ハイパフォーマンス
コンピューティング 52－9
（1994． 7． 23）

非対称行列の固有値問題における射影法の加速の一般化

西田 晃　　小柳 義夫
東京大学理学部情報科学科

概要

経済モデルやマルコフ鎖モデル、また構造解析や流体力学において、非対称行列の固有値を実部の大きな順に求めることが必要になる場合がある。部分空間反復法がこの分野では最もよく用いられてきたが、これは絶対値の大きな固有値を求めている。また対称な場合には Krylov 部分空間に基づく方法の方が優れており、非対称行列においても Arnoldi 法、非対称 Lanczos 法などが考えられるが、これらは反復回数が大きくなり過ぎる場合があり、また求める固有値が密集している場合には収束が遅い。

この研究では、Chebyshev 多項式を用いて不要な固有値を減衰させる手法を一般化し、Krylov 部分空間に基づく方法にこれを適用した時の収束の性質を詳しく調べ、適用範囲を明らかにする。合わせて並列化についても検討する。

A Generalization of Acceleration of Projection Method in Nonsymmetric Eigenvalue Problems

Akira NISHIDA, Yoshio OYANAGI
Department of Information Science, Faculty of Science, the University of Tokyo
7-3-1 Hongo, Bunkyo-ku, Tokyo, 113, JAPAN

Abstract

In economical modeling, Marcov chain modeling, structural analysis and fluid dynamics, there are cases where a few of eigenvalues of a large nonsymmetric matrix with largest real parts. The subspace iteration method has been the preferred algorithm in this area. However, this algorithm computes the eigenvalues of largest modulus. In the symmetric case Krylov subspace method is superior to the subspace iteration method. In the nonsymmetric case there are such algorithms as Arnoldi's method and Lanczos biorthogonalization method. However, the number of steps sometimes is too large in order to ensure convergence of the process. In other cases the wanted eigenvalues are clustered. This study generalizes the method which damps the components of the initial vector in the direction of the unwanted eigenvectors using the Chebyshev iteration techniques, analyses the behavior of convergence and clarifies the validity of this method. We also discuss the implementation of the Chebyshev accelerated eigensolver.

1 はじめに

実際上の問題において、非対称大規模行列の固有値のうち実部の大きなものを求めることが必要となる場合がある。このための方法としては、射影法の系統である冪乗法、Arnoldi 法や 非対称 Lanczos 法が知られており、第 m 段において $\{v_i, Av_i, ..., A^{m-1}v_i\}$ で span される Krylov 部分空間の基底 $\{v_i\}$, $i = 1, .., m$ を生成する。しかしこれらの方法では、求める固有値を精度良く得ようとする場合や固有値が密集している場合に、必要な反復回数が大きくなる。

そこで初期ベクトル z_0 のうち、求める固有ベクトル成分のみを増幅させるような i 次多項式 p_i を用いて $z_i = p_i(A)z_0$ とすれば、z_i 中でこの成分を優越させることができる。固有値を $\lambda_1 \geq \cdots \geq \lambda_N$、対応する固有ベクトルを $u_1, ..., u_N$ として λ_k までの固有値を求めるためには

$$z_0 = \sum_{i=1}^{N} \theta_i u_i, \qquad z_n = \sum_{i=1}^{k} \theta_i p_n(\lambda_i) u_i + \sum_{i=k+1}^{N} \theta_i p_n(\lambda_i) u_i$$

において、$\lambda_{k+1}, ..., \lambda_N$ で小さな値をとる多項式 p_n を計算すればよい。

あらかじめ固有値の分布を知ることはできないので、射影法の各反復で得られる近似固有値をもとに多項式を定める。対称行列の実固有値の場合については Chebyshev 多項式を用いてこれを決定する方法が以前から知られているが、複素変数の場合この方法は固有値を含む最適な楕円について Chebyshev 多項式を適用する形に拡張できる。Manteuffel は最適な楕円の計算法を提案し、楕円の境界上での最大値を最小にする多項式を求めることによって連立一次方程式の解法に適用した。Saad はこれを固有値解法に適用したが、この方法は高次方程式を解く必要があるなどアルゴリズムが複雑である。一方固有値を含む凸包の境界上で最小二乗多項式を考える方法は連立一次方程式の解法として知られているが、これを固有値解法に適用することができる。

