

準直交ランチョス法による大規模固有値問題の解法

梅 垣 悠[†] 野 寺 隆^{††}

ランチョス法は、大型で疎な対称行列の固有値問題を解くための反復解法であり、固有値と固有ベクトルを求める算法の1つである。しかし、丸め誤差の影響によりランチョスベクトルの直交性は崩れ、固有値と固有ベクトルの精度を悪化させる。これを改善するために、ランチョスベクトルの再直交化を行い、3重対角行列から上 Hessenberg 行列に変換することで、Ritz ベクトルを元の固有ベクトルに収束させる手法について述べる。また、新しい残差ノルムの推定法について述べる。

A key to Solution of Large Eigenvalue Problem by Semiorthogonal Lanczos method

HARUKA UMEGAKI[†] and TAKASHI NODERA^{††}

Lanczos method is an iterative method for solving eigenvalue problems of large symmetric matrices and is powerful tool for computing eigenvalues and eigenvectors. According to iteration proceeds, however, the orthogonality of the Lanczos vectors is lost because the orthogonality is affected by rounding errors. Accuracy of eigenvalues and eigenvectors makes worse. To overcome this problem, Lanczos vectors must be reorthogonalized and tridiagonal matrix can be adjusted into upper Hessenberg matrix. This can cause the Ritz vectors to be good approximations to the eigenvectors. We also show an new estimate of norm of residual.

1. はじめに

ランチョス法は、理工学分野における科学技術計算などで利用されており、対称行列を係数とする次のような固有値問題

$$A\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}, \quad A: \text{対称} \quad A \in \mathbf{R}^{n \times n} \quad \mathbf{x} \in \mathbf{R}^n \quad (1)$$

を解くための解法の1つである。

ランチョス法は、両端の固有値から内側に向かって数個の固有値は精度よく求まる。しかし、ランチョス法の反復が進む度に、ランチョスベクトルの直交性が丸め誤差により悪化することが広く知られている。この直交性の悪化により、Ritz ベクトルが元の固有ベクトルに対して収束できなくなる。

そこで直交性を改善するために、様々な方法が考えられている。直交性の改善方法は、2つに分けられる。その1つは、直交性を完全に保つ方法であり、反復の度に再直交化を行う FOR(Full Orthogonalization) である。もう1つは、ランチョスベクトルの直交性をある程度保つ方法である。一般にこれは、ランチョスベクトルの準直交性を保つといい、SO(Selctive Or-

thogonalization) や PRO(Partial Orthogonalization) がある。本稿では、Stewart¹⁾ により提案されたランチョス法に PRO を用いる方法について考察し、数値実験により有効性を評価する。

まず2章でランチョス法について述べる。3章では準直交ランチョス法について述べる。4章では、残差ノルムの推定法について述べる。5章では、数値実験を通して準直交ランチョスとランチョス法の比較を行うことにする。最後に、6章において結論を述べる。

2. ランチョス法

ランチョス法は、大型疎の対称行列の固有値問題を解くために提案された手法で、対称行列 A と $\|u\|_2 = 1$ の非ゼロベクトルを用いて、クリロフ部分空間上に正規直交基底を構成する算法である。クリロフ部分空間とは、次のように構成する空間である。

$$\begin{aligned} \mathcal{K}_m(A, u_1) &= \text{span}(u_1, u_2, \dots, u_m) \\ &= \text{span}(u_1, Au_1, \dots, A^{m-1}u_1) \end{aligned}$$

ここで、ベクトル列 $\{u_1, u_2, \dots, u_m\}$ はランチョスベクトルと呼ばれている。このランチョスベクトルは、 $m \geq 2$ とすると、次のように構成なる。

$$\begin{cases} \beta_1 u_2 = Au_1 - \alpha_1 u_1 \\ \beta_m u_{m+1} = Au_m - \alpha_m u_m - \beta_{m-1} u_{m-1} \end{cases} \quad (2)$$

ただし、

[†] 慶應義塾大学大学院理工学研究科

Graduate School of Science and Technology, Keio University

^{††} 慶應義塾大学理工学部

Faculty of Science and Technology, Keio University

$$AU_{m-1}w = U_{m-1}(T_{m-1} + \beta_{m-1}we_{m-1}^T)w + \beta_{m-1}\tilde{u}_me_{m-1}^Tw \quad (8)$$

また、式 (6) の $U_{m-1}we_m^TT_m$ は、次のように記述できる。

$$U_{m-1}we_m^TT_m = t_{m,m-1}U_{m-1}we_{m-1}^T + t_{m,m}U_{m-1}we_m^T \quad (9)$$

