

「ニーズ・シーズ」型研究会

「大規模シミュレーションと数値アルゴリズム」

平成24年5月27日-28日

# 大規模シフト線形方程式の数値解法

曾我部 知広

愛知県立大学 

大学院情報科学研究科

主な共同研究者 (2004頃～)

星 健夫 (鳥取大学)

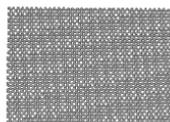
張 紹良 (名古屋大学)

藤原 毅夫 (東京大学)

# 大規模シフト線形方程式

物性物理学

大規模電子構造計算

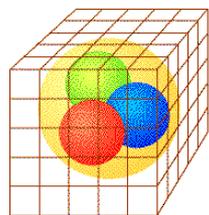


シフト線形方程式

$$(A + \sigma_i I) x^{(i)} = b$$

素粒子物理学

格子量子色力学

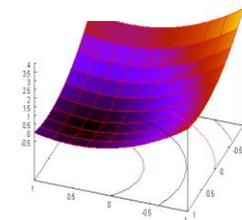


逆問題

Tikhonov正則化法

最適化問題

SQO 問題



標準固有値問題

Sakurai-Sugiura法

# クリロフ部分空間法

*Krylov subspace methods*

$$Ax = b$$

# 20世紀の**Top 10** アルゴリズム

[SIAM News, Vol. 33, No. 4, 2000]

- Fast Fourier Transform
- Fast multipole method
- Fortran compiler
- Householder matrix decomposition
- Integer relation detection algorithm
- **Krylov subspace methods**
- Monte Carlo method
- QR method
- Quick sort
- Simplex methods

# クリロフ部分空間法 (注意：一部の解法のみ紹介)

$$(A = A^H)$$

**CG** (共役勾配法) (h.p.d)  
[Hestenes & Stiefel, 1952]  
**CR** (共役残差法)  
[Stiefel, 1955]

$$(A = A^T \neq A^H)$$

**COCG**  
[van der Vorst & Melissen, 1990]  
**COCR**  
[S. & Zhang, 2007]

$$(A \neq A^H)$$

**BiCG**  
(双共役勾配法)  
[Fletcher, 1976]

**FOM**  
[Saad, 1981]  
**GMRES**  
[Saad & Schultz, 1986]

積型 ↓ [Zhang's framework, 1997]

**CGS**  
[Sonneveld, 1989]  
**GPBiCG**  
[Zhang, 1997]

**BiCGStab**  
[van der Vorst, 1992]

**IDR(s)**  
(Sonneveld部分空間法)  
[Sonneveld & Gijzen, 2008]

**BiCGStab(l)**  
[Sleijpen & Fokkema, 1993]

**IDRStab**  
[Sleijpen & Gijzen, 2010]

**GBiCGStab(s,L)**  
[Tanio & Sugihara, 2010]

- **クリロフ部分空間**

$$K_n(A, \boldsymbol{v}) := \text{span}\{\boldsymbol{v}, A\boldsymbol{v}, \dots, A^{n-1}\boldsymbol{v}\}$$
$$(A \in \mathbf{C}^{N \times N}, \boldsymbol{v} \in \mathbf{C}^N)$$

- **クリロフ部分空間法**

クリロフ部分空間の中から (効率よく)  
 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ の近似解 $\boldsymbol{x}_n$ を探す解法の総称

$\boldsymbol{x}_n$  :  $n$ 反復目の近似解ベクトル

$\boldsymbol{r}_n := \boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_n$ ,  $n$ 反復目の残差ベクトル

**空間条件** .....

$$\boldsymbol{x}_n \in \boldsymbol{x}_0 + K_n(A, \boldsymbol{r}_0)$$

**直交条件** .....

$$\boldsymbol{r}_n \perp W_n (n\text{次元部分空間})$$

# クリロフ部分空間法 (直交性の観点)

$$(A = A^H)$$

**CG**

$$\mathbf{r}_n \perp K_n(A, \mathbf{r}_0)$$

(ランチョス-プロセス)

$$(A = A^T \neq A^H)$$

**COCG**

$$\mathbf{r}_n \perp \overline{K_n(A, \mathbf{r}_0)}$$

(複素対称ランチョス-プロセス)

$$(A \neq A^H)$$

**BiCG**

$$\mathbf{r}_n \perp K_n(A^H, \mathbf{r}_0^*)$$

(双ランチョス-プロセス)

**GMRES**

$$\mathbf{r}_n \perp AK_n(A, \mathbf{r}_0)$$

(アーノルディ-プロセス)

# The Conjugate Orthogonal CG method

$$(A = A^T \neq A^H)$$

**COCG**

$$\mathbf{r}_n \perp \overline{K_n(A, \mathbf{r}_0)}$$

(複素対称ランチョス-プロセス)

**Conjugate Orthogonal property**

(共役直交性)

$$\mathbf{r}_i \perp \bar{\mathbf{r}}_j \quad (i \neq j)$$

**内積**  $(\mathbf{x}, \mathbf{y}) := \mathbf{x}^H \mathbf{y}$

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

$$\alpha_n = \frac{(\bar{\mathbf{r}}_n, \mathbf{r}_n)}{(\bar{\mathbf{p}}_n, A\mathbf{p}_n)}$$

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

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

$$\beta_n = \frac{(\bar{\mathbf{r}}_{n+1}, \mathbf{r}_{n+1})}{(\bar{\mathbf{r}}_n, \mathbf{r}_n)}$$

# シフト線形方程式のための クリロフ部分空間法

*KS methods for shifted linear systems*

$$(A + \sigma_i I) \mathbf{x}^{(i)} = \mathbf{b} \quad \text{for } i = 1, 2, \dots, m.$$

(詳細: 学会誌「応用数理」, Vol.19, No.3, 2009)

# シフト線形方程式に対するKS法

シンプルな方法

$$(A + \sigma_1 I) \mathbf{x}^{(1)} = \mathbf{b} \longleftarrow \text{KS 法}$$

$\vdots$

$\longleftarrow$  KS 法

$$(A + \sigma_m I) \mathbf{x}^{(m)} = \mathbf{b} \longleftarrow \text{KS 法}$$

効率よく解くために

シード方程式

~~クリロフ部分空間のシフト不変性~~

$$K_n(A + \sigma_i I, \mathbf{b}) = K_n(A + \sigma_j I, \mathbf{b})$$

$$(A + \sigma_1 I) \mathbf{x}^{(1)} = \mathbf{b}$$

クリロフ部分空間の生成

$\vdots$

$$(A + \sigma_m I) \mathbf{x}^{(m)} = \mathbf{b}$$

基底の再利用  
行列ベクトル積や  
内積計算が不要

# シフト線形方程式のためのKS法 (一部のみ)

$$(A = A^H)$$

**(Shifted) CG**

[Young, 1988]

$$(A = A^T \neq A^H)$$

**Shifted COCG**

[Our work, 2006]

$$(A \neq A^H)$$

**Shifted BiCG**

[Frommer *et al.*, 1995]