非対称行列の固有値は複素空間上に分布するので、不要な固有値からなる凸包を構成すれば、最大値の原理から $p(z)$ は H 内での最大値をこの境界上でとる。したがって境界上でのノルムを最小にする多項式を求めればよい。

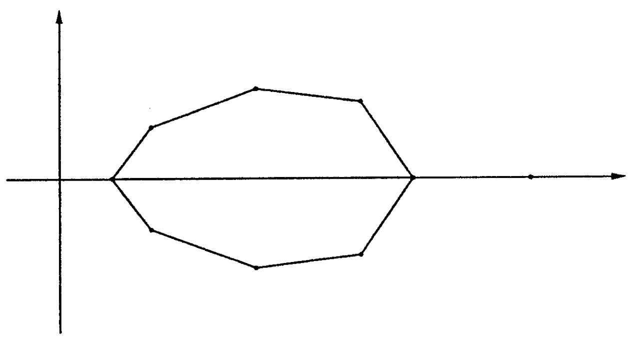

図 1: 固有値分布と凸法の構成法

Chebyshev 多項式は実区間 $[-1, 1]$ での直交多項式であり、これを用いて内積

$$< p, q >= \int_{\partial H} p(\lambda)\overline{q(\lambda)} w(\lambda)|d\lambda| = \sum_{\nu=1}^{\mu} \int_{E_\nu} p(\lambda)\overline{q(\lambda)} w_\nu(\lambda)|d\lambda|,$$

$$c_\nu = \frac{1}{2}(h_\nu + h_{\nu-1}), \qquad d_\nu = \frac{1}{2}(h_\nu - h_{\nu-1}),$$

$$w_\nu = \frac{2}{\pi}|d_\nu^2 - (\lambda - c_\nu)^2|^{-\frac{1}{2}}$$

及びノルム $\| p \|_w =< p, p >^{1/2}$ を考える。ただし凸包 H の各頂点を h_ν, $\nu = 1, .., \mu$、辺 $h_{\nu-1}h_\nu$ を E_ν とする。凸包の各辺についてそれぞれ

$$\frac{\lambda - c_\nu}{d_\nu}, \quad \nu = 1, .., \mu$$

を変数とする n 次以下の Chebyshev 多項式によって展開されるよう n 次直交多項式 $t_n(\lambda)$ をつくり、これを用いて多項式 p_n を定めれば、内積 $<\cdot,\cdot>$ は Chebyshev 多項式の直交関係を用いて簡単に計算できる。$p_n(\lambda_1)$ で正規化すればこの多項式は条件を満たす。

射影法の 1 ステップ毎にこの手続きから得られる多項式を近似固有ベクトルに対して適用することによって、この方法の問題点である収束の遅さが改善されるものと期待される。このような手法で生成した多項式の利用法を主に射影法系統の固有値解法への適用について一般化し、それぞれの場合について収束の様子など詳しい性質を調べることによって適用範囲を明らかにすることが本研究の目的である。

2 最小二乗多項式の生成

最小二乗多項式は実際には以下のように生成すればよい。Chebyshev 多項式

$$T_j(\frac{\lambda - c_\nu}{d_\nu}) = T_j(\xi) \qquad j = 0, 1, ..., n \quad (\xi = \frac{\lambda - c_\nu}{d_\nu} \text{は実数})$$

を用いて基底

$$t_j(\lambda) = \sum_{i=0}^{j} \gamma_{i,j}^{(\nu)} T_i(\xi)$$

をつくる。これは互いに直交し、かつ各線分上で小さな値を取る。

また Chebyshev 多項式の性質から、$t(\lambda)$ は

$$\beta_{k+1} t_{k+1}(\lambda) = (\lambda - \alpha_k) t_k(\lambda) - \delta_k t_{k-1}(\lambda).$$

を満たす。これに上式を代入すれば

$$\beta_{k+1} t_{k+1}(\lambda) = (d_\nu \xi + c_\nu - \alpha_k) \sum_{i=0}^{k} \gamma_{i,k}^{(\nu)} T_i(\xi) - \delta_k \sum_{i=0}^{k-1} \gamma_{i,k-1}^{(\nu)} T_i(\xi).$$

