

2つの Krylov 部分空間による 複素モーメント型固有値解法の改良

今倉 暁*, 櫻井 鉄也*†

*筑波大学, †JST/CREST

Improvement of complex moment-based eigensolver
using two Krylov subspaces

Akira Imakura*, Tetsuya Sakurai*†

*University of Tsukuba, †JST/CREST

E-mail: imakura@cs.tsukuba.ac.jp

1 はじめに

本論文では, 複素平面上の指定された領域 Ω 内部の固有値および対応する固有ベクトルを求める一般化固有値問題

$$Ax_i = \lambda_i Bx_i, \quad A, B \in \mathbb{C}^{n \times n}, \quad x_i \in \mathbb{C}^n \setminus \{0\}, \quad \lambda_i \in \Omega \subset \mathbb{C} \quad (1)$$

について考える. ここで, 領域 Ω の境界 Γ 上の点 z において $zB - A$ は正則であるとする. また, 簡単のため行列束 (A, B) は対角化可能であるとする.

一般化固有値問題 (1) に対する有力な解法として, 2003 年に櫻井・杉浦によって複素モーメント型固有値解法が提案された [12]. その基本となるアイディアは, 一般化固有値問題の固有値を極に持つ有理関数

$$r(z) := \tilde{v}^H (zB - A)^{-1} Bv, \quad v, \tilde{v} \in \mathbb{C}^n$$

を導入し, 領域 Ω 内部の極を Cauchy の積分公式に基づく Kravanja らのアルゴリズム [10] を用いて, 複素モーメント

$$\mu_k := \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma} z^k r(z) dz$$

を要素に持つ Hankel 行列の一般化固有値問題として求解するというものである. 複素モーメント型固有値解法は, 計算コストの主要部に対して階層的な並列性を持ち, 高い並列性能を発揮することからこれまで活発に研究が進められてきており, 櫻井・杉浦のアプローチに対する改良法 [4, 5, 13], Polizzi による FEAST 法 [11] およびその改良法 [2, 14, 15] など, 様々な同種の解法が提案されている. 詳細は文献 [8] を参照されたい. また, 近年我々は, 複素モーメント型固有値解法で用いられる部分空間がある種の Krylov 部分空間である点に着目し, block Arnoldi 法に基づく複素モーメント型固有値解法 block SS-Arnoldi 法 [6] およびその改良である block SS-CAA 法 [9] を開発した.

また実用上, 複素モーメント型固有値解法に対して部分空間反復法に基づく精度改善が用いられる [7, 8, 11]. 本研究では, block SS-CAA 法 [9] に対して, 部分空間反復法と比

較して収束性が高い block Arnoldi 法を適用することで、収束性の改善を図る。提案法は、高次の複素モーメントに基づく Krylov 部分空間および反復で用いる Krylov 部分空間の 2 つの Krylov 部分空間を利用した複素モーメント型固有値解法となる。

本論文の構成を以下に示す。第 2 節において、複素モーメント型固有値解法の概略について記す。第 3 節において、2 つの Krylov 部分空間を利用した複素モーメント型固有値解法の基本アイデアおよび効率的実装法を提案する。第 4 節で数値実験から提案法の有効性を検証し、第 5 節でまとめを行う。

本論文では以下の表記を用いる。行列 $V = [v_1, v_2, \dots, v_m] \in \mathbb{C}^{n \times m}$ に対し、 $\mathcal{R}(V) := \text{span}\{v_1, v_2, \dots, v_m\}$ を行列 V の Range 空間とする。また、 $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ に対し、

$$\begin{aligned} \mathcal{K}_k^\square(A, V) &:= \mathcal{R}([V, AV, \dots, A^{k-1}V]), \\ B_k^\square(A, V) &:= \left\{ \sum_{i=0}^{k-1} A^i V \alpha_i^\square \mid \alpha_i^\square \in \mathbb{C}^{L \times L} \right\} \end{aligned}$$