**Shifted BiCGStab( $\ell$ )**

[Frommer, 2003]

**Shifted IDR(s) 等々...**

**(Shifted) GMRES( $m$ )**

[Datta & Saad, 1991]

**(Restarted) Shifted GMRES( $m$ )**

[Frommer & Grassner, 1998]

**Shifted FOM**

[Simoncini, 2003]

# Shifted COCG 法

$$Ax = b$$

COCG法

近似解ベクトル

$$x_n \in \underline{K_n(A, b)}$$

$$(A + \sigma_i I)x^{(i)} = b$$

COCG法

近似解ベクトル

$$x_n^{(i)} \in \underline{K_n(A + \sigma_i I, b)}$$

$$K_n(A, b) = K_n(A + \sigma_i I, b)$$

クリロフ部分空間のシフト不変性

# Shifted COCG 法

$$Ax = b$$

**COCG**

$\alpha, \beta, \mathbf{r}$

$$(A + \sigma_i I) \mathbf{x}^{(i)} = \mathbf{b}$$

$$\pi_{n+1}^{(i)} = R_{n+1}(-\sigma_i)$$

$$\alpha_n^{(i)} = (\pi_n^{(i)} / \pi_{n+1}^{(i)}) \alpha_n$$

$$\beta_{n-1}^{(i)} = (\pi_{n-1}^{(i)} / \pi_n^{(i)})^2 \beta_{n-1}$$

$$\mathbf{p}_n^{(i)} = \left(1 / \pi_n^{(i)}\right) \mathbf{r}_n + \beta_{n-1}^{(i)} \mathbf{p}_{n-1}^{(i)}$$

$$\mathbf{x}_{n+1}^{(i)} = \mathbf{x}_n^{(i)} + \alpha_n^{(i)} \mathbf{p}_n^{(i)}$$

行列・ベクトル積や  
内積計算がない！

$$\pi_{n+1}^{(i)} = R_{n+1}(-\sigma_i) = (1 + \alpha_n \sigma_i) \pi_n^{(i)} + \frac{\beta_{n-1}}{\alpha_{n-1}} \alpha_n (\pi_n^{(i)} - \pi_{n-1}^{(i)})$$

一般化シフト線形方程式のための  
クリロフ部分空間法

*KS methods for generalized shifted linear systems*

$$(A + \sigma_i B) \mathbf{x}^{(i)} = \mathbf{b} \quad \text{for } i = 1, 2, \dots, m.$$

## 問題点

### シフト線形方程式

$$(A + \sigma_i I) \mathbf{x}^{(i)} = \mathbf{b} \quad \text{for } i = 1, 2, \dots, m.$$

シフト不変性 ○

$$K_n(A + \sigma_i I, \mathbf{b}) = K_n(A + \sigma_j I, \mathbf{b})$$

### 一般化シフト線形方程式

$$(A + \sigma_i B) \mathbf{x}^{(i)} = \mathbf{b} \quad \text{for } i = 1, 2, \dots, m.$$

シフト不変性 ✕

$$K_n(A + \sigma_i B, \mathbf{b}) \neq K_n(A + \sigma_j B, \mathbf{b})$$

# 我々のアプローチ

## 1. シフト線形方程式への変換

$$(A + \sigma_i B) \mathbf{x}^{(i)} = \mathbf{b} \quad \text{for } i = 1, 2, \dots, m.$$



$B$ : 正則行列

$$(B^{-1}A + \sigma_i I) \mathbf{x}^{(i)} = B^{-1}\mathbf{b} \quad \text{for } i = 1, 2, \dots, m.$$

## 2. 双線形形式の利用

$$\text{双線形形式 } (\mathbf{x}, \mathbf{y})_B := \mathbf{x}^T B \mathbf{y}$$

$$(\mathbf{x}, B^{-1}A\mathbf{y})_B = (\mathbf{y}, B^{-1}A\mathbf{x})_B \rightarrow \text{Shifted COCG法の拡張}$$

# Generalized Shifted COCG法

$$(B^{-1}A + \sigma_s I) \mathbf{x}^{(s)} = B^{-1} \mathbf{b}$$

$$(B^{-1}A + \sigma_i I) \mathbf{x}^{(i)} = B^{-1} \mathbf{b}$$

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

$$\alpha_n = \frac{(\bar{\mathbf{r}}'_n, \mathbf{r}'_n)_B}{(\mathbf{p}_n, (B^{-1}A + \sigma_s I) \mathbf{p}_n)_B}$$

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

$$\mathbf{r}'_{n+1} = \mathbf{r}'_n - \alpha_n (B^{-1}A + \sigma_s I) \mathbf{p}_n$$

$$\beta_n = \frac{(\mathbf{r}'_{n+1}, \mathbf{r}'_{n+1})_B}{(\mathbf{r}'_n, \mathbf{r}'_n)_B}$$

$\alpha, \beta, \mathbf{r}$

$$\pi_{n+1}^\sigma = R_{n+1}(\sigma_i - \sigma_s)$$

$$\alpha_n^{(i)} = (\pi_n^{(i)} / \pi_{n+1}^{(i)}) \alpha_n$$

$$\beta_{n-1}^{(i)} = (\pi_{n-1}^{(i)} / \pi_n^{(i)})^2 \beta_{n-1}$$

$$\mathbf{p}_n^{(i)} = (1 / \pi_n^{(i)}) \mathbf{r}'_n + \beta_{n-1}^{(i)} \mathbf{p}_{n-1}^{(i)}$$

$$\mathbf{x}_{n+1}^{(i)} = \mathbf{x}_n^{(i)} + \alpha_n^{(i)} \mathbf{p}_n^{(i)}$$

$\mathbf{r}' := B^{-1} \mathbf{r}_n = B^{-1} (\mathbf{b} - (A + \sigma_s) \mathbf{I}) \mathbf{x}_n$  の代入

# Generalized Shifted COCG法

$$(B^{-1}A + \sigma_s I) \mathbf{x}^{(s)} = B^{-1} \mathbf{b}$$

$$(B^{-1}A + \sigma_i I) \mathbf{x}^{(i)} = B^{-1} \mathbf{b}$$

$$\mathbf{p}_n = B^{-1} \mathbf{r}_n + \beta_{n-1} \mathbf{p}_{n-1}$$

$$\alpha_n = \frac{(\bar{\mathbf{r}}_n, B^{-1} \mathbf{r}_n)}{(\bar{\mathbf{p}}_n, (A + \sigma_s B) \mathbf{p}_n)}$$

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

$$\mathbf{r}_{n+1} = \mathbf{r}_n - \alpha_n (A + \sigma_s B) \mathbf{p}_n$$

$$\beta_n = \frac{(\bar{\mathbf{r}}_n, B^{-1} \mathbf{r}_n)}{(\bar{\mathbf{r}}_{n+1}, B^{-1} \mathbf{r}_{n+1})}$$

