

(一般化)固有値問題の数値解法 (に関して)

宮田 考史 (名古屋大学)

共同研究者:

曾我部 知広 (愛知県立大学)

山下 達也, 張 紹良 (名古屋大学)

研究会「大規模シミュレーションと数理アルゴリズム」

東京, 05/27, 2012

はじめに

✓ 本研究で扱う問題

- (一般化)固有値問題

$$Ax = \lambda Bx, \quad x \neq 0$$

» 入力: 行列 $A, B \in \mathbb{C}^{n \times n}$

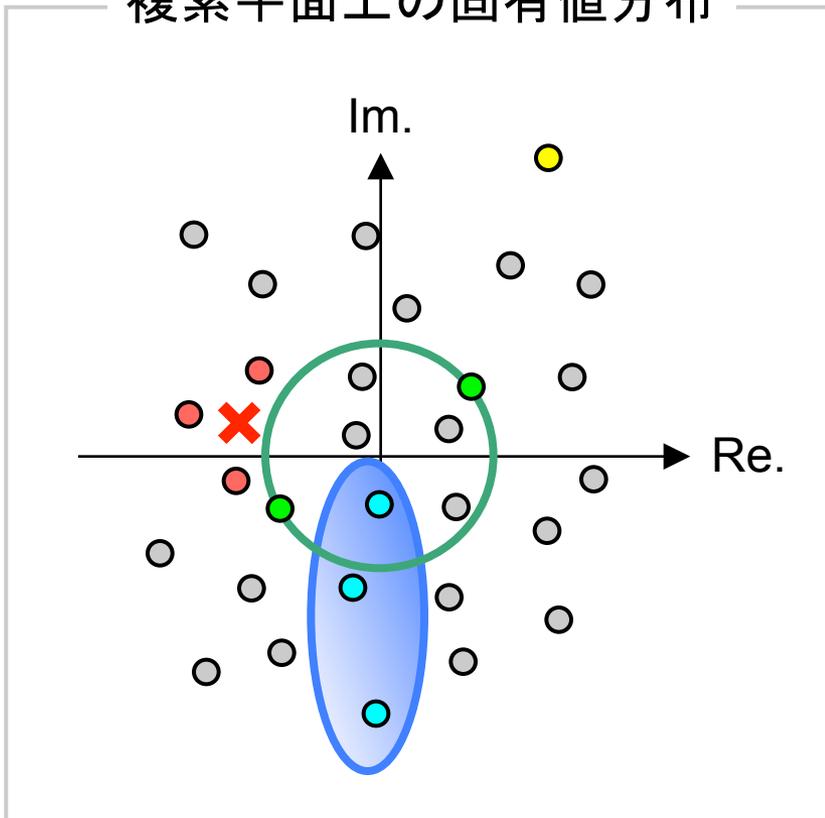
» 出力: 固有対 $(\lambda \in \mathbb{C}, x \in \mathbb{C}^n)$

固有値 固有ベクトル

- どの固有値が必要か?
 - » 応用分野に応じて多様なニーズ

固有値計算

複素平面上の固有値分布



✓ 固有値のニーズ

- すべての固有値
 - 電子状態計算
- 少数の固有値
 - 絶対値最大
 - 電子状態計算
 - 指定された点近傍
 - 電子状態計算
 - 指定された領域内部
 - 量子化学
 - 指定された絶対値
 - 回路設計

