このような係数行列を持つ問題は、たとえば周回積分型固有値解法 [13] の部分問題として現れる。

$$(5.2) \quad \sigma_0 = c + r \exp\left(\frac{2\pi i(\frac{1}{2})}{M+1}\right),$$

$$(5.3) \quad \sigma_j = c + r \exp\left(\frac{2\pi i(j + \frac{1}{2})}{M+1}\right) - \sigma_0, \quad j = 1, 2, \dots, M.$$

ここで i は虚数単位である。 $c = (u+l)/2$, $r = (u-l)/2$ である。ただし、 l と u は $l < u$ を満たす実数のスカラーであり、 l と u の値としてそれぞれ、もとの実対称行列の最小固有値 λ_1 , 最小から k 番目の固有値 λ_k を用いる。そうして CLIQ55296std_2 については $k = 128$, NCCS430080std_2 については $k = 256$, dft_si64_2 については $k = 128$ とした。また $M = 30$ とした。

Table 5 における gre_512, coupled, chem_master1 は非対称行列である。これらの行列に対するシフトは以下のようにした。

$$(5.4) \quad \sigma_j = 0.001 + \frac{(0.1 - 0.001)(j-1)}{M-1}, \quad j = 1, 2, \dots, M.$$

また $M = 30$ とした。

右辺ベクトルの生成には標準正規分布に従う乱数を要素として用いた。固有値分布の推定には Lanczos 法および Arnoldi 法を用いた。それぞれの反復回数は 30 回および 50 回とした。固有値を包む楕円は Khachiyan 法 [10] を実装した MATLAB プログラム [21] を用いて推定し、引数である tolerance は 10^{-4} とした。

シフトパラメータ w , スケーリングパラメータ μ は予備実験に基づき A の推定固有値分布を用いて以下の通り決定した。

- Chebyshev 多項式前処理では \tilde{A} の固有値を全て非負の実数とするため、複素対称の問題では \tilde{A} の固有値の両端が $\{0.05, 1\}$ となるよう、また非対称の問題では \tilde{A} の固有値を包む楕円の実軸側の頂点が $\{0.05, 2\}$ となるようそれぞれ決定した。
- Neumann 多項式前処理では $I - \tilde{A}$ のスペクトル半径を 1 未満とするため、複素対称の問題で \tilde{A} の固有値の両端が $\{0, 1.5\}$ となるよう、また非対称の問題では \tilde{A} の固有値を包む楕円の実軸側の頂点が $\{0, 1.8\}$ となるようそれぞれ決定した。

5.1 数値実験 1

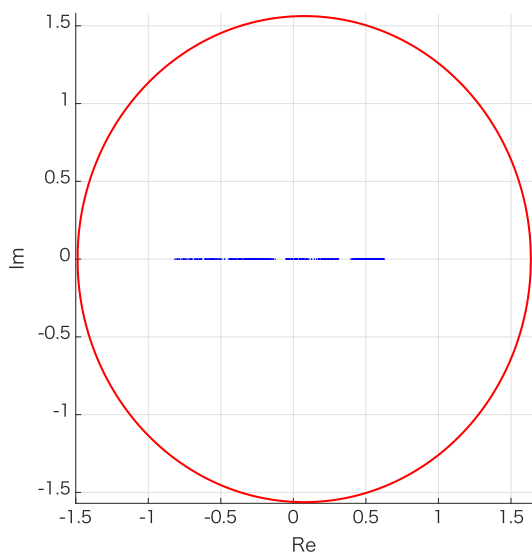
数値実験 1 では、Table 4 の各行列に対して、Gershgorin の定理により固有値の存在範囲を求め、また Lanczos 法や Arnoldi 法により固有値分布を推定し、それらの結果の精度について考察を行う。Fig. 1 に真の固有値と推定された固有値の分布を示す。

Fig. 1 から確認できるように、Gerschgorin の定理を用いた場合には、固有値を完全に包含する範囲を求めることができる。しかし (ii) のように、Gershgorin の定理で求めた存在範囲が円になる場合には、焦点が円の中心となるため、 ℓ と ν が重なり、うまくパラメータを決定できないという問題が生じた。