$\alpha, \beta, \mathbf{r}$

$$\pi_{n+1}^\sigma = R_{n+1}(\sigma_i - \sigma_s)$$

$$\alpha_n^{(i)} = (\pi_n^{(i)} / \pi_{n+1}^{(i)}) \alpha_n$$

$$\beta_{n-1}^{(i)} = (\pi_{n-1}^{(i)} / \pi_n^{(i)})^2 \beta_{n-1}$$

$$\mathbf{p}_n^{(i)} = \left(1 / \pi_n^{(i)}\right) B^{-1} \mathbf{r}_n + \beta_{n-1}^{(i)} \mathbf{p}_{n-1}^{(i)}$$

$$\mathbf{x}_{n+1}^{(i)} = \mathbf{x}_n^{(i)} + \alpha_n^{(i)} \mathbf{p}_n^{(i)}$$

# Generalized Shifted COCG法

$$(B^{-1}A + \sigma_s I) \mathbf{x}^{(s)} = B^{-1} \mathbf{b}$$

$$\mathbf{p}_n = B^{-1} \mathbf{r}_n + \beta_{n-1} \mathbf{p}_{n-1}$$

$$\alpha_n = \frac{(\bar{\mathbf{r}}_n, B^{-1} \mathbf{r}_n)}{(\bar{\mathbf{p}}_n, (A + \sigma_s B) \mathbf{p}_n)}$$

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

$$\mathbf{r}_{n+1} = \mathbf{r}_n - \alpha_n (A + \sigma_s B) \mathbf{p}_n$$

$$\beta_n = \frac{(\bar{\mathbf{r}}_{n+1}, B^{-1} \mathbf{r}_{n+1})}{(\bar{\mathbf{r}}_n, B^{-1} \mathbf{r}_n)}$$

内部反復

Solve  $B\mathbf{v} = \mathbf{r}_n$   
(本研究ではCG法)

# 数值实验

- **GSCOCG**法 : Generalized Shifted COCG法

<b>VT64 Workstation 2100</b>	<b>CPU: 2.4GHz (AMD Opteron 252) Memory: 8GB</b>
<b>Code</b>	<b>Fortran 77 (double precision arithmetic)</b>
<b>Initial guess</b>	<b>all zeros</b>
<b>Stopping criteria</b>	<b>Outer iteration    Rel. Res. <math>\leq 10^{-12}</math> Inner iteration    Rel. Res. <math>\leq 10^{-12}</math></b>

# 数值例 1

Au 256 atoms (FCC)