概要

$$Ax = \lambda Bx, \quad x \neq 0$$

正則な大規模疎行列
 $A, B \in \mathbb{C}^{n \times n}$

Arnoldi(M, W, G)法

- 従来法

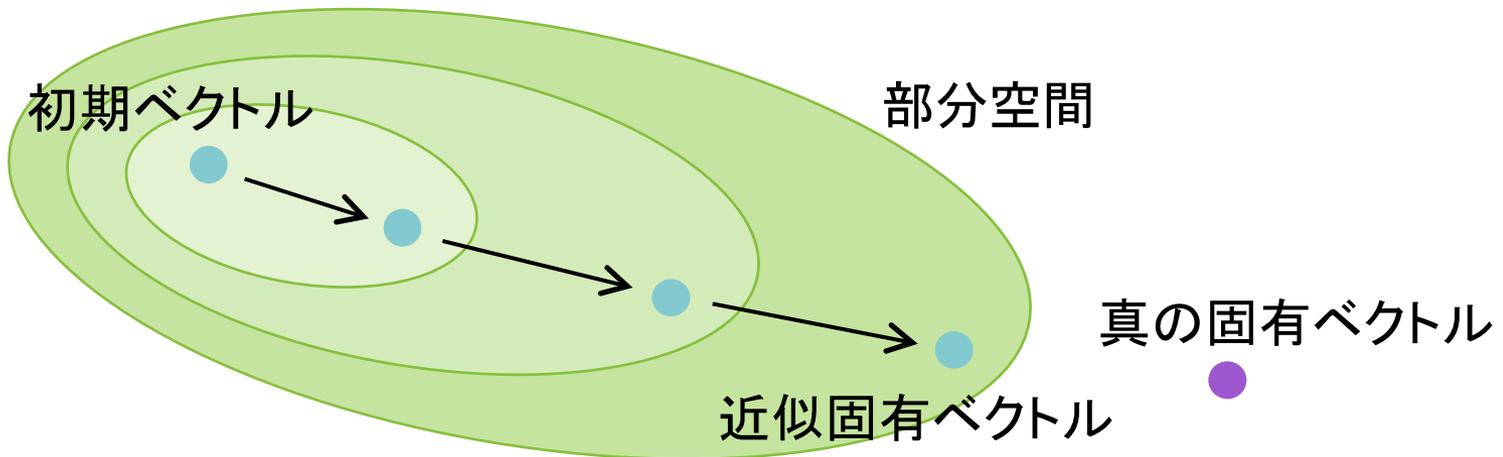
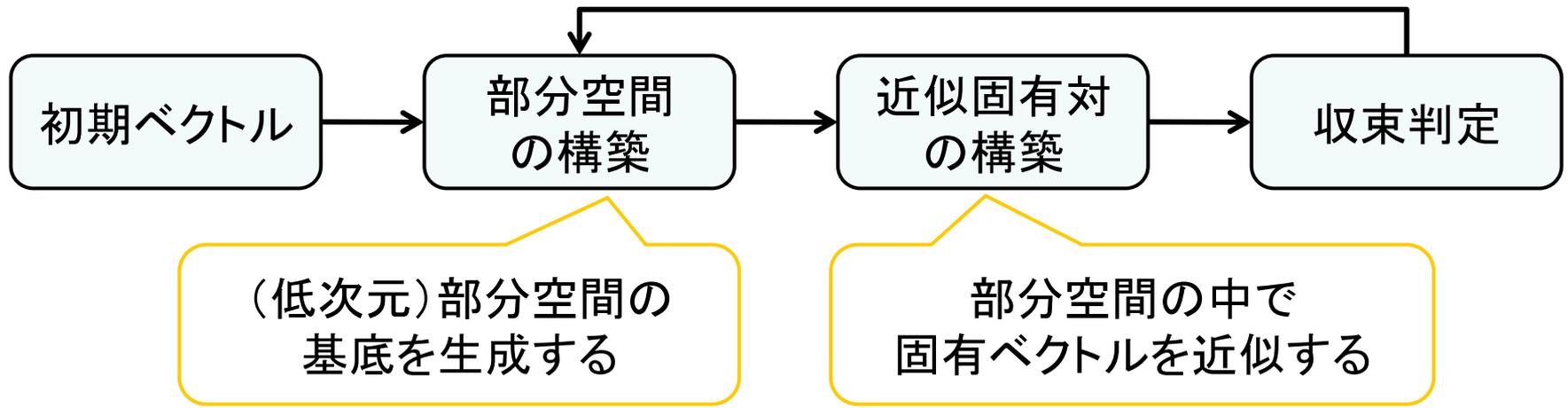
Arnoldi 法 [Arnoldi, 1951]

Lanczos 法 [Lanczos, 1950]