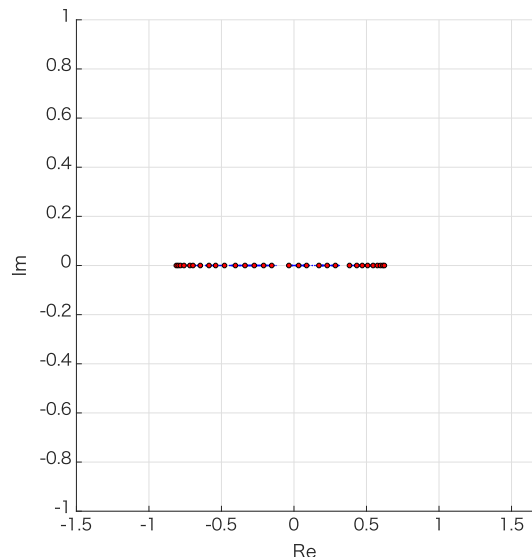
Lanczos 法または Arnoldi 法を用いた場合は、Gershgorin の定理を用いた場合よりも固有値分布を良く近似できていることがわかる。

Chebyshev 多項式前処理に用いるパラメータ ℓ と ν は、係数行列のすべての固有値を包含する領域を与えることが望ましい。しかしすべての固有値を包み込む領域を与える Gershgorin の定理とは異なり、Lanczos 法または Arnoldi 法で推定された領域は固有値を包み込まない、より狭い領域となる場合がある。

*1 $Ax = Lx + Vx + (W(W^T x))$ で計算される。ここで、 $L, V \in \mathbb{R}^{21952 \times 21952}$, $W \in \mathbb{R}^{21952 \times 256}$, $\text{nnz}(L) = 812224$, $\text{nnz}(V) = 21952$, $\text{nnz}(W) = 342240$. $\text{nnz}(X)$ は X の非ゼロ要素数である。

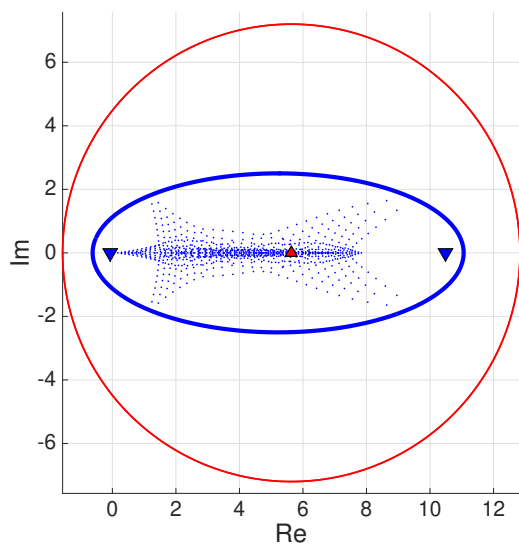


Gershgorin bound

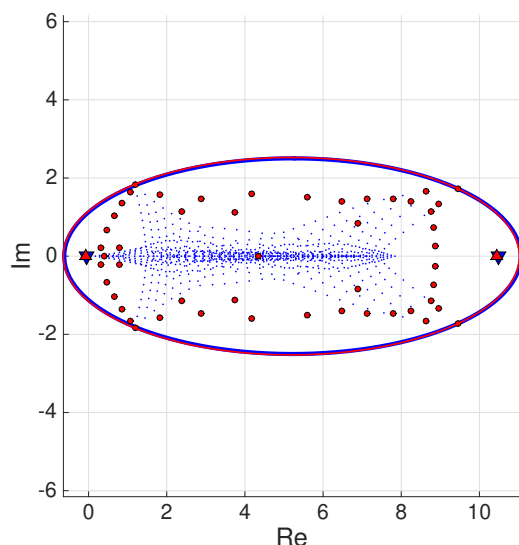


Lanczos estimation

(i) VCNT800



Gershgorin bound



Arnoldi estimation

(ii) pde900

Fig. 1. Estimated eigenvalue distribution by Lanczos method, Arnoldi method and Gelshogolin bounds. (\cdot : True eigenvalues. \blacktriangledown : True foci. $—$: True ellipse. \bullet : Estimated eigenvalues. \blacktriangle : Estimated foci. $—$: Estimated ellipse or Gelshogolin circle.)

