非線形最適化問題としての固有値解法: 最適化手法の適用と評価

西田 晃

(東京大学 / 科学技術振興機構 CREST)

1 はじめに

最近の研究により, 大規模対称行列の固有値を数値的に求めるための手法として, 適切な前処理と組み合わせた共役勾配法の有効性が明らかとなってきている [1][3]. 一方, 非対称問題に関しても, 共役残差法を用いた事例 [4][5] が報告されており, 今後の発展が期待される. 本稿では, これらの解法の基礎となる非線形最適化手法について, 固有値解法との関連についてまとめる.

2 非線形最適化問題

以下では, 非線形関数 $F(x)$ の局所的な最小点を求めることを考える. この問題は, 各段階の試行点 x から F の値が減少する方向 v へ探索を進めることにより解くことができ, 各段の方向がすべて共役ならば, 2 次形式

$$F = a + b^T x + \frac{1}{2} x^T A x \tag{1}$$

の最小点は, 任意の出発点 $x^{(1)}$ から, 有限回の降下ステップの計算によって求められることが知られている [2].

最適化の手法を適用する関数が, 最小点の近傍では 2 次形式で十分に近似できると仮定すれば, 共役方向を用いる傾斜法を一般の関数の最小化に使うためには, その関数を 2 次形式で表したとき, 共役方向になるような探索の方向を作る必要がある. これについて, 以下の定理が成り立つ.

Theorem 2.1 点 $x^{(i+1)}$ を, *1* の *2* 次形式に i 回の降下ステップを行った結果到達した点とし, 降下方向 $d_1, d_2, ..., d_n$ は行列 A に関して互いに共役であるとすると,

$$g_{i+1} = \nabla F(x^{(i+1)}) \tag{2}$$

として,

$$d_s^T g_{i+1} = 0, \quad s = 1, 2, ..., i \tag{3}$$

となる.

そこで, 2 次形式に用いられた傾斜法を, 各降下ステップの方向が互いに共役になるよう以下のように修正する. まず

$$d_1 = -g_1 = -Ax^{(1)} - b \tag{4}$$

とすれば $x^{(2)} = x^{(1)} + \lambda_1 d_1$ であり, λ_1 は $d_1^T g_2 = 0$ すなわち

$$d_1^T (A(X^{(1)} + \lambda_1 d_1) + b) = 0 \tag{5}$$

によって求めることができる. つぎに

$$d_2 = -g_2 + \gamma_2 d_1 \tag{6}$$

とおき, γ_2 を d_1 と d_2 が共役となるように選ぶと,

$$\gamma_2 = \frac{g_2^T g_2}{g_1^T g_1} \tag{7}$$

となる.

$$d_i = -g_i + \gamma_i d_{i-1} \tag{8}$$

が成り立つことは帰納的に示すことができ, このとき γ_i は

$$\gamma_i = \frac{d_{i-1}^T A g_i}{d_{i-1}^T A d_{i-1}} = \frac{g_i^T g_i}{g_{i-1}^T g_{i-1}} \tag{9}$$

となる. このようにして, ある線上で関数の最小値を求めることができ, かつその点での勾配ベクトルを求めることができる場合, 一般の関数にも適用できる共役方向を作ることができる.

3 固有値問題への応用

以上の手法を用いて, 実対称行列 A, B に関する一般化固有値問題

$$Ax = \lambda Bx \tag{10}$$

の最小固有値, またはこれと同値な問題

$$Bx = \mu Ax, \quad \mu = 1/\lambda \tag{11}$$

の最大固有値を求めることを考える. これは Rayleigh 商

$$\mu(x) = \frac{x^T B x}{x^T A x} \tag{12}$$

の極値問題に帰着でき, 最急勾配方向が

$$\nabla\mu(x) \equiv g(x) = \frac{2(Bx - \mu Ax)}{x^T Ax} \tag{13}$$

であることから, Rayleigh 商を局所的に最小化する係数 α_i を用いて, 共役勾配法

$$x_{i+1} = x_i + \alpha_i p_i, \tag{14}$$

$$p_i = -g_i + \beta_{i-1} p_{i-1},\ \beta_{i-1} = \frac{g_i^T g_i}{g_{i-1}^T g_{i-1}} \tag{15}$$

により固有値を計算することができる.