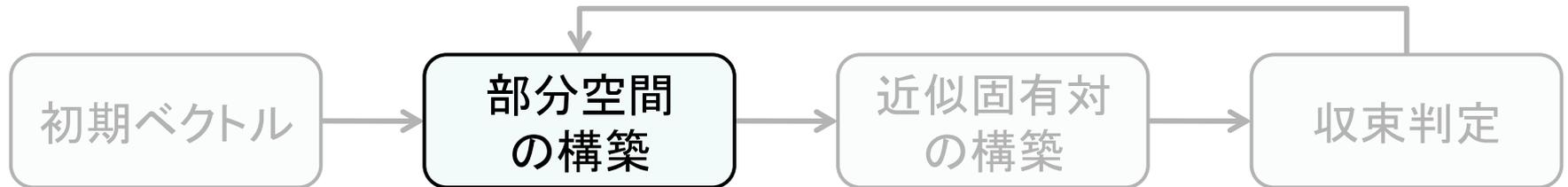
任意性を持った 3 つの行列を
導入し, Arnoldi 法を拡張

様々な解法の構築を可能にし, 高速解法の導出を目指す

反復法



Arnoldi 法



部分空間の構築

▶ Krylov部分空間:

$$\mathcal{K}_k(B^{-1}A, \mathbf{u}_0) := \text{span}\{\mathbf{u}_0, (B^{-1}A)\mathbf{u}_0, \dots, (B^{-1}A)^{k-1}\mathbf{u}_0\}$$

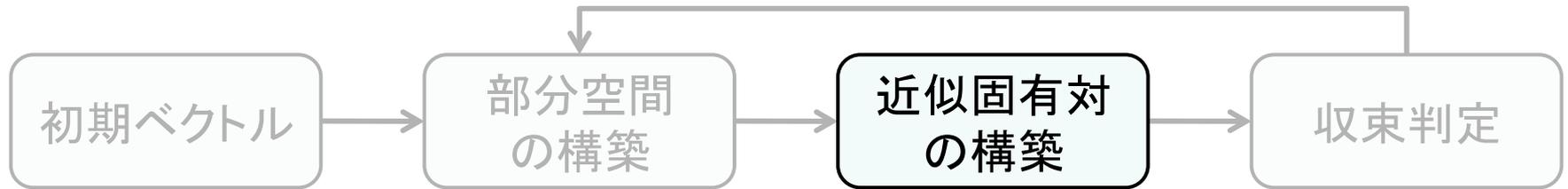
▶ 基底: $V_k := [\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_k]$

▶ 基底の直交性: $V_k^* B^* B V_k = I_k$

$$Ax = \lambda Bx \Rightarrow B^{-1}Ax = \lambda x$$

固有対不変

Arnoldi 法



近似固有対の構築

▶ 近似固有ベクトル: $\mathbf{x}_k = V_k \mathbf{y}_k$ ($\mathbf{y}_k \in \mathbb{C}^k$)

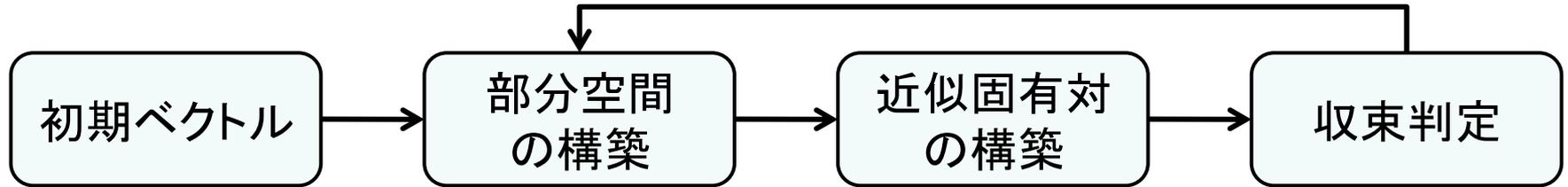
▶ Petrov-Galerkin条件: $V_k^* B^* \mathbf{r}_k = \mathbf{0}$

(残差ベクトル: $\mathbf{r}_k := A\mathbf{x}_k - \theta_k B\mathbf{x}_k$)

▶ 小規模固有値問題に帰着: $H_k \mathbf{y}_k = \theta_k \mathbf{y}_k$ (H_k :ヘッセンベルグ行列)