$$(A + \sigma_i B) x^{(i)} = b, \quad N: 2,304, \text{ Nnz}: 1,059,584$$

$$\sigma_1 = 0.400 + 0.001i$$

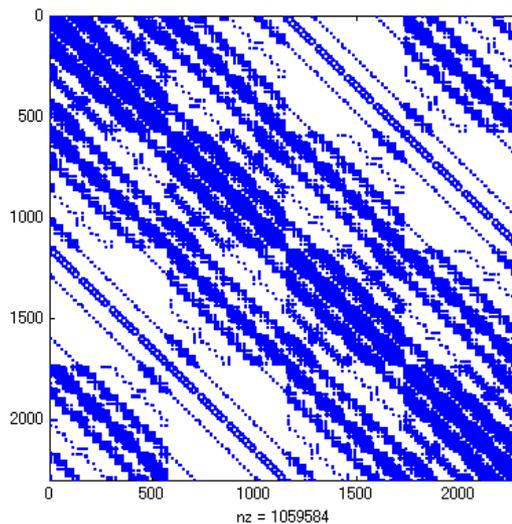
$$\sigma_2 = 0.401 + 0.001i$$

⋮

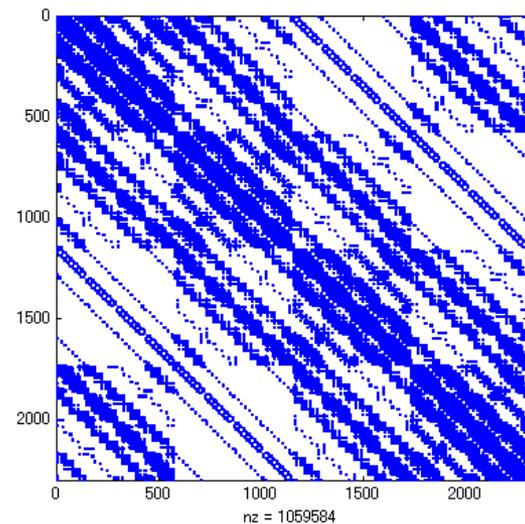
$$\sigma_{1001} = 1.400 + 0.001i$$

1001 個の方程式

**A:**

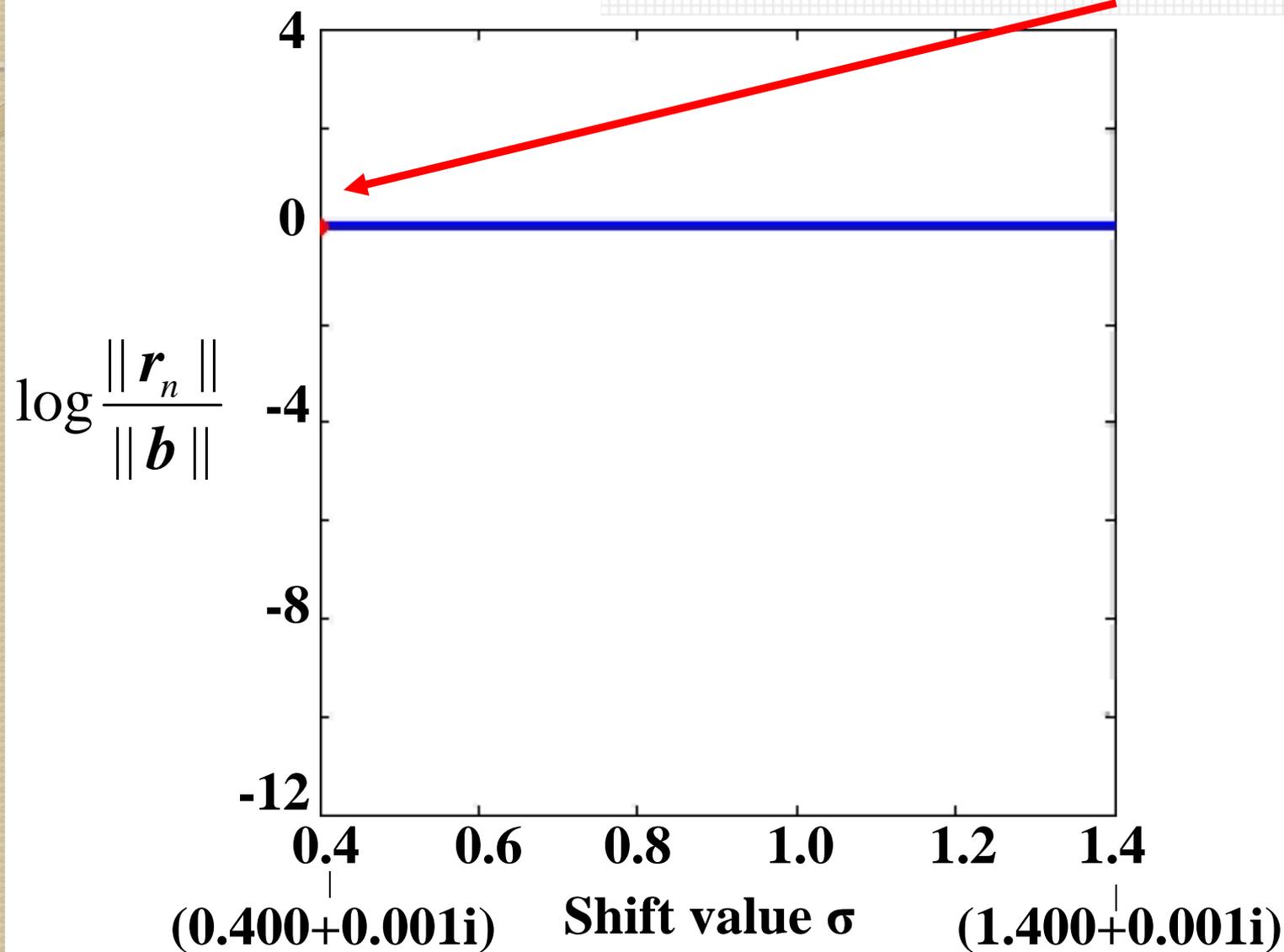