5.2 数値実験 2(近似解の精度の比較)

数値実験 2 では得られる近似解の精度について検証する．ここで近似解の精度とは真の相対残差ノルム $\|B - AX\|_F / \|B\|_F$ および $\|B - (A + \sigma_j I)X^{\sigma_j}\|_F / \|B\|_F$ を指す．Shifted Block Krylov 部分空間法で複数右辺ベクトルをもつシフト線形方程式を解く際、停止条件に用いる相対残差ノルム $\|R_{k+1}\|_F / \|B\|_F$ および $\|R_{k+1}^{\sigma_j}\|_F / \|B\|_F$ が真の相対残差ノルムと乖離する場合がある．したがって、真の相対残差ノルムがどの程度減少しているのかを調べることは重要である．

本実験では、右辺ベクトルの数は $L = 16$ 、多項式の次数は $m = 3, 16$ の場合を扱う．停止条件はシード方程式の相対残差ノルム $\|R_{k+1}\|_F / \|B\|_F$ およびシフト方程式の相対残差ノルム $\|R_{k+1}^{\sigma_j}\|_F / \|B\|_F$ が 10^{-12} を下回ったときとした．

数値実験 2 の結果を Table 6 に示す．表中の seed はシード方程式から得られた残差ノルム、shift は 30 本あるシフト方程式の中で最も真の相対残差ノルムが大きかった方程式の残差ノルムを示している．また None は前処理なし、Cheby は Chebyshev 多項式前処理、Neum は Neumann 多項式前処理、R は相対残差ノルム、T は真の相対残差ノルムを示している．

Table 6 の上段の 3 つの場合 CLIQ55296std.2, NCCS430080std.2, dft.si64.2 では、前処理なしから前処理ありにした場合、真の相対残差ノルムがわずかに増えた場合があるが、計算結果はほぼ変化しないことがわかる．下段の 3 つの場合 gre.512, coupled, chem_master1 では、前処理なしに比べ、前処理ありの場合、すべての場合で真の相対残差ノルムが小さくなっており、精度が改善されていることがわかる．しかしながら、gre.512 のシフト方程式における Chebyshev 多項式 ($m = 16$) の場合のように前処理なしより改善があるものの依然として大きい値となるケースも確認できる．

本実験で見られた、停止条件で用いる残差ノルムと真の相対残差ノルムとの乖離は、特に Block Krylov 部分空間法において見られる現象であり、文献 [12, 14, 17] において、その解析や対策手法が述べられている．

5.3 数値実験 3(求解時間の比較)

数値実験 3 では、近似解が得られるまでの計算時間の検証をする．

本実験では、右辺ベクトルの数は $L = 1, 16$ の場合を扱う． $L = 1$ で前処理なし、前処理ありのいずれの解法も収束しない場合では、 $L = 1$ よりも大きい L を用いることとした．シフト点は 30 点、多項式の次数は $m = 0, 1, 2, 3$ とした． $m = 0$ は前処理なしの場合である．また停止条件はシード方程式の相対残差ノルム $\|R_{k+1}\|_F / \|B\|_F$ およびシフト方程式の相対残差ノルム $\|R_{k+1}^{\sigma_j}\|_F / \|B\|_F$ が 10^{-12} を下回ったときとした．Fig. 2 ~ 6 に示す．図中では棒グラフの上に反復回数を示している．

Table 6. Accuracies of approximate solutions.