$k \times k$ 行列

Arnoldi 法の拡張



部分空間の構築

- ▶ 部分空間: $\mathcal{K}_k(B^{-1}A, u_0)$
- ▶ 基底の直交性: $V_k^* B^* B V_k = I_k$

Arnoldi(M, W, G) 法

- ▶ $\mathcal{K}_k(M^{-1}A, u_0)$
- ▶ $V_k^* W V_k = I_k$

近似固有対の構築

- ▶ 残差条件: $r_k \perp \text{span}\{B V_k\}$
- ▶ 小規模固有値問題: $H_k y_k = \theta_k y_k$

- ▶ $r_k \perp \text{span}\{G V_k\}$
- ▶ $(V_k^* G^* A V_k) y_k = \theta_k (V_k^* G^* B V_k) y_k$

$W = G^* B$ のとき, I

M, W, G の設定

- ▶ 部分空間 $\mathcal{K}_k(M^{-1}A, u_0)$ を定める行列 M に着目
- ▶ 従来法では, 基底生成毎に $v \leftarrow B^{-1}q$ or $Bv = q$ の計算が必要

Arnoldi(M, W, G) 法

● 線形方程式を直接法で解く

Arnoldi 法 ▶ LU分解

Lanczos 法 ▶ Cholesky分解

● 逆行列(B^{-1})の近似

解法 a ▶ Neumann級数展開

● ベクトル($B^{-1}q$)の近似

解法 b ▶ Krylov部分空間法

解法 c ▶ 定常反復法

ベクトルの近似を用いた解法

線形方程式 $Bv = q$ を近似的に解く

● Krylov部分空間法を用いた解法

▶ CG法, GMRES法など

▶ 停止条件: $\frac{\|q - Bv^{(i)}\|_2}{\|q\|_2} \leq \delta$

($v^{(i)}$) : Krylov 部分空間法における i 反復目の近似解)

▶ 各基底生成において M が一致するとは限らない

➡ δ の値が大きい場合, 厳密には Arnoldi(M, W, G) 法に含まれない

▶ Neumann級数展開や定常反復法に比べて
汎用性は高いと期待できる

ベクトルの近似を用いた解法

● エルミート一般化固有値問題向け解法

数値解法	M	W	G
Lanczos法	Cholesky 分解	B	I
解法1-b	ICCG 法	B	I

● 非エルミート一般化固有値問題向け解法

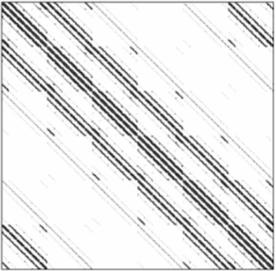
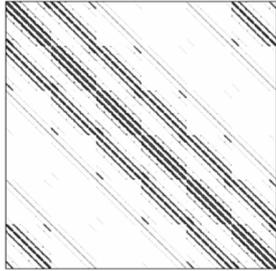
数値解法	M	W	G
Arnoldi法	LU 分解	B^*B	B
解法2-b	ILU(0) 付き GMRES 法	B^*B	B

数値実験

- 目的
 - ▶ 行列 M の違いによる Arnoldi(M, W, G) 法の収束性を検証
- 内容
 - ▶ 絶対値最大固有値と対応する固有ベクトルを求め、残差の収束履歴と収束するまでの計算時間を調べる
- テスト問題
 - ▶ 1: 電子状態計算 [Iguchi et al., Phys. Rev. Lett. 99 (2007)]
 - ▶ 2: 電気工学 [Matrix Market] (鳥取大学 星健夫先生)
 - ▶ 3: 乱数行列
- 収束判定
 - ▶ $\| Ax_k - \theta_k Bx_k \|_2 \leq 10^{-8}$ ($\| x_k \|_2 = 1$)
- 計算機環境
 - ▶ CPU : Xeon 2.8GHz
 - ▶ Memory : 4GB

テスト問題

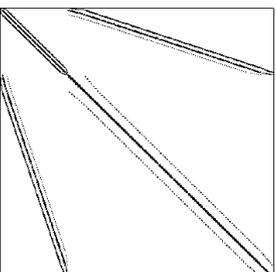
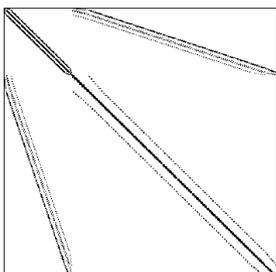
例題1 (電子状態計算)