また

$$\xi T_i(\xi) = \frac{1}{2}[T_{i+1}(\xi) + T_{i-1}(\xi)] \quad i > 0, \qquad \xi T_0(\xi) = T_i(\xi)$$

が成り立つことを用いて、Chebyshev 多項式の直交性から係数 γ についての関係式

$$\beta_{k+1} \gamma_{i,k+1}^{(\nu)} = \frac{d_\nu}{2}[\gamma_{i+1,k}^{(\nu)} + \gamma_{i-1,k}^{(\nu)}] + (c_\nu - \alpha_k)\gamma_{i,k}^{(\nu)} - \delta_k \gamma_{i,k-1}^{(\nu)} \quad i = 0, 1, ..., k+1$$

$$(\gamma_{-1,k}^{(\nu)} = \gamma_{1,k}^{(\nu)}, \quad \gamma_{i,k}^{(\nu)} = 0 \quad i > k)$$

が導かれる。ここで $\sum'^{n}_{i=0} a_i = 2a_0 + \sum_{i=1}^{n} a_i$ とすれば、

$$\beta_{k+1} = < t_{k+1}, t_{k+1} >^{1/2}$$

$$= \sum_{\nu=1}^{\mu} \int_{E_\nu} t_{k+1} \overline{t_{k+1}} w_\nu(\lambda) |d\lambda| = \sum_{\nu=1}^{\mu} \sum{}'^{k+1}_{i=0} \gamma_{i,k+1}^{(\nu)}{}^2.$$

また α については

$$\beta_{k+1} t_{k+1}(\lambda) = (\lambda - \alpha_k) t_k(\lambda) - \delta_k t_{k-1}(\lambda)$$

から直交性を用いて

$$\alpha_k = < \lambda t_k, t_k > = \sum_{\nu=1}^{\mu} (c_\nu \sum{}'^{k}_{i=0} \gamma_{i,k}^{(\nu)}{}^2 + d_\nu \sum{}'^{k}_{i=0} \gamma_{i,k}^{(\nu)} \gamma_{i+1,k}^{(\nu)})$$

となり、以上から係数 γ を計算することができる。$s_n(\lambda) = \sum_{i=0}^{n-1} \eta_i t_i(\lambda)$ として多項式のノルム

$$J(\eta) = \| 1 - (\lambda - \lambda_1) s_n(\lambda) \|_w$$

が最小となる係数 $\eta = (\eta_0, \eta_1, ..., \eta_{n-1})^T$ を見つける。

$$\lambda s_n(\lambda) = \sum_{i=0}^{n-1} \eta_i \lambda t_i(\lambda) = \sum_{i=0}^{n-1} \eta_i [\beta_{i+1} t_{i+1}(\lambda) + \alpha_i t_i(\lambda) + \delta_i t_{i-1}(\lambda).]$$

より

$$T_n = \begin{bmatrix} \alpha_0 & \delta_1 & & & \\ \beta_1 & \alpha_1 & \delta_2 & & \\ & \beta_2 & \alpha_2 & \ddots & \\ & & & \ddots & \delta_{n-1} \\ & & & \ddots & \alpha_{n-1} \\ & & & & \beta_{n-1} \end{bmatrix}$$

とすれば、$1-(\lambda-\lambda_1)s_n(\lambda)$ は底 $\{t_i\}_{i=1,\dots,n}$, $e_1=(1,0,\dots,0)^T, e_1'=(1,1,\dots,1)^T$ として $e_1+\lambda_1 e_1'-T_n\eta$ を係数として持つ。

$$p(\lambda)=\sum_{i=0}^{n}\eta_i t_i(\lambda), \quad q(\lambda)=\sum_{i=0}^{n}\theta_i t_i(\lambda)$$

$$\eta=(\eta_0,\eta_1,\dots,\eta_n)^T, \theta=(\theta_0,\theta_1,\dots,\theta_n)^T$$

において

$$m_{i+1,j+1}=< t_{i+1},t_{j+1} >= 2\mathrm{Re}\{\sum_{\nu=1}^{\mu}{\sum_{k=0}^{i}}' \gamma_{k,j}^{(\nu)}\gamma_{k,i}^{(\nu)}\}, \quad i=0,1,\dots,j$$