		CLIQ55296std.2		NCCS430080std.2		dft_si64.2		
		seed	shift	seed	shift	seed	shift	
None	R	7.9e-13	9.9e-13	6.6e-13	9.8e-13	9.9e-13	9.9e-13	
	T	7.9e-13	9.9e-13	6.6e-13	9.8e-13	9.9e-13	9.9e-13	
Cheby	$m = 3$	R	7.2e-13	9.4e-13	8.3e-13	9.9e-13	4.4e-13	9.8e-13
		T	7.2e-13	9.4e-13	8.3e-13	9.9e-13	4.4e-13	9.8e-13
	$m = 16$	R	7.3e-13	8.1e-13	7.8e-13	7.3e-13	7.9e-13	3.8e-13
		T	7.3e-13	4.1e-12	7.8e-13	3.6e-12	8.0e-13	5.7e-12
Neum	$m = 3$	R	7.3e-13	9.6e-13	5.7e-13	9.9e-13	4.6e-13	9.9e-13
		T	7.3e-13	9.6e-13	5.7e-13	9.9e-13	4.6e-13	9.9e-13
	$m = 16$	R	4.7e-13	9.1e-13	9.3e-13	9.8e-13	6.0e-13	9.7e-13
		T	4.7e-13	9.1e-13	9.3e-13	9.8e-13	6.0e-13	9.7e-13

		gre_512		coupled		chem_master1		
		seed	shift	seed	shift	seed	shift	
None	R	5.1e-13	8.2e-13	8.2e-13	5.6e-13	8.3e-13	7.9e-13	
	T	1.4e-12	4.7e-02	2.4e-12	2.0e-06	9.9e-13	1.7e-06	
Cheby	$m = 3$	R	9.4e-13	3.2e-13	7.4e-13	7.4e-13	4.6e-13	9.6e-13
		T	9.9e-13	1.7e-05	1.6e-12	1.1e-08	5.2e-13	5.5e-07
	$m = 16$	R	7.5e-13	4.5e-13	7.8e-13	3.5e-13	7.7e-13	6.4e-13
		T	8.9e-13	1.5e-02	8.5e-13	8.2e-07	7.8e-13	1.5e-08
Neum	$m = 3$	R	4.8e-13	5.6e-13	9.6e-13	9.7e-13	3.5e-13	3.3e-13
		T	4.9e-13	2.9e-05	1.0e-12	4.1e-09	3.5e-13	4.8e-09
	$m = 16$	R	8.2e-13	2.6e-13	8.6e-13	4.7e-13	3.0e-13	2.4e-13
		T	9.2e-13	1.6e-04	8.8e-13	2.0e-08	3.2e-13	2.8e-10

Fig. 2~4において、 L が小さい場合 ($L = 1$) には Block SpMV の全体の経過時間に占める割合が大きく、多項式前処理による反復回数削減の影響に対し Block SpMV の回数増加の影響が上回るため、全体の経過時間は増加する傾向にある。それと比較し、 L が大きい場合 ($L = 16$) には、計算量が多項式次数 m に依存しない Block AXPY の全体の経過時間に占める割合が大きいため、多項式前処理による反復回数削減が経過時間短縮につながっている。Fig. 5 と Fig. 6 では L が小さい場合 (Fig. 5 では $L = 4$, Fig. 6 では $L = 1$)

であっても、Block SpMV の経過時間が全体の経過時間に占める割合は小さい。しかし Fig. 2 ~ 4 と同様の傾向があり、 L を大きくすることで、全体の経過時間を短縮できていることがわかる。Fig. 7 を見ると、多項式前処理を適用し、 m を大きくしても、反復回数をほとんど減少させることができない、または逆に増加させてしまっている。そのため、全体の経過時間を短縮できていないことがわかる。