式 (8) と式 (9) を式 (6) に代入し整理すると、次のようになる。

$$A(U_{m-1}, \tilde{u}_m) = (U_{m-1}, 0)(T_m + t_{m,m-1}we_{m-1}^T + (x + t_{m,m}w - \beta_{m-1}we_{m-1}^Tw - T_{m-1}w)e_m^T) + \tilde{u}_m(e_m^TT_m + (\eta - \beta_{m-1}e_{m-1}^Tw)e_m^T) + \tilde{v}e_m \quad (10)$$

ここで、次の成分を持つような行列 H_m を定義する。

$$\begin{cases} h_{1:m-1,m-1} = t_{1:m-1,m-1} + t_{m,m-1}w \\ h_{1:m-1,m} = t_{1:m-1,m} - T_{m-1}w \\ \quad - \beta_{m-1}we_{m-1}^T + t_{m,m} + x \\ h_{m,m} = t_{m,m} - \beta_{m-1}e_{m-1}^Tw + \eta \\ h_{m,m-1} = t_{m,m-1} \end{cases} \quad (11)$$

式 (10) は、上記の H_m を用いることによって、次式のようになる。

$$A(U_{m-1}, \tilde{u}_m) = (U_{m-1}, \tilde{u}_m)H_m + \tilde{v}e_m^T \quad (12)$$

式 (11) で定義した H_m は上 Hessenberg 行列であるので、式 (12) は 3 重対角行列から上 Hessenberg 行列への変換ができることを示している。

次の節では、準直交ランチョス法のアルゴリズムを示す。

3.2 準直交ランチョス法のアルゴリズム

準直交ランチョス法において準直交性が保たれている場合のアルゴリズムを図 2 に示す。 β_m がほぼ 0 になるまで反復を行う。さらに、図 3 において、準直交性が崩れた場合に行う再直交化のアルゴリズムを示す。

次に、 H_m を用いて行列 A の固有組を求める方法を述べる。

3.3 準直交ランチョス法における固有組の求め方

H_m の固有組が (θ_H, w_H) ならば、行列 A の固有組を $(\theta_H, U_m w_H)$ で近似する。 H_m の固有組は CLAPACK²⁾ の “dhseqr” 及び “dhsein” を用いて求めた。“dhseqr” は、上 Hessenberg 行列の固有値を求めるルーチンで、“dhsein” は上 Hessenberg 行列の固有ベクトルを逆反復法で求めるルーチンである。

4. 残差ノルムの推定方法

(λ, z) を A の固有組とし、次のようにこの残差ノルムを定義する。

$$\|Az - \lambda z\|_2$$

この値を求めることで、固有組の精度を比較すること

```

01:   $u_1$  : an initial guess
02:  for  $m = 1, 2, \dots$ , until  $\beta_{m-1} \simeq 0$ 
03:     $v = A * u_m$ 
04:     $\alpha_m = u_m^T * v$ 
05:    if ( $m \neq 1$ )
06:       $v = v - \beta_{m-1} * u_{m-1}$ 
07:       $H[m-1, m] = H[m, m-1] = \beta_{m-1}$ 
08:    end if
09:     $H[m, m] = \alpha_m$ 
11:     $v = v - \alpha_m * u_m$ 
12:    if ( $m \neq 1$ )
13:       $v = v - (u_{m-1}^T * v) * u_{m-1}$ 
14:       $v = v - (u_m^T * v) * u_m$ 
15:    if (semiothogonality is violated)
16:      Reorthogonalize  $u_m$  and  $v$ . Update  $H$ .
17:       $\beta_m = \|v\|_2$ 
18:       $u_{m+1} = v/\beta_m$ 
19:    end for
20:  compute eigenvalue and eigenvector

```

図 2 準直交ランチョス法のアルゴリズム

ができるようになる。 Bai et al.⁵⁾ においては、ランチョス法及び準直交ランチョス法で使われていた残差ノルムの推定は、次式で行われている。

$$\|AU_m w_T - \theta_T U_m w_T\|_2 = |\beta_m e_m^T w_T|, \quad (13)$$

$$\|A\tilde{U}_m w_H - \theta_H \tilde{U}_m w_H\|_2 = |\tilde{\beta}_m e_m^T w_H| \quad (14)$$

しかし、ランチョス法及び準直交ランチョス法における残差ノルムの推定値は、反復が進んでいくに従って値が小さくなりすぎる現象が起こる。これを改善するために、新しい残差ノルムの推定方法について述べる。