**B:**



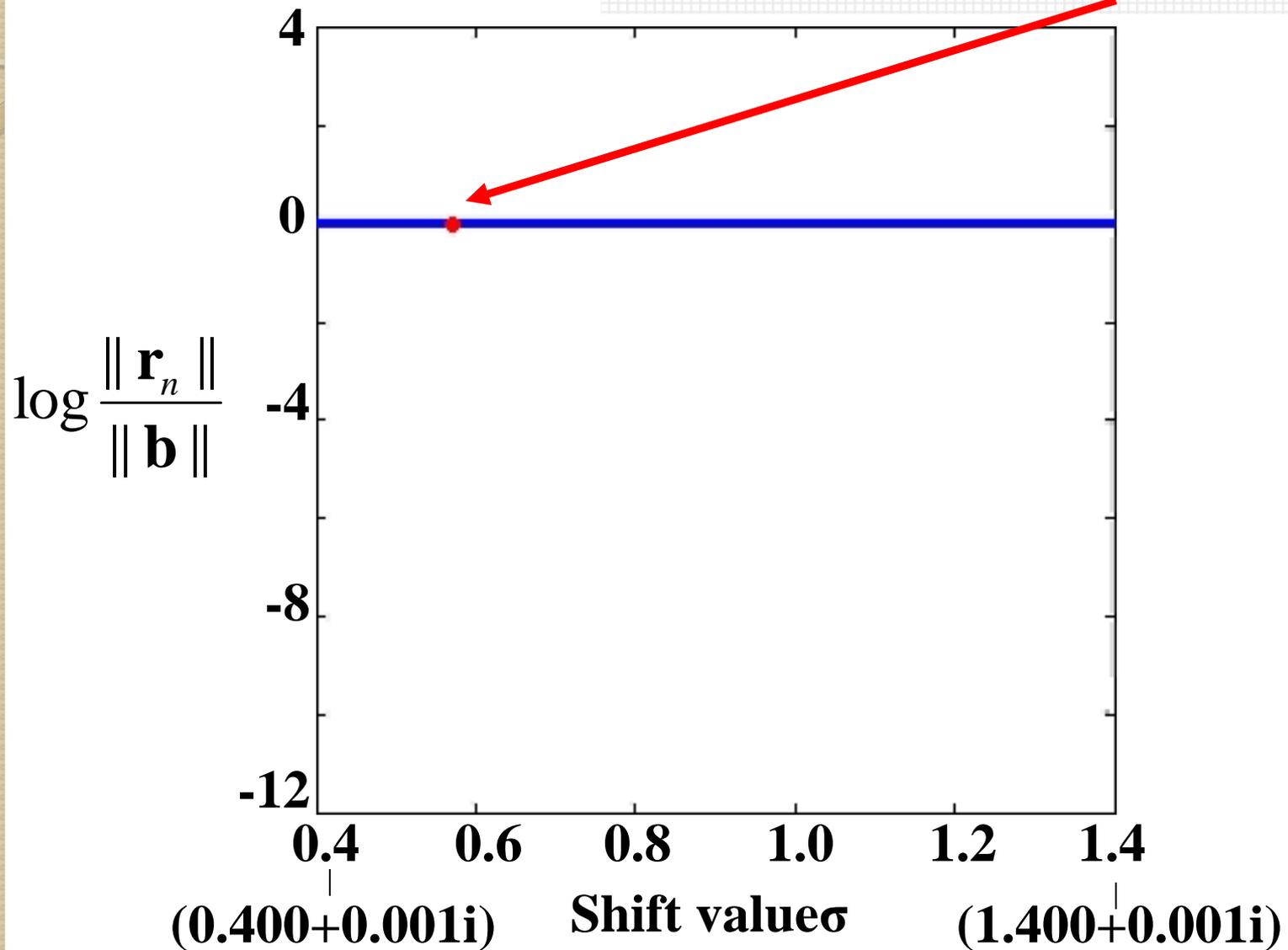
# 数值例 1

初期シード :  $\sigma = 0.400 + 0.001i$



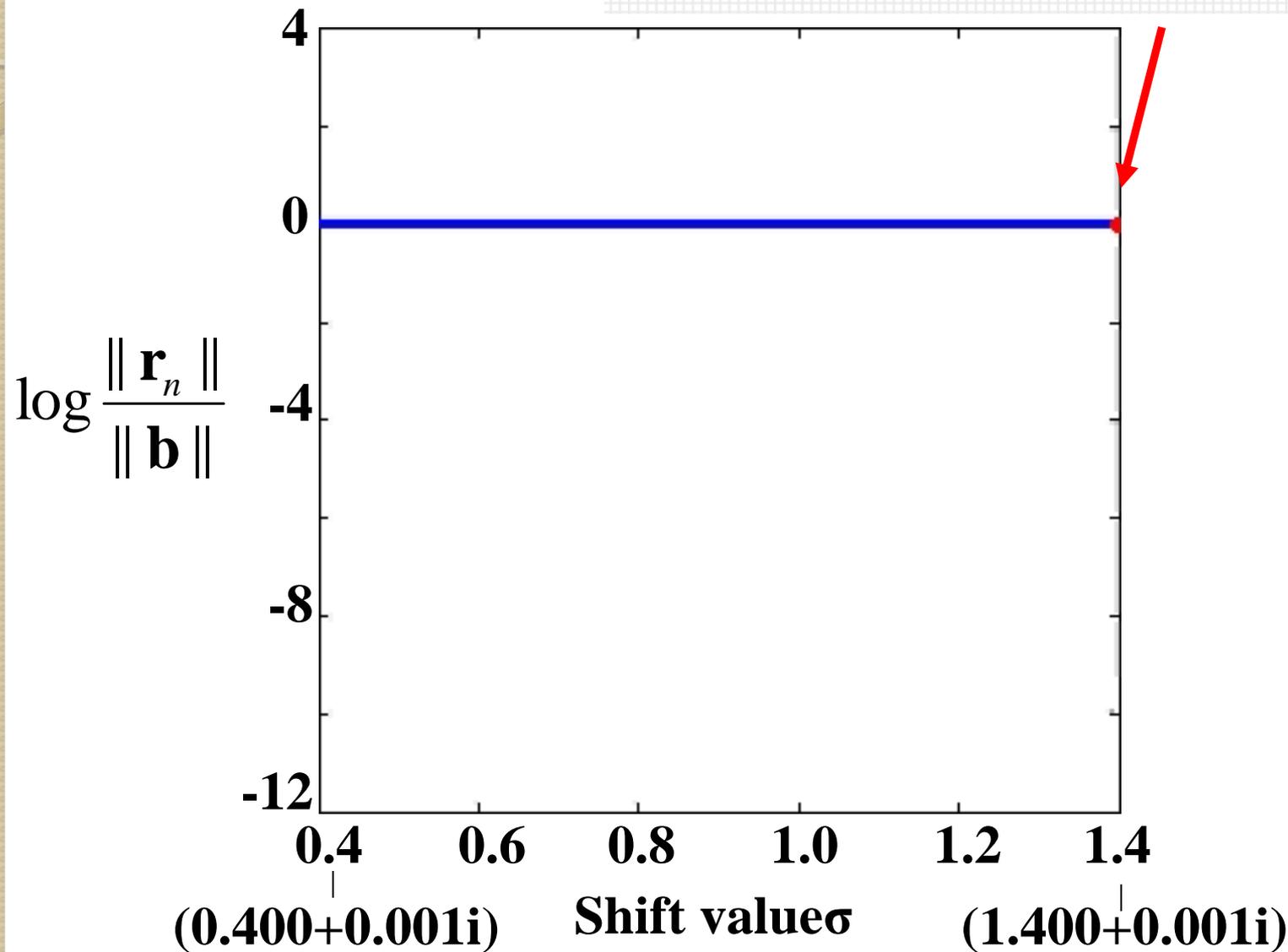
# 数值例 1

初期シード :  $\sigma = 0.573 + 0.001i$



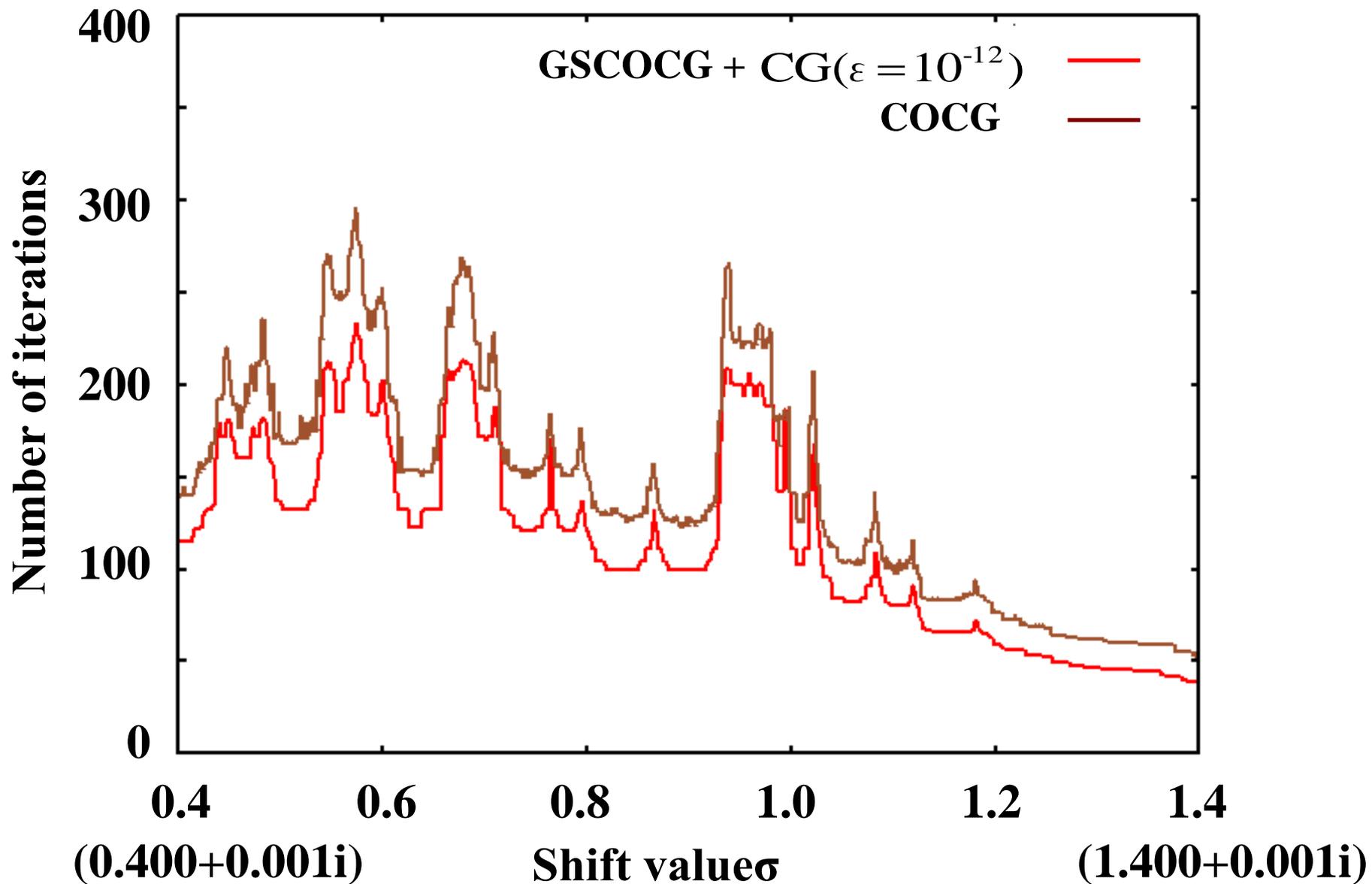
# 数值例 1

初期シード :  $\sigma = 1.400 + 0.001i$



# 数值例 1 (Au 256)

## Shifted COCG法とCOCG法の所要反復回数



# 計算時間

COCG法: 1217.3 [sec.]