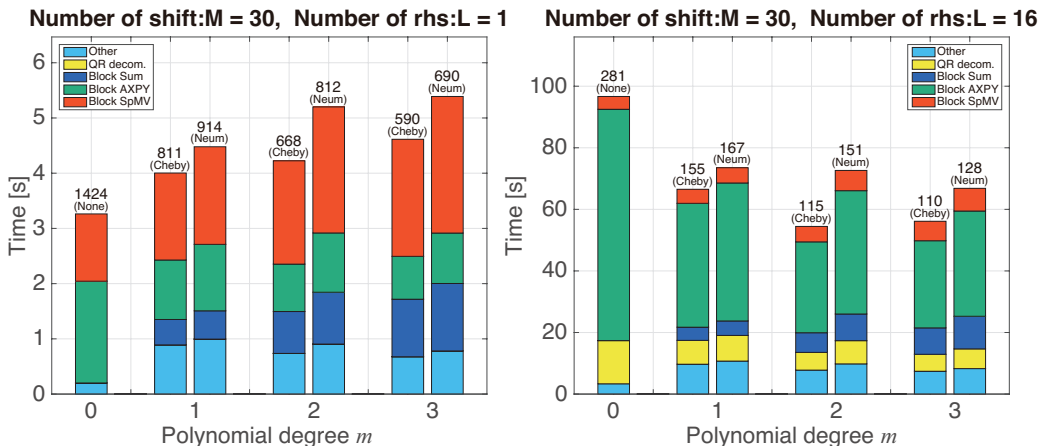


Fig. 2. Elapsed time for CLIQ55296std_2.

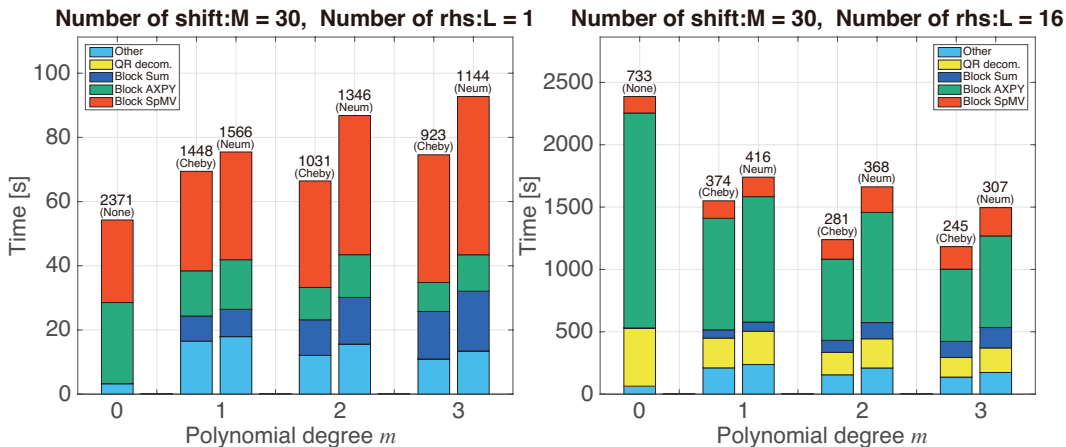


Fig. 3. Elapsed time for NCCS430080std_2.

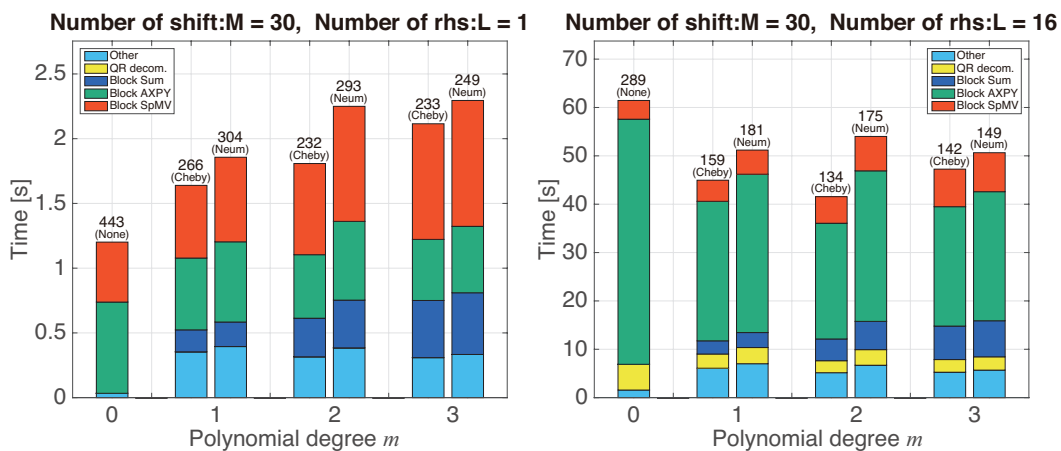


Fig. 4. Elapsed time for dft.si64_2.

