

大規模一般化固有値問題の解法とその並列化

A method for large scale generalized eigenvalue problems
and its parallelization

筑波大学電子・情報工学系 櫻井 鉄也 (Tetsuya Sakurai)

Institute of Information Sciences and Electronics,

University of Tsukuba

名古屋大学大学院工学研究科 杉浦 洋 (Hiroshi Sugiura)

Graduate School of Engineering,

Nagoya University

1 はじめに

本論文では一般化固有値問題 $Ax = \lambda Bx$ において、行列 A, B が大規模で疎な場合に複素平面上で領域を指定し、その領域内にある固有値のみを求める方法を示す。この方法は指定した範囲内の固有値のみを求めることができるため減次を必要としない。計算の主要部は複数の連立一次方程式を解くことにあり、これらの方程式は互いに依存しないため独立に解くことができる。

次節では与えられた Jordan 閉曲線内部にある固有値のみを求める方法について述べる。第3節では領域が円板の場合の計算法について示す。第4節では第3節で示した方法の並列化について述べる。第5節では OpenMP を用いて計算した数値例を示す。

2 指定された領域内の固有値を求める方法

行列 $A, B \in \mathbb{C}^{n \times n}$ とし、 $\lambda_1, \dots, \lambda_d$ は行列束 $A - \lambda B$ の有界な固有値とする。零でないベクトル $u, v \in \mathbb{C}^n$ と、 $zB - A$ が正則となる複素数 z に対して、関数 $f(z)$ を

$$f(z) := u^H (zB - A)^{-1} v$$

と定義する。 $zB - A$ が正則のとき、関数 $f(z)$ は正則である。

このように定義した $f(z)$ を用いた固有値解法に関係して以下の定理がある [2]。

定理 1 $zB - A$ に対して、

$$P(zB - A)Q = \begin{pmatrix} zI_d - J_d & O \\ O & zJ_{n-d} - I_{n-d} \end{pmatrix} \quad (1)$$

を満たす正則な行列 $P, Q \in \mathbb{C}^{n \times n}$ が存在する。ここで、 J_d と J_{n-d} はそれぞれ d 次、 $n-d$ 次の Jordan 行列で、 I_d, I_{n-d} はそれぞれ d 次、 $n-d$ 次の単位行列とする。

ここで $J_d = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_d)$ であるとする. $p_1, \dots, p_n \in \mathbb{C}^n$ は $P^T = (p_1, \dots, p_n)$ となるベクトルとし, $q_1, \dots, q_n \in \mathbb{C}^n$ は $Q = (q_1, \dots, q_n)$ であるようなベクトルとする. $\nu_j := u^H q_j p_j^H v$, $1 \leq j \leq d$ とする.

文献 [7] では, 以下の定理が示されている.

定理 2 K は J_{n-d} の Jordan ブロックの最大の大きさとする. $zB - A$ が正則で A が対角化可能なとき,

$$f(z) = \sum_{j=1}^d \frac{\nu_j}{z - \lambda_j} + g(z) \quad (2)$$

となる. ここで $g(z)$ は $K - 1$ 次の多項式である.

これより, $f(z)$ は固有値を極に持つ有理関数となっていることがわかる. 以下では, 与えられた領域内の関数の極を求める方法をこの $f(z)$ に適用することを考える.

Γ は複素平面上の Jordan 閉曲線とし, γ を Γ 内の点とする.

$$\mu_k := \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} (z - \gamma)^k f(z) dz, \quad k = 0, 1, \dots \quad (3)$$

とし, $m \times m$ の Hankel 行列 H_m と $H_m^<$ を

$$H_m := [\mu_{i+j-2}]_{i,j=1}^m = \begin{pmatrix} \mu_0 & \mu_1 & \cdots & \mu_{m-1} \\ \mu_1 & \mu_2 & \cdots & \mu_m \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \mu_{m-1} & \mu_m & \cdots & \mu_{2m-2} \end{pmatrix},$$

および

$$H_m^< := [\mu_{i+j-1}]_{i,j=1}^m = \begin{pmatrix} \mu_1 & \mu_2 & \cdots & \mu_m \\ \mu_2 & \mu_3 & \cdots & \mu_{m+1} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \mu_m & \mu_{m+1} & \cdots & \mu_{2m-1} \end{pmatrix}$$

とする.