4.1 新しい残差ノルムの推定方法

まず、ランチョス法に対して、新しい残差ノルムの推定方法について述べる。残差は、式 (3) を用いると下記の式のように書くことができる。

$$\begin{aligned} AU_m w_T - \theta_T U_m w_T &= U_m(T_m w_T - \theta_T w_T) \\ &\quad + \beta_m u_{m+1} e_m^T w_T \\ &= U_m r + \beta_m u_{m+1} e_m^T w_T \end{aligned}$$

ただし、 $r_T = T_m w_T - \theta_T w_T$ である。ここで、 $U_m r$ と $\beta_m u_{m+1} e_m^T w_T$ は、直交性により次のように書くことができる。

$$\|AU_m w_T - \theta_T U_m w_T\|_2^2 \simeq \|r_T\|_2^2 + |\beta_m e_m^T w_T|^2 \quad (15)$$

準直交ランチョス法においても、上記と同じことを行う。

$$\begin{aligned} A\tilde{U}_m w_H - \theta_H \tilde{U}_m w_H &= \tilde{U}_m(H_m w_H - \theta_H w_H) \\ &\quad + \tilde{\beta}_m \tilde{u}_{m+1} e_m^T w_H \\ &= \tilde{U}_m r_H + \tilde{\beta}_m \tilde{u}_{m+1} e_m^T w_H \end{aligned}$$

```

01: if (semiorthogonality is violated)
02:    $\rho = \|v\|_2$ 
      Reorthogonalize  $u_m$  and  $v$ 
03:   for  $j = 1$  to  $m - 1$ 
04:      $w[j] = u_j^T * u_m$ 
05:      $u_m = u_m - w[j] * u_j$ 
06:      $x[j] = u_j^T * v$ 
07:      $v = v - x[j] * u_m$ 
08:   end for  $j$ 
09:    $\eta = u_m^T * v$ 
10:    $v = v - \eta * u_m$ 
      If necessary orthogonalize  $v$  again
11:   if ( $\|x\|_2 \geq \sqrt{n\varepsilon_M}$ )
12:     for  $j = 1$  to  $m - 1$ 
13:        $t = u_j^T * v$ 
14:        $v = v - t * u_j$ 
15:        $x[j] = x[j] + t$ 
16:     end for  $j$ 
17:      $t = u_m^T * v$ 
18:      $v = v - t * u_m$ 
19:      $\eta = \eta + t$ 
20:   end if
      adjust H
21:    $H[1:m - 1, m - 1] = H[1:m - 1, m - 1]$ 
       $+ H[m - 1, m] * w$ 
22:    $H[1:m - 1, m] = H[1:m - 1, m]$ 
       $- H[1:m - 1, 1:m - 1] * w$ 
       $- (\beta_{m-1} * w[m - 1])$ 
       $- H[m, m] * w + x$ 
23:    $H[m, m] = H[m, m] + \eta$ 
       $- \beta_{m-1} * w[m - 1]$ 
24: end if

```

図3 再直化のアルゴリズム

ただし, $r_H = H_m w_H - \theta_H w_H$ である. また $\tilde{U}_m r$ と $\tilde{\beta}_m \tilde{u}_{m+1} e_m^T w_H$ の直交性により, 残差ノルムを下記のように書くことができる.

$$\|A\tilde{U}_m w_H - \theta_H \tilde{U}_m w_H\|_2^2 \cong \|r_H\|_2^2 + |\tilde{\beta}_m e_m^T w_H|^2 \quad (16)$$

5. 数値実験

テスト行列を利用してランチョス法と準直交ランチョス法の比較と残差ノルムを比較した数値実験について述べる. 実験は次の環境で行った. また, n を行列の次数とする.

計算機: HP Proliant LP 140

OS: Red Hat Linux 9.0

CPU: Intel Xeon 3.2GHz

メモリ: 4.0GB

計算精度: 倍精度

プログラム言語: C 言語

マシンイプシロン: 2.220446×10^{-16}

最大反復回数: 6000 回

初期ランチョスベクトル: $u_1 = (1, 0, \dots, 0)$

収束判定条件: $\beta_m \leq 1.0 \times 10^{-10}$

再直化条件: $\sqrt{\varepsilon_M/n}$

5.1 実験内容

5.1.1 ランチョスベクトルの直交性

ランチョス法及び準直交ランチョス法のランチョスベクトルの直交性を比較するため下記のようなパラメータを定義し, 比較を行うことにする.

$$\kappa_m = |u_1^T u_m| \quad (m \geq 2)$$

5.1.2 固有値の比較

真の固有値 λ と θ_T と θ_H の値を求め, 重複固有値を含む場合と含まない場合の比較を行った. 固有値の精度を比較するため, $|\lambda - \theta_T|$ 及び $|\lambda - \theta_H|$ を計算する. また θ_T と θ_H は, 小さい順に並べる.