行列 A		行列 B
7,776	n	7,776
3,619,104	n_{nz}	3,619,104
	非零構造	

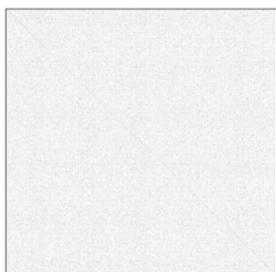
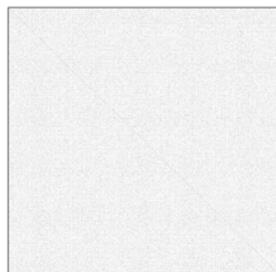
- ▶ n : 行列サイズ
- ▶ n_{nz} : 非零要素数

(A: エルミート, B: 正定値エルミート)

例題2 (電気工学)

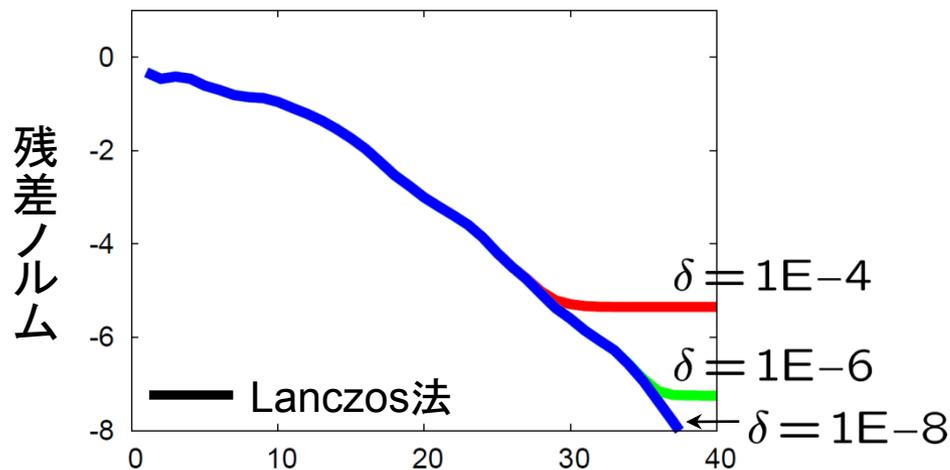
行列 A		行列 B
782	n	782
7,514	n_{nz}	5,982
	非零構造	

例題3 (乱数行列)

行列 A		行列 B
8,000	n	8,000
12,800,000	n_{nz}	12,800,000
	非零構造	

実験結果(収束履歴)

