大規模固有値問題への前処理付共役勾配法の適用と評価

西田 晃

(東京大学大学院情報理工学系研究科 / 科学技術振興事業団)

1 はじめに

大規模疎行列の固有値を数値的に求める場合, いくつかの解法を考えることができる. 主なものとしては, Lanczos 法やその非対称問題への拡張である Arnoldi 法, あるいは量子化学計算で利用されることの多い Davidson 法や, その一種である Jacobi-Davidson 法などの反復解法を挙げることができる. 一般に, 大規模疎行列の固有値問題では, 最大または最小のものから数個までの固有値及び固有ベクトルを求めればよい場合が多く, 疎行列性を保存する反復解法は, このような問題に対して有効であると考えられてきた.

2 背景

ここでは, 実対称行列 A, B に関する一般化固有値問題

$$Ax = \lambda Bx \tag{1}$$

の最小固有値, あるいはこれと同値な問題

$$Bx = \mu Ax, \quad \mu = 1/\lambda \tag{2}$$

の最大固有値を求めることを考える. この問題は Rayleigh 商

$$\mu(x) = \frac{x^T Bx}{x^T Ax} \tag{3}$$

の極値問題に帰着することができ, 最急勾配方向が

$$\nabla\mu(x) \equiv g(x) = \frac{2(Bx - \mu Ax)}{x^T Ax} \tag{4}$$

であることから, 適当な係数 α_i を用いて

$$x_{i+1} = x_i + \alpha_i p_i, \quad p_i = -g_i \tag{5}$$

から最急上昇法を, あるいは修正方向として

$$p_i = -g_i + \beta_{i-1}p_{i-1}, \quad \beta_{i-1} = \frac{g_i^T g_i}{g_{i-1}^T g_{i-1}} \tag{6}$$

などを用いることにより, 共役勾配法を導くことができる. この手法は 1951 年に Hestenes らにより提案され, Fletcher らが発展させたものであるが [2, 3], 1980 年代以降の Knyazev らの研究 [4, 5] により, 適切な前処理と組み合わせることによって高速に固有値を計算できることが明らかになってきた [1].

3 共役勾配法の適用

一般に, 前処理付固有値解法のアルゴリズムは, 前処理行列 $T \approx A^{-1}$, TA, TB に関する m_k 次多項式 $P_{m_k}(TA, TB)$ を用いて以下のように書くことができる.

1. 初期ベクトル $x^{(0)}$ を選択する
2. m_k 回の反復により $x^{(k)} = P_{m_k}(TA, TB)x^{(0)}$ を計算する
3. $\mu^{(k)} = (x^{(k)}, Bx^{(k)})/(x^{(k)}, Ax^{(k)})$ を計算する

Rayleigh 商の計算には様々な方法を用いることができるが, ここでは共役勾配法の場合について説明する. 前処理付共役勾配法の反復は, 適当な初期ベクトル $x^{(0)}$ と対応する修正ベクトル $p^{(0)} = 0$ を用いて,

$$\begin{aligned} \mu^{(i)} &= (x^{(i)}, Bx^{(i)})/(x^{(i)}, Ax^{(i)}) && (7)\\ r &= Bx^{(i)} - \mu^{(i)}Ax^{(i)} && (8)\\ w^{(i)} &= Tr && (9)\\ x^{(i+1)} &= w^{(i)} + \tau^{(i)}x^{(i)} + \gamma^{(i)}p^{(i)} && (10)\\ p^{(i+1)} &= w^{(i)} + \gamma^{(i)}p^{(i)} && (11) \end{aligned}$$

と書くことができる. Knyazev の手法では, ここで行列束 $Bx^{(i)} - \mu^{(i)}Ax^{(i)}$ に関する $\mathrm{span}\{w, x^{(i)}, p^{(i)}\}$ 上の Ritz 値, Ritz ベクトルを Rayleigh-Ritz 法を用いて計算し, 最大 Ritz 値に対応する Ritz ベクトルを $x^{(i+1)}$ とする. すなわち, 係数 $\tau^{(i)}$, $\gamma^{(i)}$ の値は, $\mathrm{span}\{w, x^{(i)}, p^{(i)}\}$ 上での局所的な最適解をもとに決められる. これによって, ベクトル間の直交性をもとに各係数を明に計算する必要のある従来の方法と比較して, 容易に更新値を求めることができる.