Γ 内の相異なる固有値を $\lambda_1, \dots, \lambda_m$ としたとき, つぎの関係が成り立つ [7].

定理 3 $\det H_m \neq 0$ のとき, 行列束 $H_m^< - \lambda H_m$ の固有値は $\lambda_1 - \gamma, \dots, \lambda_m - \gamma$ である.

これより, 一般化固有値問題 $Ax = \lambda Bx$ の指定した領域 Γ 内にある固有値 $\lambda_1, \dots, \lambda_m$ を求める問題は, 一般化固有値問題 $H_m^< x' = \lambda H_m x'$ に帰着することがわかる. Γ を適当に選んで m がそれほど大きくない場合には, この問題はもとの問題と比べて小規模になる.

ここで固有ベクトルを求める方法について述べる.

$$s_k := \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} (z - \gamma)^k (zB - A)^{-1} v dz, \quad k = 0, 1, \dots \quad (4)$$

とする. このとき以下の定理がある [7].

定理 4 $\sigma_1, \dots, \sigma_m$ を

$$\sigma_j := \mathbf{p}_j^H \mathbf{v}, \quad j = 1, 2, \dots, m$$

とする。このとき

$$[\mathbf{s}_0, \dots, \mathbf{s}_{m-1}] = [\sigma_1 \mathbf{q}_1, \dots, \sigma_m \mathbf{q}_m] \mathbf{V}_m^T \quad (5)$$

である。

固有値 $\lambda_1, \dots, \lambda_m$ が与えられたとき、式 (5) の関係を用いて固有ベクトル $\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_m$ を求めることができる。ここで

$$\mu_k = \mathbf{u}^H \mathbf{s}_k, \quad k = 0, 1, \dots$$

であることから、 $\mathbf{s}_k$ は μ_k を求める過程で得られる。

3 単位円内部の固有値を求める方法

Γ が中心 γ 、半径 ρ の円の場合を考える。 Γ 上の等間隔点を

$$\omega_j := \gamma + \rho e^{\frac{2\pi i}{N} j}, \quad j = 0, 1, \dots, N-1.$$

とする。積分 (3) を台形則で近似し、

$$\mu_k \approx \hat{\mu}_k := \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} (\omega_j - \gamma)^{k+1} f(\omega_j), \quad k = 0, 1, \dots, \quad (6)$$

とする。また、

$$\mathbf{y}_j := (\omega_j B - A)^{-1} \mathbf{v}, \quad j = 0, 1, \dots, N-1 \quad (7)$$

とおき、

$$\mathbf{s}_k \approx \hat{\mathbf{s}}_k := \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} (\omega_j - \gamma)^{k+1} \mathbf{y}_j, \quad k = 0, 1, \dots \quad (8)$$

とする。

$\hat{\mu}_k$ より構成される Hankel 行列を $\hat{H}_m := [\hat{\mu}_{i+j-2}]_{i,j=1}^m$ 、 $\hat{H}_m^< := [\hat{\mu}_{i+j-1}]_{i,j=1}^m$ とする。行列束 $\hat{H}_m^< - \lambda \hat{H}_m$ の固有値を用いて、 $\lambda_1, \dots, \lambda_m$ の近似値を求める。

アルゴリズムを示す。

Algorithm:

Input: $\mathbf{u}, \mathbf{v} \in \mathbb{C}^n$, N , m , γ , ρ

Output: $\hat{\lambda}_1, \dots, \hat{\lambda}_m$

1. Set $\omega_j \leftarrow \gamma + \rho \exp(2\pi i j / N)$, $j = 0, \dots, N-1$
2. Form $\mathbf{y}_j = (\omega_j B - A)^{-1} \mathbf{v}$, $j = 0, \dots, N-1$
3. Set $f_j \leftarrow \mathbf{u}^H \mathbf{y}_j$, $j = 0, \dots, N-1$
4. Compute $\hat{\mu}_k$, $k = 0, \dots, 2m-1$
5. Compute the eigenvalues $\zeta_1, \dots, \zeta_m$ of the pencil $\hat{H}_m^< - \lambda \hat{H}_m$.
6. Set $\hat{\lambda}_j \leftarrow \gamma + \zeta_j$, $j = 1, \dots, m$.