5.1.3 残差ノルムの比較

ランチョス法において, 真の残差ノルム及び式 (13) 及び式 (15) の比較を行い, 準直交ランチョス法においては, 真の残差ノルム及び式 (14) 及び式 (16) の比較を行うものとする. 次に, ランチョス法と準直交ランチョス法における固有組の精度を比較するため, 式 (15) と式 (16) を用いて残差ノルムを比較した.

5.2 数値例

数値例として, 以下の物理問題で現れる重要な偏微分方程式の 1 つであるディリクレ境界条件下でのポアソン方程式の固有値問題を考える. ここで, k は定数とする.

$$-\nabla^2 u = k^2 f(x, y) \quad \text{in } \Omega \quad (17)$$

$$u = 0 \quad \text{on } \partial\Omega \quad (18)$$

この領域を $\Omega = [0, 1] \times [0, 1]$ とする. これを, メッシュ幅 $h = 1/51$ で 5 点公式で離散化すると, 固有値問題 $Ax = \lambda x$ が得られ, A は下記ようになる. ただし, $n = 50$ であるため, 行列の大きさは 2500×2500 の大きさになり, 再直化条件の値は $\sqrt{\varepsilon_M/2500} \approx 2.9 \times 10^{-10}$ となる.

$$A = \begin{pmatrix} -4I_n & X & & & 0 \\ X & -4I_n & X & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & \ddots & X & -4I_n & X \\ 0 & & & & X & -4I_n & \\ & & & & & & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$I_n = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & \ddots & & \\ & & \ddots & \\ & & & 1 \end{pmatrix} \quad X = \begin{pmatrix} 0 & 1 & & \\ 1 & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & 1 \\ & & & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

この時、行列 A の固有値 λ は下記の式で表される。

$$\lambda_{kj} = -4(1 + \cos k\theta \cos j\theta)$$

$$\theta = \frac{\pi}{n+1}, \quad k, j = 1, 2, \dots, n$$

数値例の結果を表 1 に示す。Ltime は、ランチョス法ならばランチョス法の反復時間、準直交ランチョス法ならば準直交ランチョス法の反復時間、eigentime は、 T_m 及び H_m の固有組を求めるのにかった時間を表している。図 4 より、ランチョス法で β_m は収束をしなかったため、2500 回の反復を行った場合の時間を示した。さらに、 T_{2500} の固有組を求め、準直交ランチョス法との残差ノルムを比較した。準直交ランチョス法の反復が 1250 回で収束したので、ランチョス法及び準直交ランチョス法で固有値比較を行う場合、重複度を除いて真の固有値を比較した。ランチョス法に関しては、重複度を除かない場合も行った。図 5 と

表 1 ランチョス法と準直交ランチョス法の数値例の結果

method	I	S	Ltime	eigentime	Total
Lanczos	—	—	0.78	138.87	139.65
semiLan	1250	81	23.97	62.19	87.16

I:反復回数, S:再直交化回数, Total:全計算時間 (sec)

図 6 より、ランチョス法においてランチョスペクトルの直交性は、反復が進んでいくに従って悪化していくことが分かる。しかし、準直交ランチョス法においては、ランチョスペクトルの直交性は、条件で定めた値以下になっており、準直交性が保たれていることが分かる。図 4 より、ランチョス法においては β_m を最大反復回数内に収束させることができなかったが、準直交ランチョス法を利用すると収束させることができた。次に、図 7 より重複度を除いた場合の固有値の精度を比較すると、 $|\lambda - \theta_H| \approx 0$ になっているのに対して、最小固有値以外に関しては $|\lambda - \theta_T| \neq 0$ になっている。これは、準直交ランチョス法では、固有値が精度よく求まっており、ランチョス法では、偽の固有値が出てきていることを示している。また、重複度を除いた真の固有値の数は 650 個なのに対してランチョス法では 842 個でてきているので、多くの偽固有値が出たことになる。次に、重複度有の固有値精度比較を行うと準直交ランチョス法は反復が 1250 回で終わっているため、重複度は求まっていないし精度もよくない。ランチョス法は、図 8 より、最大固有値と最小固有値及び真ん中の固有値に関しては、 $|\lambda - \theta_T| \approx 0$ になっているが、それ以外は $|\lambda - \theta_T| \neq 0$ になっている。これは、精度よく求まっていないことになる。次に残差ノルムの推定法の比較を行う。図 9 より、式 (13) と式 (15) の比較を行うと、式 (15) が残差ノルムを推定できていると言える。式 (13) で推定を行うと、実際の値より小さくなってしまい推定できていない。準直交ランチョス法においても同じことがいえる。次に、ランチョス法と準直交ランチョス法における残差ノル