とすれば

$$< p,q >= (M_n\eta,\theta)$$

であるから、

$$J(\eta)^2=[e_1+\lambda_1 e_1'-T_n\eta]^H M_n[e_1+\lambda_1 e_1'-T_n\eta].$$

$M_n=LL^T$ と分解すれば、

$$J(\eta)=\| L^T[e_1+\lambda_1 e_1'-T_n\eta] \| .$$

$F_n=L^T T_n$ は上 Hessenberg 形であるので、ベクトルに平面回転を加えてこれを上三角形に変換して計算すればよい。このようにして求めた多項式が最小二乗性を満たすことは確認している。

3 固有値解法への適用

このような Chebyshev 多項式による加速法はすでに Arnoldi 法等の Krylov 部分空間法には適用されており、収束の大幅な改善が得られている。しかし実部の大きな固有値を求める点ではこのような方法に限る必要はなく、固有値解法一般にこの方法を拡張することができる。

固有値解法のうち Krylov 部分空間法について考える。これは $b_r=A^r b_0$ で定義されるベクトルにおいて

$$b_n+p_{n-1}b_{n-1}+\cdots+p_0 b_0=0$$

の関係から特性多項式 $\lambda^n+p_{n-1}\lambda^{n-1}+\cdots+p_0$ を決める。X を独立な n 個のベクトル x_i を列に持つ行列として

$$h_{r+1}b_{r+1}=Ab_r-\sum_{i=1}^{r}h_{ir}b_i \quad (h_{r+1}\text{はスカラーで通常 }1)$$

により、b_1 から b_2 以下を b_{r+1} が $x_1,\dots,x_r$ と直交するよう h_{ir} を定めることによって b_i を再直交化する。実際には b_{r+1} が零ベクトルとなる場合を考えて

$$c_1=b_1, \quad b_{r+1}=Ac_r-\sum_{i=1}^{r}h_{ir}c_i, \quad k_{r+1}c_{r+1}=b_{r+1} \quad (b_{r+1}\neq 0)$$

$$c_{r+1}\text{は任意の } x_1,\dots,x_r \text{ に直交する非零ベクトル} \quad (b_{r+1}=0)$$

について考える。これは H を第1劣対角成分を 1 とする上 Hessenberg 行列として

$$AC=CH \qquad (\text{直交条件は } L \text{ を下三角行列として } X^TC=L)$$

と書ける。この時 X を単位行列にとったものが Hessenberg 法であり、X を C 自身にとったものが Arnoldi 法であるが、C^TC は対角行列となるので、正規化して直交行列とすれば、

$$AC = CH$$

での C, H は Householder 法で生成される行列に等しい。

Lanczos 法では、c_i を A から導くのと同様にして x_i を A^T から求める。すなわち

$$k_{r+1}c_{r+1} = b_{r+1} = Ac_r - \sum_{i=1}^{r} h_{ir}c_i$$

$$k^*_{r+1}c^*_{r+1} = b^*_{r+1} = A^T c^*_r - \sum_{i=1}^{r} h^*_{ir}c^*_i$$

において h_{ir} は b_{r+1} が $c^*_1, ..., c^*_r$ に、h^*_{ir} は b^*_{r+1} が $c_1, ..., c_r$ に直交するよう取る。この点でこれらの方法は共通の視点から考えることができ、Arnoldi 法に限らず反復による方法一般に応用できることが分かる。

Arnoldi 法では各反復 $j = 1, ..., m$ について

$$\hat{v}_{j+1} = Av_j - \sum_{i=1}^{j} h_{ij}v_i, \quad h_{ij} = (Av_j, v_i), \quad i = 1, ..., j$$

$$h_{j+1,j} = \| \hat{v}_{j+1} \|$$

$$v_{j+1} = \hat{v}_{j+1}/h_{j+1,j}$$

のような計算を行なうことによって Krylov 部分空間 $K_m = \mathrm{span}\{v_1, Av_1, ..., A^{m-1}v_1\}$ の正規直交基底 $V_m = [v_1, v_2, ..., v_m]$ をつくる。A の固有値は h_{ij} を要素に持つ上 Hessenberg 行列 H_m を用いて $H_m = V_m^T AV_m$ により近似できる。実際には記憶容量の関係からこれを反復法として用いる。これによって得られた近似固有値をもとに Chebyshev 反復を行ない、得られた多項式 p_n について、A のかわりに $p_n(A)$ を用いて Arnoldi 法の反復を行なう。