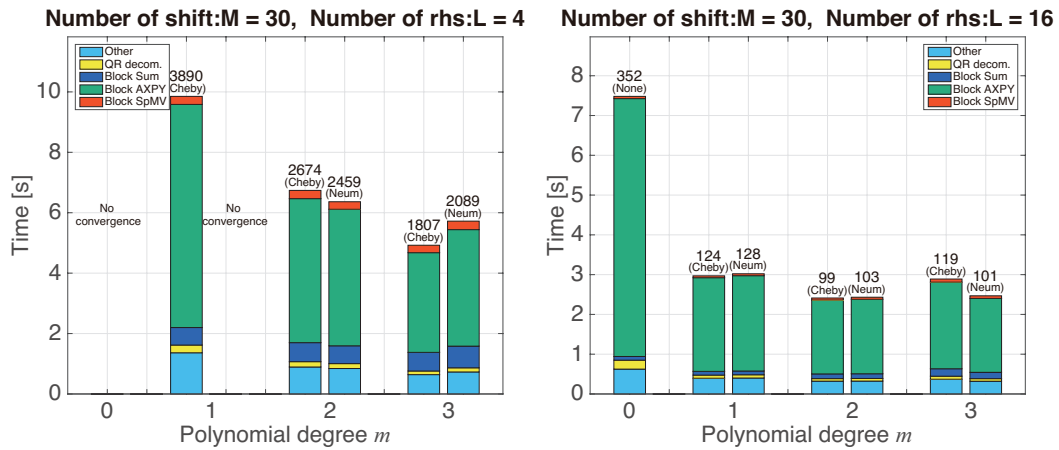


Fig. 5. Elapsed time for gre.512.

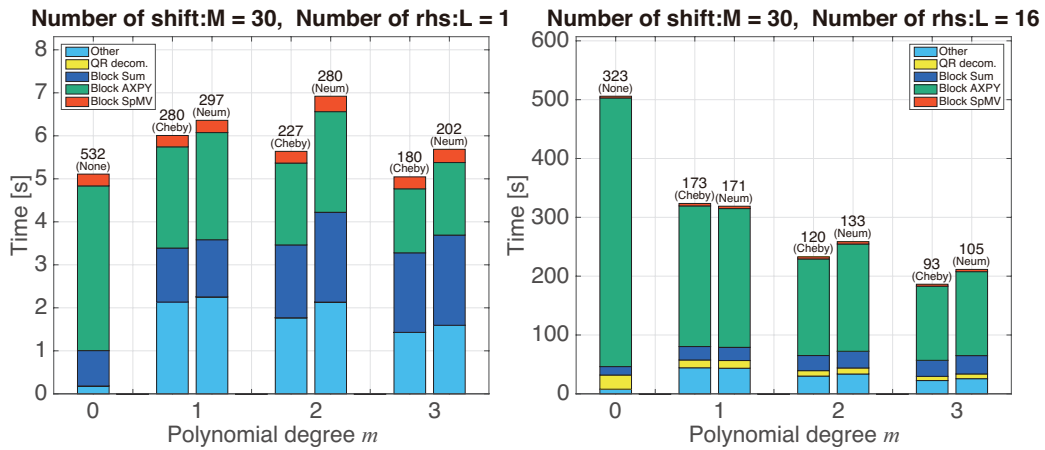


Fig. 6. Elapsed time for chem_master1.