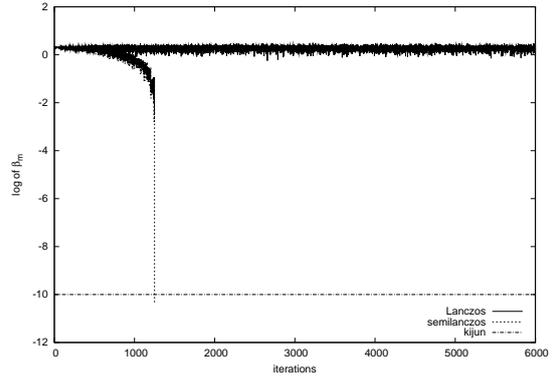


図 4 β_m の変化

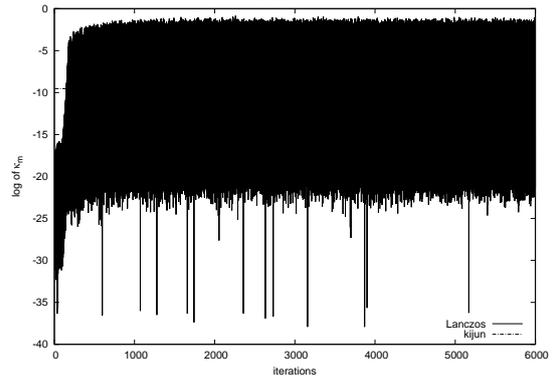


図 5 ランチョス法における κ_m の変化

ムの比較を行う。図 11 より分かるが、ランチョス法における残差ノルムは、収束しているものと収束していないものにわかれている。しかし準直交ランチョス法は、全ての固有組を収束させることができた。ここで、表 1 の Ltime の時間より、ランチョス法は 2500 回の反復で 0.78 秒なのに対して準直交ランチョス法は 1250 回の反復で 23.97 秒もかかった。これは、再直交化条件を決めるための計算と再直交化を行うための計算を行ったためである。

6. まとめ

本稿では、ランチョス法と準直交ランチョス法における残差ノルムの新しい推定法の有効性について述べた。さらに準直交ランチョス法は、ランチョス法と比べるとより多くの重複度を除いた固有組を求められることを示すことができた。しかし、ランチョス法と準直交ランチョス法は重複度を含んだ固有組を精度よく求めることができなかった。重複度を求めることを今後の課題のしたい。また、反復回数の半分でも準直交ランチョス法の方が、演算時間を多く必要とした。これを改善するためには、再直交化条件に用いる $|u_i^T u_m|$ の計算を漸化式を利用し計算すればよい。これも今後の課題にしたい。また、行列ベクトル積 Au_m 及び内