GSCOCG法: **33.7** [sec.]

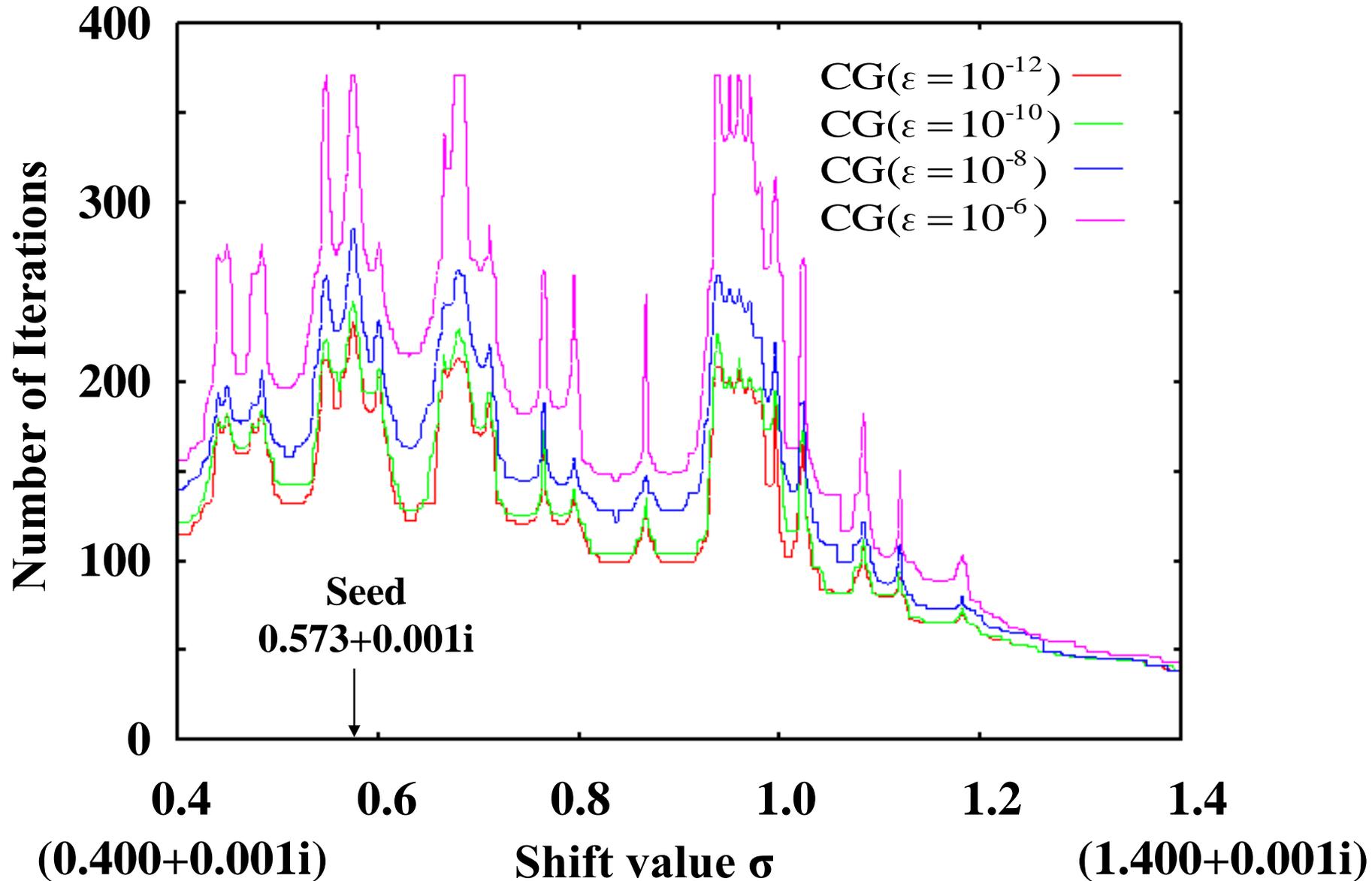
計算時間の比 (COCG法/GSCOCG)

約36倍高速

内部反復の停止基準を緩めるとどうなるか？  
→内部の線形方程式を粗く解くことを意味

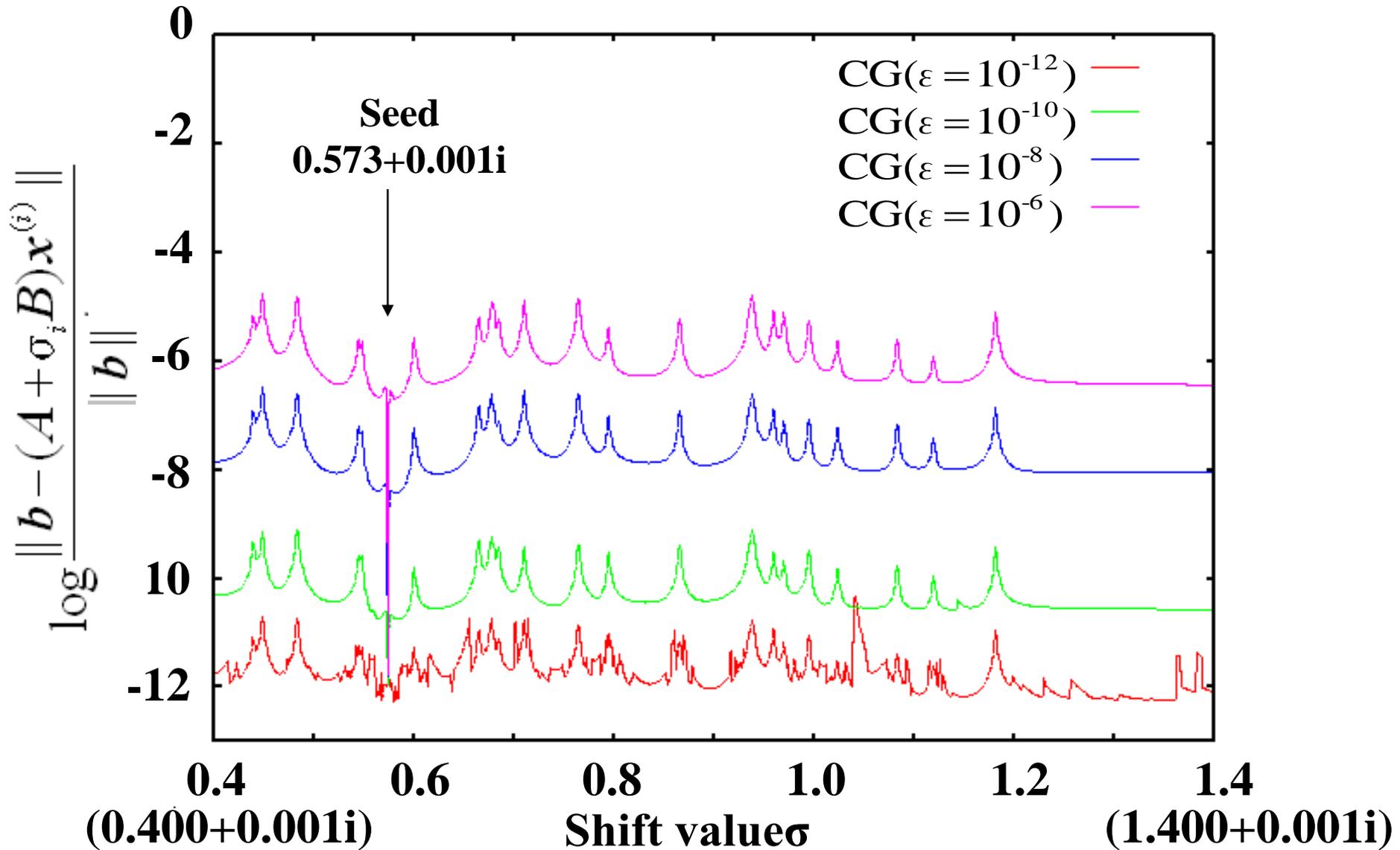
# 数値例 1 (Au256)