行列束 $\hat{H}_m^{\leq} - \lambda \hat{H}_m$ の誤差の解析については文献 [5], [6] に示されている。これを用いてつぎの結果を得る。 η を

$$\eta := \min_{j>m} \frac{|\lambda_j - \gamma|}{\rho}$$

とする。このとき $N \geq 2m + K$ であれば

$$|\hat{\lambda}_j - \lambda_j| = O(\eta^{2m-N}), \quad 1 \leq j \leq m \quad (9)$$

となる。

$g(z)$ は $K-1$ 次の多項式であり、その係数は $\hat{\mu}_{N-K-1}, \dots, \hat{\mu}_{N-1}$ に影響を与える。そのため $2m + K$ となる。 η は Γ の外部にある固有値のみに依存して決まり、内部の固有値とは独立であることに注意する。

領域内にある固有値のいくつかが近接してクラスタを構成しているときの解析には、解析関数のクラスタに関する文献 [4] が利用できる。

4 並列化

$f(z)$ の $z = \omega_j$ における値の計算は

$$f(\omega_j) = \mathbf{u}^H (\omega_j B - A)^{-1} \mathbf{v}$$

となる。ここで

$$G_j := \omega_j B - A$$

とおく。前節で示したアルゴリズムにおいて、ステップ2、およびステップ3が $f(\omega_j)$ の計算に対応し、 N 個の連立一次方程式

$$G_j \mathbf{y}_j = \mathbf{v}, \quad j = 0, 1, \dots, N-1$$

を解き、 $\mathbf{u}^H \mathbf{y}_j$ により $f(\omega_0), \dots, f(\omega_{N-1})$ を求めている。行列 A, B が大規模のときには、この連立一次方程式を解く時間が全体の計算のほとんどを占めており、図1のようにこれらの方程式を並列に解くことで高速化をはかることができる。

5 数値例

ここで本方法の数値例を示す。以下の実験において計算は倍精度で行い、ベクトル $\mathbf{u}$ と $\mathbf{v}$ の要素は乱数で与えた。

数値例1では、簡単な行列によって本方法の特徴を示す。プログラムは MATLAB を用

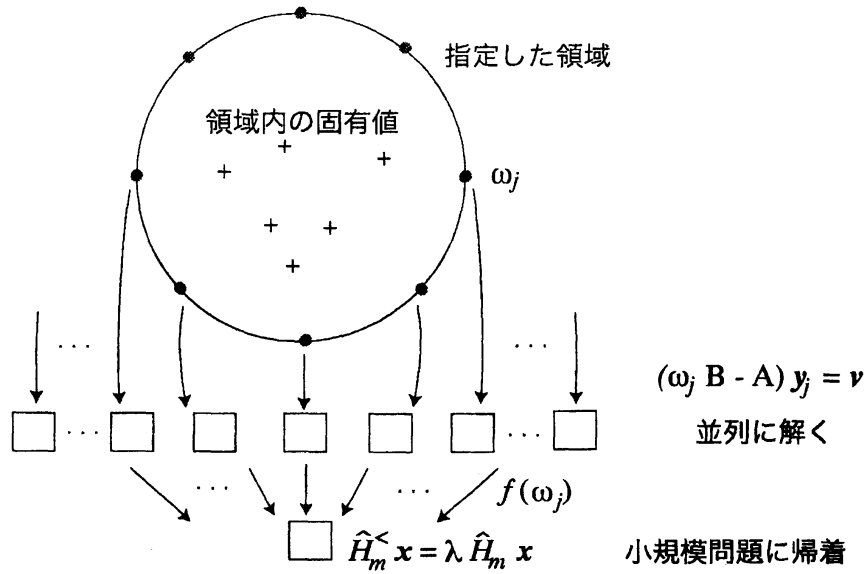


図 1: 並列化

例 1 行列は

$$A = \begin{pmatrix} \frac{99}{100} & \frac{1}{100} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \frac{98}{100} & \ddots & & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & \frac{1}{100} & \frac{1}{100} \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & \frac{0}{100} \end{pmatrix}, \quad (10)$$

および

$$B = \begin{pmatrix} 0 & & & \\ & \ddots & & \\ & & 0 & \\ & & & I_{20} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{100 \times 100}, \quad (11)$$

とした。ここで I_{20} は 20 次の単位行列である。この例の固有値は $\lambda_j = (j-1)/100$, $j = 1, \dots, 20$ である。