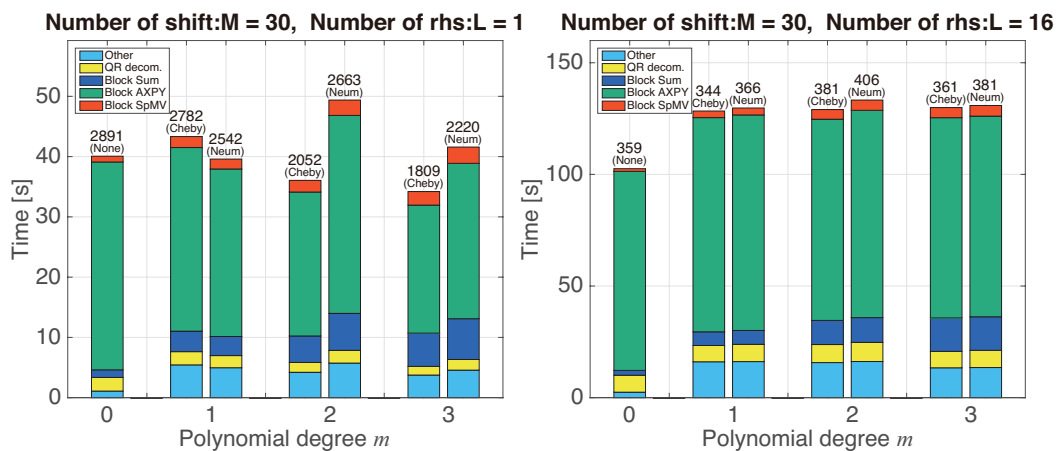


Fig. 7. Elapsed time for coupled.

6. 結論・今後の課題

本研究では、複数右辺ベクトルをもつシフト線形方程式の解法である Shifted Block COCG 法および Shifted Block BiCGStab 法の前処理として多項式前処理を適用し、その有効性を検証した。得られる近似解の精度は高次の多項式前処理を用いる場合は前処理なしの場合と比べて精度がわずかに悪化する例もあったが、低次の多項式を用いる場合、ほとんどの場合で精度の改善または維持することができた。計算時間に関しては、右辺ベクトルの数が少ない場合では多項式前処理の効果は小さかったが、右辺ベクトルの数が多い場合では前処理として有効であることが分かった。しかしテスト行列 *coupled* のように行列によっては収束するまでの反復回数を十分減少させることができず、高速化することのできない例もあった。

今後の課題としては、スケーリングパラメータ、シフトパラメータの適切な選び方や Chebyshev 多項式前処理におけるパラメータの適切な選び方、高次の多項式を用いても精度の悪化しないような方法の模索が考えられる。また最小二乗多項式 [11] のような別の多項式を用いた前処理の有効性の検証なども挙げられる。

謝辞

本研究の一部は、JST/ACT-I (No. JPMJPR16U6), JST/CREST, JSPS 科研費 (No. 17K12690) の助成を受けたものです。

参考文献

- [1] Ahmad, M. I., Szyld, D. B. and van Gijzen, M. B., Preconditioned multishift BiCG for \mathcal{H}_2 -optimal model reduction, *SIAM J. Mat. Anal. Appl.*, **38** (2017), 401–424.
- [2] Baumann, M. and van Gijzen M. B., Nested Krylov methods for shifted linear systems, *SIAM J. Sci. Comput.*, **37** (2015), 90–112.
- [3] Birk, S. and Frommer, A., A deflated conjugate gradient method for multiple right hand sides and multiple shifts, *Numer. Alg.*, **67** (2014), 507–529.
- [4] Dubrulle A. A., Retooling the method of block conjugate gradients, *Electron. Trans. Numer. Anal.*, **12** (2001), 216–233.
- [5] El Guennouni, A., Jbilou, K. and Sadok, H., A block version of BiCGSTAB for linear systems with multiple right-hand sides, *Electron. Trans. Numer. Anal.*, **16** (2003), 129–142.