内部反復の精度と外部反復の反復回数との関係



# 数値例 1 (Au 256)

内部反復の精度と外部反復の真の相対残差との関係



# 計算時間 (Au256)

Stopping Criteria for CG (Inn. Its)	Its for CG	CPU time [sec.]		Total CPU time [sec.]
		Seed system	shifted system	
$10^{-12}$	<b>18</b>	<b>30.25</b>	<b>4.78</b>	<b>35.03</b>
$10^{-10}$	<b>16</b>	<b>28.32</b>	<b>4.95</b>	<b>33.27</b>
$10^{-8}$	<b>13</b>	<b>28.17</b>	<b>5.75</b>	<b>33.92</b>
$10^{-6}$	<b>11</b>	<b>31.15</b>	<b>7.23</b>	<b>38.38</b>

計算の主要部：シード方程式

内部停止基準が緩い

⇒ 内部反復回数：減少，外部反復回数：増加

# 数值例 2

Au 864 atoms

$$(A + \sigma_i B) x^{(i)} = b, \quad N: 7,776, \text{ Nnz: } 3,619,104$$

$$\sigma_1 = 0.400 + 0.001i$$

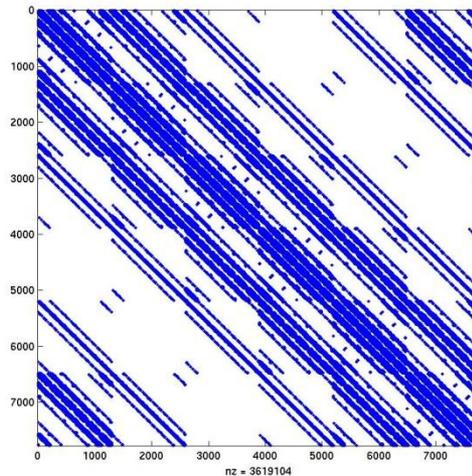
$$\sigma_2 = 0.401 + 0.001i$$

⋮

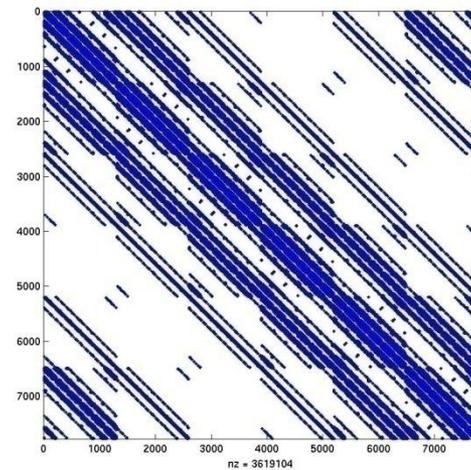
$$\sigma_{1001} = 1.400 + 0.001i$$

1001 個の方程式

**A:**

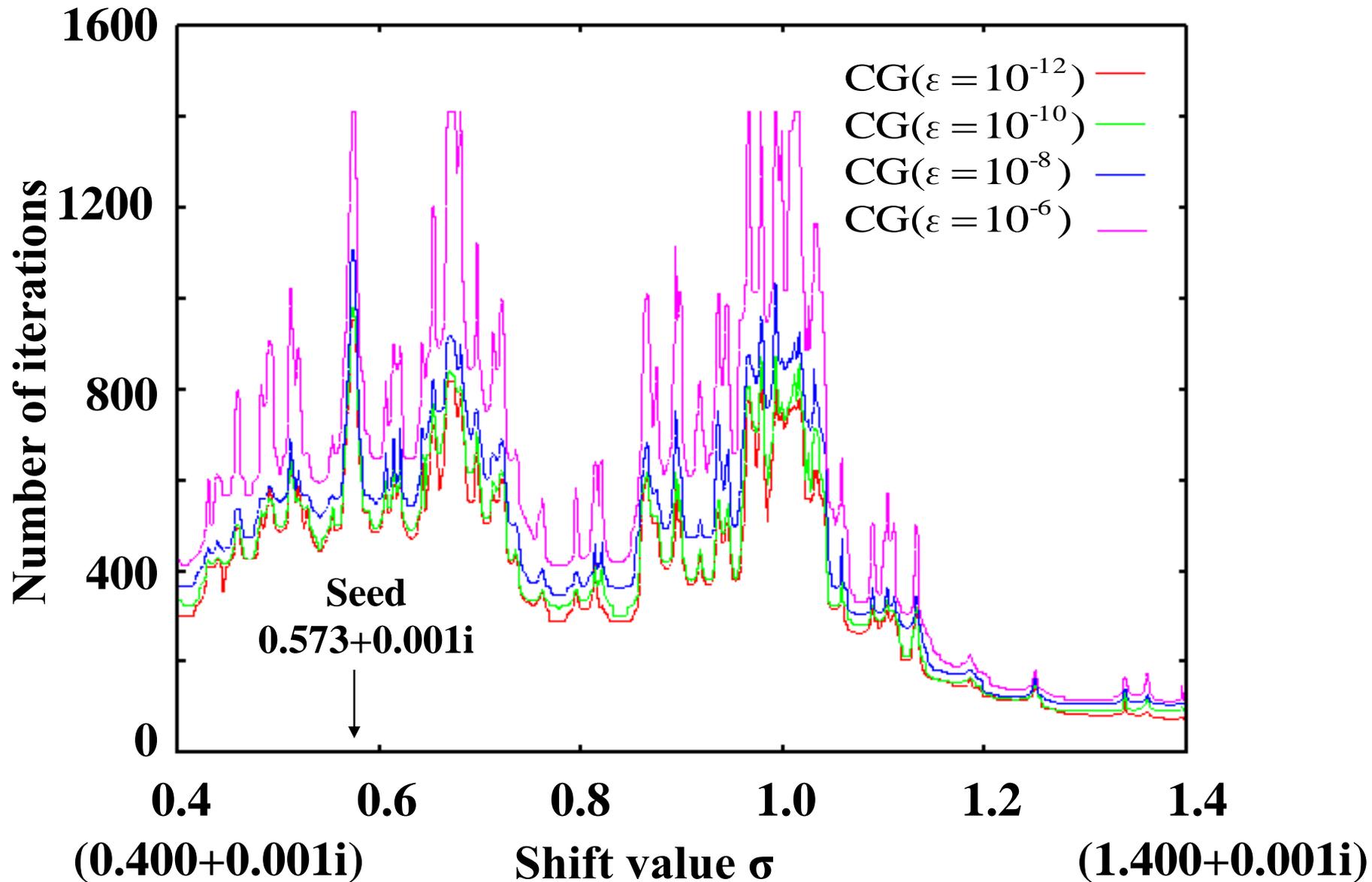


**B:**



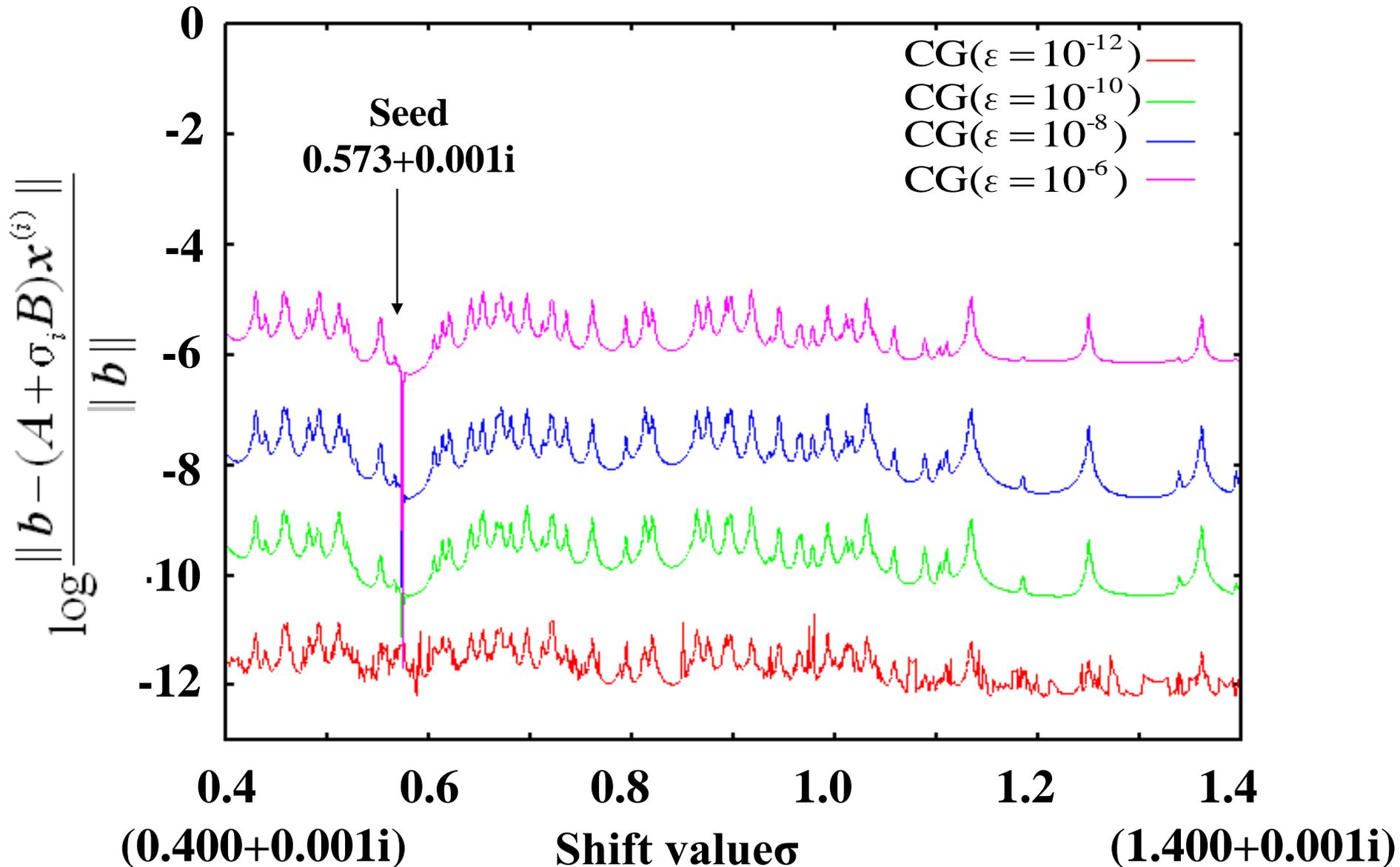
# 数値例 2 (Au864)

## 内部反復の精度と外部反復の反復回数との関係



# 数値例2(Au 864)

内部反復の精度と外部反復の真の相対残差との関係



## 計算時間 (Au864)

Stopping Criteria for CG (Inn. Its)	Its for CG	CPU time [sec.]		Total CPU time [sec.]