問題 1

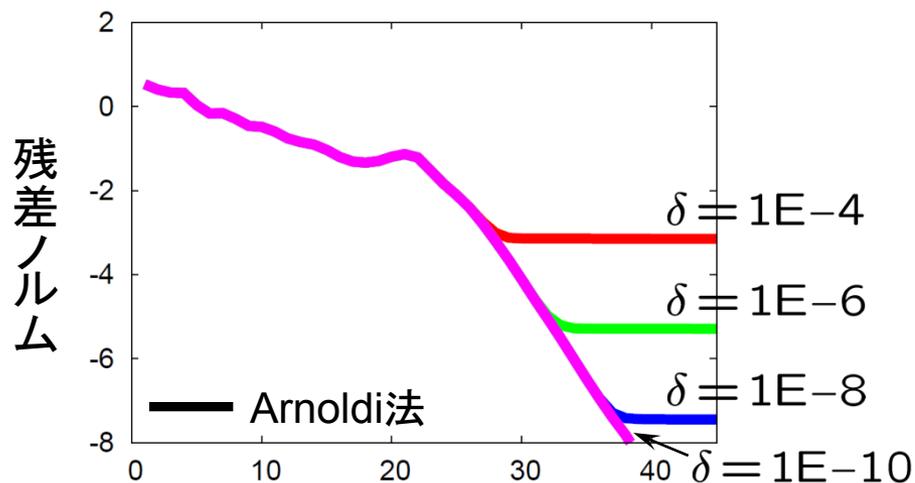


▶ 横軸: 反復回数

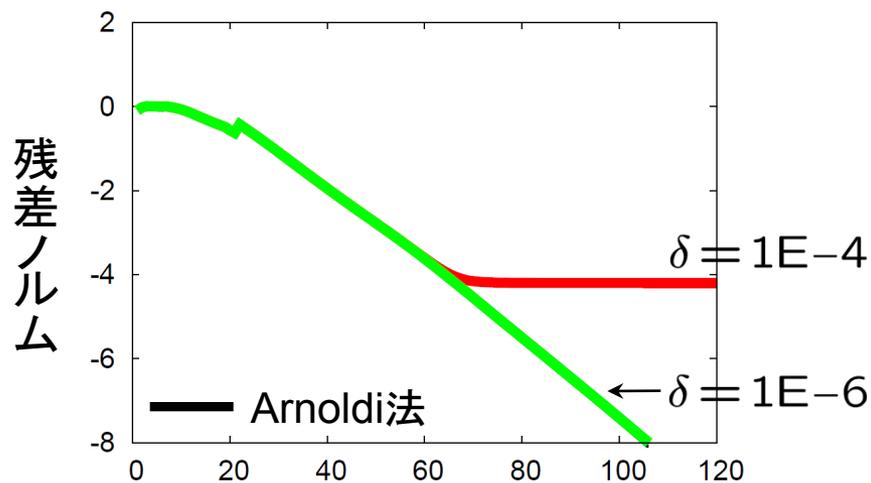
▶ 停止条件: $\frac{\|q - Bv^{(i)}\|_2}{\|q\|_2} \leq \delta$

▶ 線形方程式を高精度で解くほど
残差は減少する傾向にある

問題 2

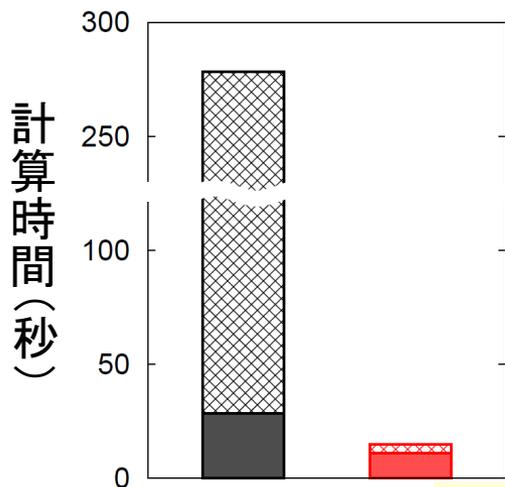


問題 3



実験結果(計算時間)

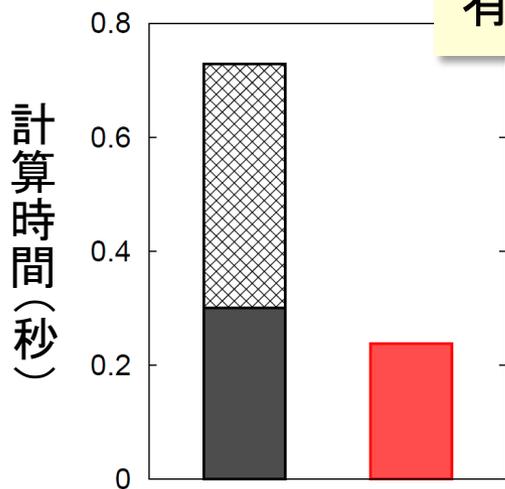
問題 1



● $\delta = 10^{-12}$ の場合の計算時間

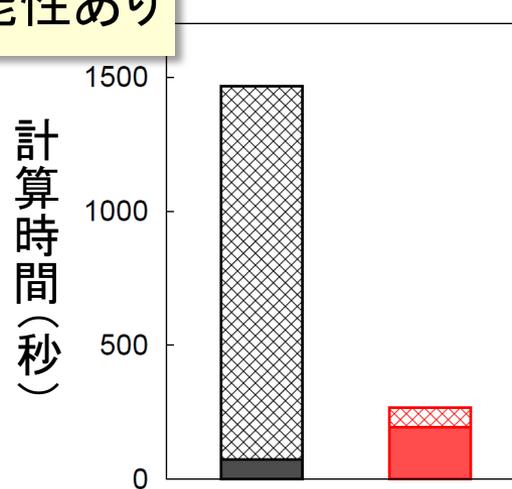
- 従来法(行列分解)
- 従来法(その他)
- Krylov部分空間法を用いた解法(行列の不完全分解)
- Krylov部分空間法を用いた解法(その他)

