

高速固有値ルーチンの開発

聖徳学園女子短大 別府良孝
中部大学 二宮市三
東海産業短大 上田 誠

1. はじめに

密な実対称行列 A に関する標準固有値問題 $A v_i = e_i v_i$ ($i=1, 2, \dots, m, \dots, n$) を解くのに適した高速固有値ルーチンを開発するためには、基本算法の改良と最適コードの組み合わせが必要である。

密な実対称行列 A は、鏡像変換行列 H を用いて $T = H^t A H$ のごとく三重対角行列 T に変換できる。 T に関する固有値問題 $T q_i = e_i q_i$ をいかに解き、いかに $V = H \cdot Q$ の逆変換を行なうかが問題である。

2. QR法の収束をいかに加速するか

$|e_1| > \dots > |e_{n-1}| > |e_n|$ のとき、三重対角行列 T にQR法を適用すると、行列の右下から対角化されて、 $T_{n,n}$ は絶対値最小の固有値 e_n に収束する。

ところで、副対角項 $T_{n,n-1}$ は e_n / e_{n-1} に比例するので、局所的原点移動量 z として e_n の近似値を用いれば収束が加速できる。 z を見積もる式として新旧十種を定式化して、それらの優劣をテストしたところ、三次または四次のシフト式が有効である事が判明した。

3. 固有値のみをいかに求めるか

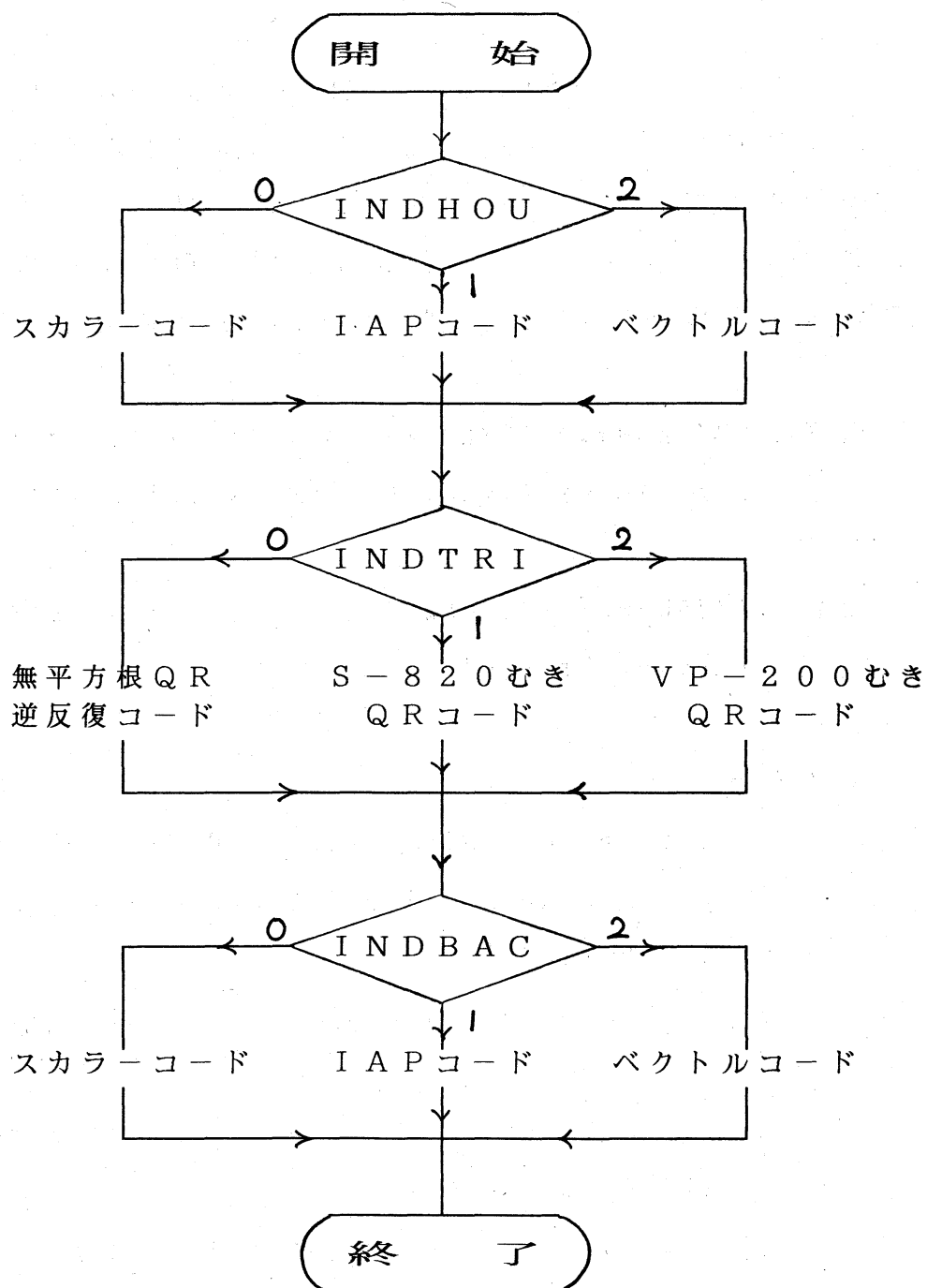
三重対角行列 T のすべての固有値のみを求めるのに要する CPU 時間を、平方根付 QR 法・無平方根 QR 法・合理的 QR 法・二分割法・多分割法を用いて計測した結果、スカラ一機では無平方根 QR 法が、ベクトル機では無平方根 QR 法または多分割法が優れていることが判明した。