中心 $\gamma = 0.015$, 半径 $\rho = 0.02$ の円内にある固有値は $\lambda = 0.0, 0.01, 0.02, 0.03$ の 4 個である。パラメータを $m = 4$, $N = 64$ としたときの計算結果を示す。

$$\begin{aligned} \hat{\lambda}_1 &= 0.00000015646111, & \hat{\lambda}_2 &= 0.00999953916913, \\ \hat{\lambda}_3 &= 0.01999794844274, & \hat{\lambda}_4 &= 0.03000075760470. \end{aligned}$$

求めた固有値 $\{\hat{\lambda}_j\}$ の最大誤差は 2.1×10^{-6} であった。

$N = 128$ としたときは

$$\begin{aligned} \hat{\lambda}_1 &= 0.000000000000100, & \hat{\lambda}_2 &= 0.099999999999706, \\ \hat{\lambda}_3 &= 0.019999999998694, & \hat{\lambda}_4 &= 0.030000000000479 \end{aligned}$$

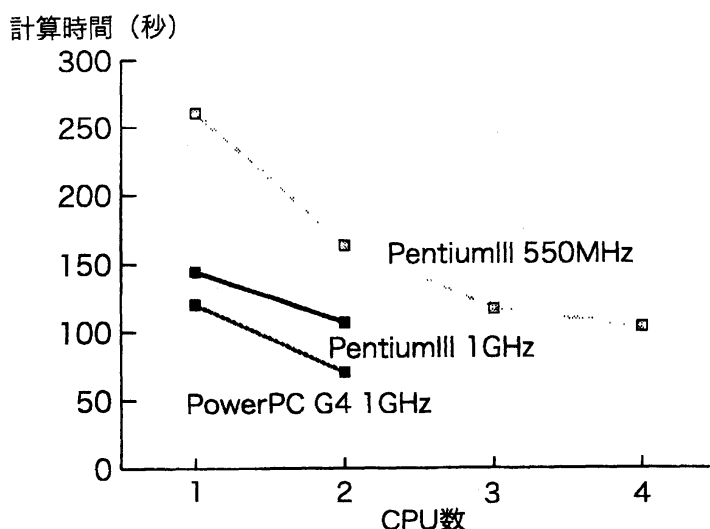


図 2: CPU 数と計算時間

となった. このときの求めた固有値の最大誤差は 1.3×10^{-12} であった.

この問題では, $\eta = 1.25$ となり, 誤差評価の式 (9) において現れる値は, $N = 64$ のとき $\eta^{2m-N} = \eta^{-56} \approx 3.7 \times 10^{-6}$ で, $\eta^{2m-N} = \eta^{-120} \approx 2.3 \times 10^{-12}$ となる. これらの値は, 数値実験によって求めた固有値の誤差のよい評価になっていることがわかる.

つぎに OpenMP を用いた並列計算の例を示す. コンパイラは FORTRAN omf77 を使用した. 連立一次方程式は Bi-CGSTAB 法 [9] を用い, 反復の収束判定は相対残差 10^{-12} とした.

例 2 有限要素法を用いた水分子の電子状態計算で現れる固有値問題 [3]. 行列 A, B はともに実対称. 行列のサイズは $n = 12173$ で, 非零要素数 915803 である. 中心 $\gamma = -6.0$, 半径 $\rho = 0.5$ の領域内にある 4 個の固有値を求めた. $N = 32$ とした.

図 2 に, CPU と OS がそれぞれ, PentiumIII 550MHz $\times 4$ (Linux), PentiumIII 1GHz $\times 2$ (Linux), PowerPC G4 1GHz $\times 2$ (MacOS X) の 3 台の計算機についての計算時間を示す. 図 3 では, 1CPU のときの計算時間を 1 として, CPU 数を変えたときの計算時間の逆数の比を示す.

図 4 に, Origin2000 を用いた 8CPU での実験結果を示す.

これらの実験結果から, CPU 数が 4 から 8 程度の範囲では, 並列効果は CPU 数にほぼ比例していることがわかる. 分散メモリー環境で計算する場合は, はじめに各ノードに行列 A, B のデータを送った後, 連立一次方程式の解を求める過程ではノード間でのデータ交換を必要としない. そのため, このような計算環境での並列の効果が高いものと考えらる.

行列 A, B はともに対称なときには, $f(\omega_j)$ の計算で現れる連立一次方程式の係数行列は複素対称行列となる. このような場合には, 複素対称行列向きの反復解法 [8] を用いると 1 回反復あたりの計算量が減少し, 計算時間が短縮される場合がある.