現在 Chebyshev 多項式を用いた方法は非対称行列に関しては Arnoldi 法、対称行列に関しては部分空間反復法に適用されているのみである。しかし反復的に固有値を求める方法であれば、Chebyshev 反復によって Arnoldi 法の場合と同様に実部の大きな固有値を求める場合に有効な方法になると期待される。特に、逆反復や原点移動などの冪乗法特有の技法との関連については殆んど知られていない。

一般の行列に逆反復を適用する場合、これを上 Hessenberg 形に変換してから LU 分解することにより計算量を小さくできる。近似固有値を p として $(A-pI)^{-1}$ について反復を行なうことによって収束を速めているが、近似固有値の精度によってその収束は大きな影響を受ける。また冪乗法自体の問題として、主要固有値（絶対値最大のもの）が共役複素数の場合冪乗法は収束せず、また行列が非線形単因子を持つ場合にはこれに対応する主要固有ベクトルの収束が遅くなる。この時 p によらず $(A - pI)^{-1}$ も非線形単因子を持つため逆反復の効果は小さいが、このように逆反復が有効でない場合にも、Chebyshev 反復を用いることによって収束を加速できるものと期待できる。

並列化に関しては Sadkane が Arnoldi 法のブロック分割の形で Chebyshev-Arnoldi 法について実現している。ただしここでは最大最小多項式を用いて Chebyshev 反復を行なっており、この部分の並列化については考えられていない。Chebyshev 反復法に関して並列化を考える場合、最小二乗多項式の計算は並列性が高いため、現在この並列化を検討中である。

4 まとめ

本研究では Chebyshev 多項式によって生成した最小二乗多項式を固有値解法に適用することを考え、従来 Arnoldi 法など一部の解法にのみ適用されていた Chebyshev 反復法がより一般化できることを示した。最小二乗多項式の最適性には議論の余地があり、最大最小多項式も含めて多項式の生成法について一層の検討を加えていきたい。具体的には、Lanczos 法、Arnoldi 法、部分空間反復法などの射影法に対するこれらの手法の適用を一般化することを目的として現在 Chebyshev 反復法の有効性について数値実験により調べている段階であり、適用範囲について有意義な知見が得られるものと考えている。

参考文献

[1] F. Chatelin. *Valeurs Propres de Matrices.* Masson, Paris, 1988.

[2] D. Ho. "Tchebychev acceleration technique for large scale nonsymmeric matrices". *Numer. Math*, 56, 1990.

[3] T. A. Manteuffel. "The Tchebychev iteration for nonsymmetric linear systems". *Numer. Math.*, 28, 1977.

[4] Y. Saad. "Iterative solution of indefinite symmetric linear systems by methods using orthogonal polynomials over two disjoint intervals". *SIAM J. Numel. Anal.*, 20(4):784–811, 1983.

[5] Y. Saad. "Chebyshev acceleration techniques for solving nonsymmetric eigenvalue problems". *Math. Comp.*, 42(166), 1984.

[6] Y. Saad. "On the condition number of some Gram matrices arising from least squares approximation in the complex plane". *Numer. Math.*, 48, 1986.

[7] Y. Saad. "Least squares polynomials in the complex plane and their use for solving nonsymmetric linear systems". *SIAM J. Numer. Anal.*, 24(1), 1987.

[8] M. Sadkane. "A block Arnoldi-Chebyshev method for computing the leading eigenpairs of large sparse unsymmetric matrices". *Numer. Math.*, 64, 1993.

[9] M. Sadkane. "Block-Arnoldi and Davidson methods for unsymmetric large eigenvalue problems". *Numer. Math.*, 64, 1993.

[10] J. H. Wilkinson. *The algebraic eigenvalue problem.* Clarendon Press, Oxford, 1965.