4. 完全対角化に要する CPU 時間の分析

全ての固有値と固有ベクトルを求めるのに要する時間を、三重対角化に要する時間・鏡像変換行列 H の積算に要する時間・三重対角行列 T に関する固有値問題を解くのに要する時間・ $V = H \cdot Q$ の逆変換に要する時間に分けて計測した結果、固有ベクトルの積算もしくは逆変換の段階が律速である事が判明した。

5. 万能コードの開発

以上の知見を基にして、一つのソースコードで種々のハードに適する高速固有値ルーチン $NSHOUT$ (第3版)を開発した。 $NSHOUT$ (第3版)は、三つのパラメーター $INDHOU \cdot INDTRI \cdot INDBAC$ の値をハードに応じて指定することにより、最適の算法とコードを用いて行列 A を対角化できるように設計されている。以下は、その構成図である。



6. おわりに

NSHOUD (第1版) や同 (第2版) は、国際的に著名な分子科学プログラムのMOPACやMNDOCの中などで多用されてきた。今回開発した、NSHOUD (第3版) のFORTRANコード、および、同 (第2版) のC版やBASIC版が旧版以上に愛用されることを念じている。

備考 : NUMPACの前身のN.SSLの中の固有値ルーチンのコーディングは二宮が、NSHOUDのコーディングは主に別府が、BASIC版とC版のコーディングは上田が担当した。

謝辞 : 無平方根QR法に関して御教示いただいた島崎真昭教授 (九大)、電算機を利用させていただいた名大・東大・分子研の計算センターに深謝する。

参考文献 :

- 1) Y. Beppu & I. Ninomiya, "NICER---- Fast Eigenvalue Routines", Comput. Phys. Commun. Vol. 23 (1981) 123
- 2) 別府良孝, "スーパーコンピュータに適した固有値ルーチン", bit臨時増刊 (名取 亮・野寺 隆 編) 共立出版 (1987)
- 3) 別府良孝, "高速固有値ルーチン", 「スーパーコンピュータの利用」研究計画化調査報告書 (理化学研究所編, 1988年12月)
- 4) 別府良孝, "スーパーコンピュータに適した固有値ルーチン", 「スーパーコンピュータ・ワークショップ・レポート」No. 7 (分子科学研究所編, 1989年11月)