並列効果

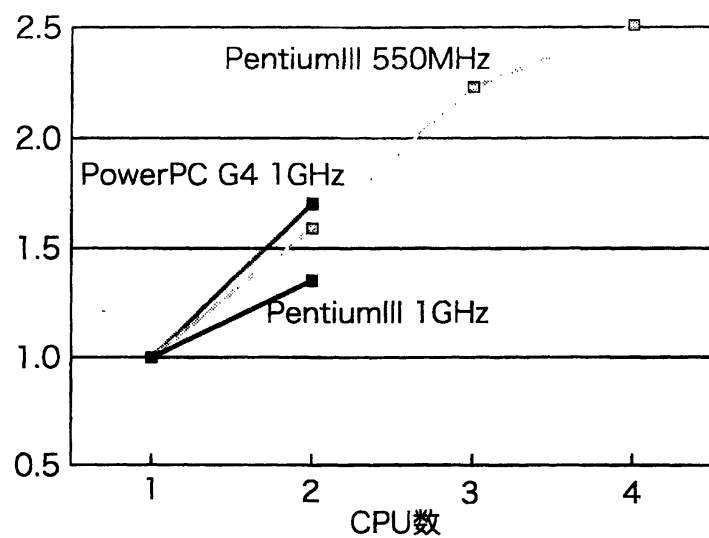


図 3: 並列効果

並列効果

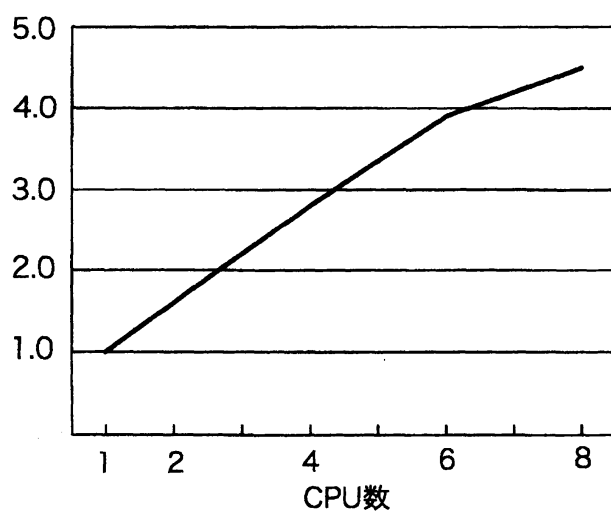


図 4: 並列効果 (Origin2000)

参考文献

- [1] J. Cullum, W. Kerner and R. Willoughby, A generalized nonsymmetric Lanczos procedure, *Computer Phys. Communications* 59 (1989) 19–48.
- [2] F. R. Gantmacher, *The theory of Matrices*, Chelsea, New York, 1959.
- [3] S. Hyodo, Meso-scale fusion: A method for molecular electronic state calculation in inhomogeneous materials, *Proc. the 21st Century*, Mikkabi, 2001, in T. Mitsui (Ed.), Special issue of *J. Comput. Appl. Math.* 149 (2002) 101–118.
- [4] P. Kravanja, T. Sakurai and M. Van Barel, On locating clusters of zeros of analytic functions, *BIT* 39 (1999) 646–682.
- [5] P. Kravanja, T. Sakurai, H. Sugiura and M. Van Barel, An error analysis of two related quadrature methods for computing zeros of analytic functions, Part II, Tech. Report Leuven TW-338, University of Leuven (2002).
- [6] T. Sakurai, P. Kravanja, H. Sugiura and M. Van Barel, An error analysis of two related quadrature methods for computing zeros of analytic functions, *J. Comput. Appl. Math.* 152 (2003) 467–480.
- [7] T. Sakurai and H. Sugiura, A projection method for generalized eigenvalue problems, *J. Comput. Appl. Math.* (accepted).
- [8] H. A. van der Vorst, J. B. M. Melissen, A Petrov-Galerkin type method for solving $Ax = b$, where A is a symmetric complex matrix, *IEEE Trans. on Magnetics* 26 (2) (1990) 706–708.
- [9] H. A. van der Vorst, Bi-CGSTAB: A fast and smoothly converging variant of Bi-CG for the solution of nonsymmetric linear systems, *SIAM J. Sci. Statist. Comput.* 13 (1992) 631–644.