- [6] Fletcher, R., Conjugate Gradient Methods for Indefinite Systems, in: Watson, G., Ed., Numerical Analysis Dundee, Lecture Notes in Mathematics, Vol. 506, Springer-Verlag, Berlin, New York, (1975), 73–89.
- [7] Imakura, A., Sakurai, T., Sumiyoshi, K. and Matsufuru, H., An auto-tuning technique of the weighted Jacobi-type Iteration used for preconditioners of Krylov subspace methods, in: IEEE 6th International Symposium on Embedded Multicore SoCs (MCSoc-12), (2012), 183–190.
- [8] Imakura, A., Sakurai, T., Sumiyoshi, K. and Matsufuru, H., A parameter optimization technique for a weighted Jacobi-type preconditioner, JSIAM Letters, **4** (2012), 41–44.
- [9] Iwata, J., Takahashi, D., Oshiyama, A., Boku, T., Shiraishi, K., Okada, S. and Yabana, K., A massively-parallel electronic-structure calculations based on real-space density functional theory, J. Comput. Phys., **229** (2010), 2339–2363.
- [10] Khachiyan, L. G., Rounding of polytopes in the real number model of computation, Math. Oper. Res., **21** (1996), 307–320.
- [11] Saad, Y., Iterative Methods for Sparse Linear Systems(2nd edition), Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, 2003.
- [12] 齋藤 周作, 多田野 寛人, 今倉暁, Shifted Block BiCGSTAB(ℓ) 法の構築とその高精度化, 日本応用数理学会論文誌, **26** (2016), 318–352.
- [13] Sakurai, T. and Sugiura, H., A projection method for generalized eigenvalue problems using numerical integration, J. Comput. Appl. Math., **159** (2003) 119–128.
- [14] Tadano, H., Ishikawa, Y., and Imakura, A., Improvement of the accuracy of the approximate solution of the Block BiCR Method, JSIAM Letters, **6** (2014), 61–64.
- [15] 多田野 寛人, 櫻井 鉄也, 周回積分法に対する Block Krylov 部分空間反復法の適用と分子軌道計算への応用, 情報処理学会論文誌 コンピューティングシステム, **2** (2009), 10-18.
- [16] 多田野 寛人, 櫻井 鉄也, 複数右辺ベクトルをもつ連立一次方程式の数値解法, 応用数理, **21** (2011), 36–48.
- [17] Tadano, H., Sakurai, T. and Kuramashi, Y., Block BiCGGR: A New Block Krylov Subspace Method for Computing High Accuracy Solutions, JSIAM Letters, **1** (2009), 44–47.
- [18] Eigen project, url="http://eigen.tuxfamily.org/", (更新 2018 年 8 月 28 日).
- [19] ELSSES matrix library, Hoshi, T. (Tottori University), url="http://www.elses.jp/matrix/", (閲覧 2018 年 10 月).

- [20] Matrix Market (Text File Formats section), url="https://math.nist.gov/MatrixMarket/formats.html", (更新 2007 年 5 月 10 日).
- [21] Minimum Volume Enclosing Ellipsoid, MathWorks MATLAB Central, url="https://jp.mathworks.com/matlabcentral/fileexchange/9542-minimum-volume-enclosing-ellipsoid", (更新 2009 年 1 月 20 日).
- [22] SuiteSparse Matrix Collection (formerly the University of Florida Sparse Matrix Collection), Davis, T. (Texas A&M University), url="https://sparse.tamu.edu/", (閲覧 2018 年 10 月).

関川 悠太 (非会員) 〒305-8573 茨城県つくば市天王台 1-1-1

2016 年 3 月 筑波大学情報学群情報科学類卒業. 学士 (情報科学). 現在, 筑波大学大学院システム情報工学研究科コンピュータサイエンス専攻博士前期課程在学中. 連立一次方程式に対する反復法の研究に従事.

二村 保徳 (正会員) 〒305-8573 茨城県つくば市天王台 1-1-1

2014 年 3 月筑波大学大学院システム情報工学研究科博士後期課程修了. 博士 (工学). 筑波大学システム情報系研究員を経て, 現在, 筑波大学システム情報系助教. 大規模線形計算およびその並列実装に関する研究に従事. 情報処理学会会員.

今倉 暁 (正会員) 〒305-8573 茨城県つくば市天王台 1-1-1

2011 年 3 月 名古屋大学大学院工学研究科博士課程修了. 博士 (工学). 筑波大学計算科学研究センター研究員を経て, 現在, 筑波大学システム情報系准教授. 大規模行列計算およびデータ解析に対する数値計算法の研究に従事. 情報処理学会, SIAM 各会員.

櫻井 鉄也 (正会員) 〒305-8573 茨城県つくば市天王台 1-1-1

筑波大学システム情報系教授. 筑波大学人工知能科学センターセンター長, 理化学研究所客員主幹研究員. 放送大学客員教授, MathDesign 株式会社 CEO. 日本応用数学会, 情報処理学会, 数学会, SIAM 各会員. 非線形近似理論, 大規模固有値計算, データ・画像解析, ディープニューラルネットワークアルゴリズムの研究に従事.

(受付日 2018 年 3 月 30 日)

(受理日 2018 年 12 月 21 日)