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,

$$\mu^{(i)} = (x^{(i)}, Bx^{(i)})/(x^{(i)}, Ax^{(i)}) \tag{16}$$

$$r = Bx^{(i)} - \mu^{(i)} Ax^{(i)} \tag{17}$$

$$x^{(i+1)} = r^{(i)} + \tau^{(i)} x^{(i)} + \gamma^{(i)} p^{(i)} \tag{18}$$

$$p^{(i+1)} = r^{(i)} + \gamma^{(i)} p^{(i)} \tag{19}$$

と書くことができ, 行列束 $Bx^{(i)} - \mu^{(i)} Ax^{(i)}$ に関する $\mathrm{span}\{r, x^{(i)}, p^{(i)}\}$ 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.

4 非対称問題への拡張

以上の手法は, 共役残差法 (Orthomin(1)) を用いることにより, 非対称問題にも拡張することができ [5], Rayleigh 商以外の汎関数に対して共役残差法を適用することにより, 勾配法系の反復解法で解くことができる. ここでは, 固有値問題 (10) の残差を

$$r = \lambda Bx - Ax, \tag{20}$$

$$\lambda = (Ax, Bx)/(Bx, Bx) \tag{21}$$

で定義する. x が固有値ベクトルに等しければ, λ は対応する固有値に一致する. ここでは最小化すべき関数として残差 r の内積

$$F(r) = (r, r) \tag{22}$$

を選び, 共役残差法 (Orthomin(1)) を適用する. すなわち, 初期値 x_0 から

$$\lambda^{(0)} = (Ax^{(0)}, Bx^{(0)})/(Bx^{(0)}, Bx^{(0)}), \tag{23}$$

$$r^{(0)} = \lambda^{(0)} Bx^{(0)} - Ax^{(0)}, \tag{24}$$

$$p^{(0)} = r^{(0)} \tag{25}$$

を求め, 以下の反復

$$\alpha^{(i)} = [(r^{(i)}, Ap^{(i)}) - \lambda^{(i)}(r^{(i)}, Bp^{(i)})] \Big/ [(Ap^{(i)}, Ap^{(i)}) - 2\lambda^{(i)}(Ap^{(i)}, Bp^{(i)}) + (\lambda^{(i)})^2 (Bp^{(i)}, Bp^{(i)})], \tag{26}$$

$$x^{(i+1)} = x^{(i)} + \alpha^{(i)} p^{(i)}, \tag{27}$$

$$\lambda^{(i+1)} = (Ax^{(i+1)}, Bx^{(i+1)})/(Bx^{(i+1)}, Bx^{(i+1)}), \tag{28}$$

$$r^{(i+1)} = \lambda^{(i+1)} Bx^{(i+1)} - Ax^{(i+1)}, \tag{29}$$

$$\beta^{(i)} = -[(Ar^{(i+1)}, Ap^{(i)}) - \lambda^{(i+1)}\{(Ar^{(i+1)}, Bp^{(i)}) + (Ap^{(i)}, Br^{(i+1)})\} + (\lambda^{(i+1)})^2 (Br^{(i+1)}, Bp^{(i)})] \Big/ [(Ap^{(i)}, Ap^{(i)}) - 2\lambda^{(i+1)}(Ap^{(i)}, Bp^{(i)}) + (\lambda^{(i+1)})^2 (Bp^{(i)}, Bp^{(i)})], \tag{30}$$

$$p^{(i+1)} = r^{(i+1)} + \beta^{(i)} p^{(i)} \tag{31}$$

を相対残差

$$\epsilon^{(i)} = \| \lambda^{(i)} Bx^{(i)} - Ax^{(i)} \|_2 \,/\, \| \lambda^{(i)} Bx^{(i)} \|_2 \tag{32}$$

が十分小さくなるまで繰り返す.

5 むすび

本稿では, 非線形最適化問題としての側面から, 大規模固有値解法としての共役勾配法について簡単にまとめた. 対称固有値問題については既にある程度の結果が得られているが, 非対称問題については分かっていない部分も多い. 今後, これらの特性を明らかにしていくとともに, 大規模固有値解法に対する有力な解法の一つとして, 効果的な実装手法について引き続き検討を進めていく予定である.

参考文献

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

[2] J. Kowalik and M. R. Osborne, *Methods for Unconstrained Optimization Problems*, Elsevier, 1968.

[3] 西田晃, 大規模固有値問題への並列 *AMG* 前処理付共役勾配法の適用と評価, 情処研報, 2004 (2004), pp. 25–30.

[4] ———, 非対称固有値問題への並列 *AMG* 前処理付共役残差法の適用と評価, 情処研報, 2004 (2004), pp. 85–90.

[5] 末富英一, 関本博, 多群中性子拡散方程式に現れる非対称行列系の一般固有値問題に対する *ORTHOMIN(1)* 法の適用, 情報処理学会論文誌, 30 (1989), pp. 661–667.