		Seed system	shifted system	
$10^{-12}$	<b>21</b>	<b>484.5</b>	<b>50.1</b>	<b>534.6</b>
$10^{-10}$	<b>18</b>	<b>438.2</b>	<b>52.5</b>	<b>490.7</b>
$10^{-8}$	<b>15</b>	<b>457.4</b>	<b>65.6</b>	<b>523.0</b>
$10^{-6}$	<b>12</b>	<b>446.8</b>	<b>76.4</b>	<b>523.2</b>

例 1 と同様の傾向

# 計算時間

COCG法: 16867.8 [sec.]	4.7時間
GSCOCG法: <b>534.6</b> [sec.]	<b>8.9分</b>

計算時間の比 (COCG法/GSCOCG)

約**31.5倍**高速

# まとめ

- 線形方程式に対するKS法の最近の進展
- シフト線形方程式に対するKS法の最近の進展
- 一般化シフト線形方程式に対するKS法の最近の進展  
→特にGeneralized Shifted COCG法の紹介

シーズとなりましたら幸いです。

# 関連論文

## シフト線形方程式の数値解法

- ・ 曾我部知広, 張紹良, 応用数理, 19:3 (2009), pp. 27-42.

## Shifted COCG法関係

- ・ R. Takayama, T. Hoshi, T. Sogabe, S.-L. Zhang, and T. Fujiwara, Phys. Rev. B 73, 165108 (2006), pp. 1-9.
- ・ T. Sogabe, T. Hoshi, S.-L. Zhang, and T. Fujiwara, Electron. Trans. Numer. Anal., 31 (2008), pp. 126-140.

## 一般化シフト線形方程式の数値解法

## Generalized Shifted COCG法関係

- ・ T. Sogabe, T. Hoshi, S.-L. Zhang, and T. Fujiwara, to appear in J. Comput. Phys.