問題 2



▶ 実用的な解法として有効に機能する可能性あり

問題 3



指定された点近傍の固有値

✓ シフト付逆反復

- 問題の変更

$$Ax = \lambda Bx \quad \Longrightarrow \quad \begin{array}{l} \text{絶対値最大の } \lambda \text{ と} \\ \text{対応する } x \end{array}$$

$$\sigma \in \mathbb{C}, \sigma \neq \lambda \quad \downarrow$$

$$B\hat{x} = \hat{\lambda}(A - \sigma B)\hat{x} \quad \Longrightarrow \quad \begin{array}{l} \text{絶対値最大の } \hat{\lambda} \text{ と} \\ \text{対応する } \hat{x} \end{array}$$

$$\hat{\lambda} = \frac{1}{\lambda - \sigma}, \quad \hat{x} = x$$

||
 σ 近傍の λ と
対応する x

数値実験

指定された点近傍の固有値が得られるかどうか調べる

テスト問題: MHD1280

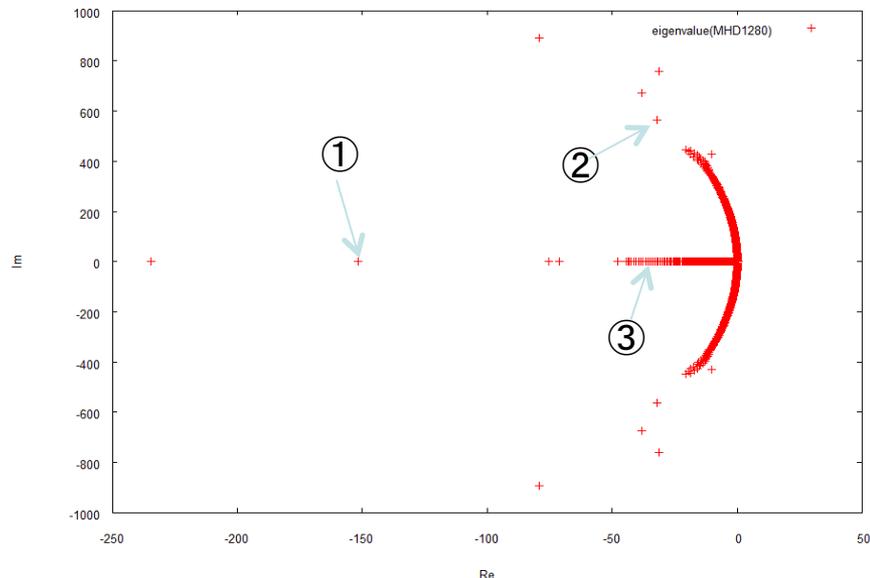
計算終了条件:

$$\|r_k\|_2 \leq 1.0 \times 10^{-8}$$

計算機環境

CPU: Intel Xeon X5670 (2.9 GHz)

メモリ: 24GB



計算された固有値の誤差

指定された値	Arnoldi 法	Arnoldi(M, W, G) 法
$\sigma = -150.0$	5.5×10^{-8}	5.5×10^{-8}
$\sigma = -32.0 + 560.0i$	5.6×10^{-8}	5.6×10^{-8}
$\sigma = -39.5$	8.4×10^{-7}	8.4×10^{-7}

まとめと今後の課題

✓ まとめ

- 一般化固有値問題に対する Arnoldi(M, W, G) 法
 - › Arnoldi 法の拡張
 - › M に着目 → 具体的な解法の導出
- 数値実験の結果
 - › 解法の有効性を確認

✓ 今後の課題

- › W, G に着目 → 具体的な解法の導出