なお, 最急上昇法の収束率については, 冪乗法との類似性から, 条件

$$\delta_0(T^{-1}x, x) \le (Ax, x) \le \delta_1(T^{-1}x, x) \tag{12}$$

のもとで

$$\frac{\mu_1 - \mu^{(n)}}{\mu^{(n)} - \mu_2} \le (1 - \xi)^n \frac{\mu_1 - \mu^{(0)}}{\mu^{(0)} - \mu_2}, \quad \xi = \delta_0/\delta_1 \cdot (\mu_1 - \mu_2)/(\mu_1 - \mu_{\min}) \tag{13}$$

の関係が成り立つ [4]．したがって，共役勾配法についてもこの評価を適用することができる．

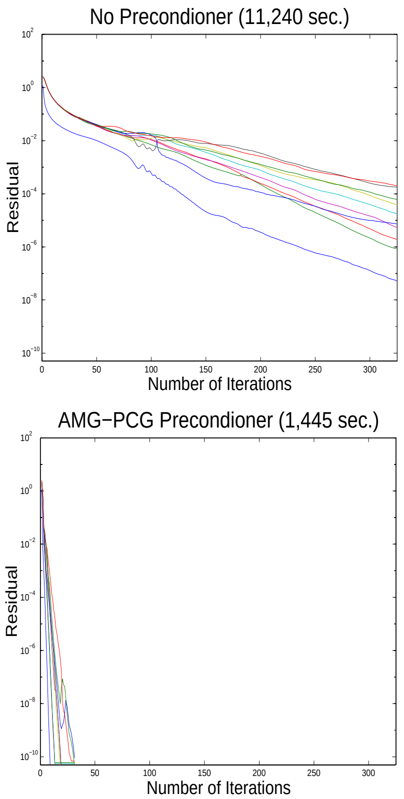

図 1: 固有値解法における共役勾配法の前処理と収束率の関係 (AMG 前処理を用いた場合)

4　前処理

一般化固有値問題

$$Ax = \lambda Bx \tag{14}$$

において，固有値 λ が既知であると仮定すると，これに対応する固有ベクトルは

$$(A - \lambda B)x = 0, \quad x \neq 0 \tag{15}$$

を解くことにより求めることができる．すなわち，固有値解法における理想的な前処理行列 T は $A - \lambda B$ の逆行列であり，実際には未知の λ を Ritz 値で置き換えた前処理行列を考えることもできる． しかしながら，一般にこのように前処理行列を取ると不定値となることが多く，T が対称正定値でなければならない場合には

$$T \approx A^{-1} \tag{16}$$

と取るのが自然であり，特に連立一次方程式 $Ax = f$ の解法が与えられている場合には，前処理の計算も容易である．このように定めた T に関して，

$$w^{(i)} = Tr \tag{17}$$

すなわち

$$T^{-1}w^{(i)} = r \tag{18}$$

を解く．

図 1 に，並列前処理アルゴリズムライブラリ Hypre を用いて評価した共役勾配法による計算例を示す [6]．ここでは 7 点，3 次元の Laplace 問題の係数行列 (100 次，非零要素数 6,940,000) について ブロック共役勾配法を用いて 10 個の固有値を同時に計算しているが，図から分かるように，この問題では AMG 前処理が高い効果を示していることが分かる． 詳細な計算結果は講演の際に示す．

5　むすび

本稿では，固有値解法への前処理付共役勾配法の適用手法について概説するとともに，その数値特性に関して簡単に紹介した． 本手法は比較的新しい解法であり，収束性など，明らかになっていない部分も多い． 今後，大規模固有値解法に対する有力な解法の一つとして評価していくとともに，拡張や他手法への応用についての検討を進めていきたい．

参考文献

[1] P. Arbenz and R. Lehoucq, *A comparison of algorithms for modal analysis in the absense of a sparse direct method*, Tech. Rep. SAND2003-1028J, Sandia National Laboratories, 2003.

[2] W. W. Bradbury and R. Fletcher, *New Iterative Method for Solution of the Eigenproblem*, Numer. Math., 9 (1966), pp. 259–267.

[3] M. R. Hestenes and W. Karush, *A method of gradients for the caluculation of the characteristic roots and vectors of a real symmetric matrix*, J. Res. Natl. Inst. Stand. Technol., 47 (1951), pp. 45–61.

[4] A. V. Knyazev, *Preconditioned eigensolvers—an oxymoron?*, Electron. Trans. Numer. Anal., 7 (1998), pp. 104–123 (electronic). Large scale eigenvalue problems (Argonne, IL, 1997).

[5] ———, *Toward the optimal preconditioned eigensolver: Locally optimal block preconditioned conjugate gradient method*, SIAM J. Sci. Comput., 23 (2001), pp. 517–541.

[6] A. V. Knyazev and M. E. Argentati, *Implementation of preconditioned eigensolver using hypre*, Numer. Linear Algebra Appl., Submitted.