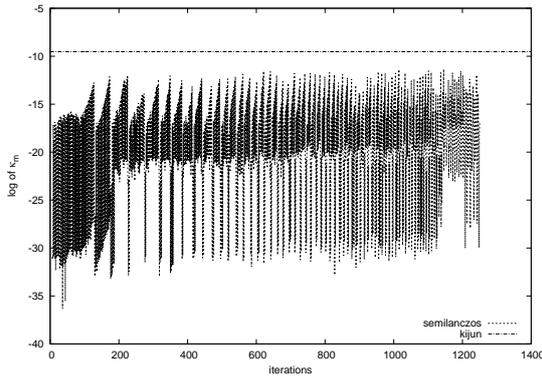


図 6 準直交ランチョス法における K_m の変化

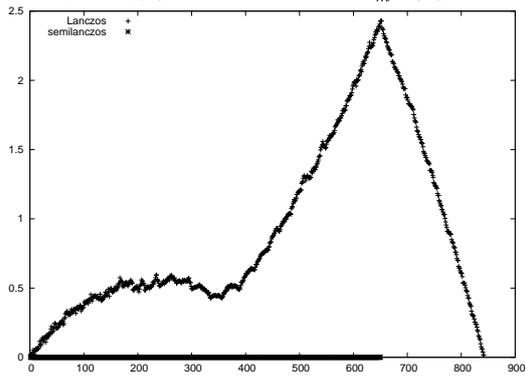


図 7 重複度なし $|\lambda - \theta_T|$ vs $|\lambda - \theta_H|$

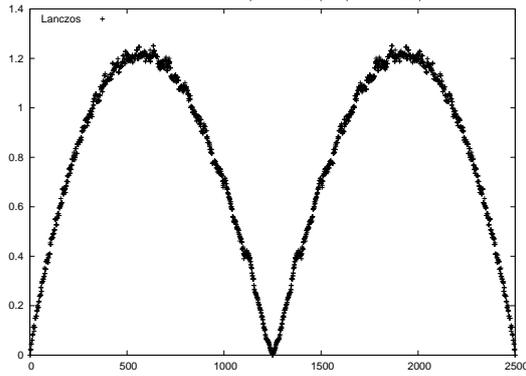


図 8 重複度あり $|\lambda - \theta_T|$

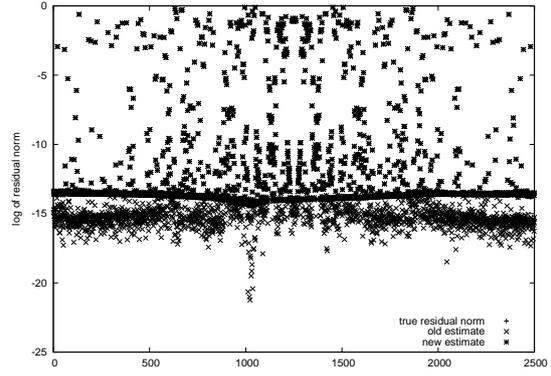


図 9 $|\beta_m e_m w_T|$ vs $\sqrt{\|r_T\|_2^2 + |\beta_m e_m w_T|^2}$

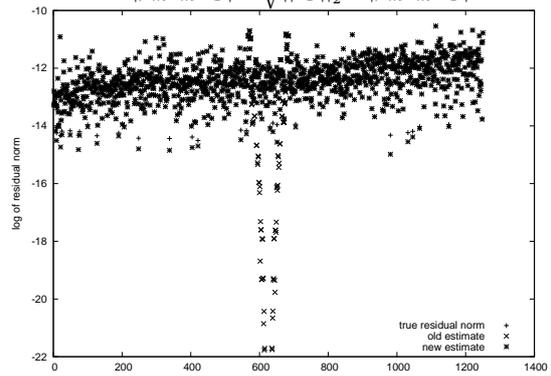


図 10 $|\bar{\beta}_m e_m w_H|$ vs $\sqrt{\|r_H\|_2^2 + |\bar{\beta}_m e_m w_H|^2}$

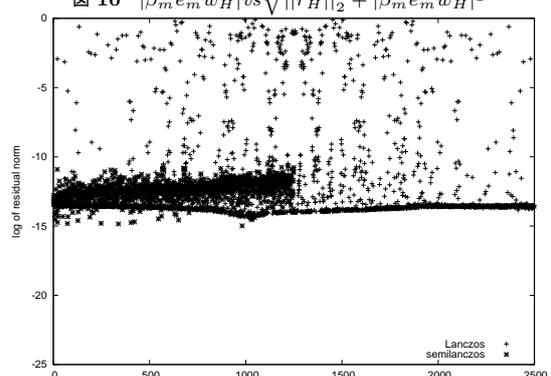


図 11 残差ノルム比較

積計算を並列化することにより、さらに時間を短縮することも可能である。

参考文献

- 1) G. W. Stewart, *Adjusting the Rayleigh Quotient in Semiorthogonal Lanczos Method*, SIAM J. Sci. Comp. Vol. 24, pp. 201–207, (2002).
- 2) E. Anderson et al., *Lapack Users Guide*, SIAM, Philadelphia (1992), (小国 (訳) 行列演算パッケージ LAPACK 利用の手引き, 丸善, (1996)).
- 3) H. D. Simon, *Analysis of Symmetric Lanczos*

Algorithm with Reorthogonalization, Linear Algebra Appl., Vol. 61, pp. 101–132, (1984).

- 4) 名取 亮, 数値解析とその応用, コロナ社, (1990).
- 5) Z. Bai, et al., *Templates for the Solution of Algebraic Eigenvalue Problems: A practical Guide*, SIAM, (2000).