を block Krylov 部分空間とする。また、本論文では MATLAB 表記を用いる。

2 複素モーメント型固有値解法

本論文では簡単のため行列束 (A, B) が対角化可能であると仮定する。すなわち、次式を満たすような正則行列 $Y^{-1} = [\tilde{y}_1, \tilde{y}_2, \dots, \tilde{y}_n]^H$ および $X = [x_1, x_2, \dots, x_n]$ が存在する。

$$Y^{-1}(zB - A)X = z \begin{bmatrix} I_r & \\ & O_{n-r} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \Lambda_r & \\ & I_{n-r} \end{bmatrix}.$$

ここで、 $\Lambda_r = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_r)$ である。一般化固有値問題 $Ax_i = \lambda_i Bx_i$ は r 個の有限の固有値 $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_r$ および $n - r$ 個の無限固有値を持ち、対応する左/右固有ベクトルは $\tilde{y}_i, x_i$ である。また、 $\tilde{X}^H = [\tilde{x}_1, \tilde{x}_2, \dots, \tilde{x}_n]^H = X^{-1}$ とし、 $X_r := [x_1, x_2, \dots, x_r]$, $\tilde{X}_r := [\tilde{x}_1, \tilde{x}_2, \dots, \tilde{x}_r]$, $X_\Omega := [x_i \mid \lambda_i \in \Omega]$, $\tilde{X}_\Omega := [\tilde{x}_i \mid \lambda_i \in \Omega]$, $\Lambda_\Omega := \text{diag}(\lambda_i \in \Omega)$ と置く。

$L, M \in \mathbb{N}$ を入力パラメータ、 $V \in \mathbb{C}^{n \times L}$ を列フルランク行列とする。また、行列 $S \in \mathbb{C}^{n \times LM}$, $S_k \in \mathbb{C}^{n \times L}$ を以下のように周回積分により定義する。

$$S := [S_0, S_1, \dots, S_{M-1}], \quad S_k := \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma} z^k (zB - A)^{-1} B V dz. \quad (2)$$

この時、行列 S および S_k に対し、以下の定理が成り立つ。詳細は [7] などを参照されたい。

定理 1 一般化固有値問題 (1) の固有値数 m が $m \leq LM$ を満し、 $\text{rank}(S) = m$ とする。この時、以下が成り立つ。

$$\mathcal{R}(S) = \mathcal{R}(X_\Omega).$$

定理 2 行列 S_k は以下のように展開される。

$$S_k = X_\Omega \Lambda_\Omega^k \tilde{X}_\Omega^H V = C_\Omega^k S_0, \quad C_\Omega := X_\Omega \Lambda_\Omega \tilde{X}_\Omega^H.$$

Algorithm 1 The block SS-RR method**Input:** $L, M, N \in \mathbb{N}, \delta \in \mathbb{R}, V \in \mathbb{C}^{n \times L}, (z_j, \omega_j)$ for $j = 1, 2, \dots, N$ **Output:** Approximate eigenpairs $(\hat{\lambda}_i, \hat{\mathbf{x}}_i)$ for $i = 1, 2, \dots, \hat{m}$

- 1: Compute $\hat{S}_k = \sum_{j=1}^N \omega_j z_j^k (z_j B - A)^{-1} B V$, and set $\hat{S} = [\hat{S}_0, \hat{S}_1, \dots, \hat{S}_{M-1}]$
- 2: Compute low-rank approx. of $\hat{S}$ using the threshold δ :
 $\hat{S} = [U_1, U_2][\Sigma_1, O; O, \Sigma_2][W_1, W_2]^H \approx U_1 \Sigma_1 W_1^H$
- 3: Compute eigenpairs $(\theta_i, \mathbf{t}_i)$ of $U_1^H A U_1 \mathbf{t}_i = \theta_i U_1^H B U_1 \mathbf{t}_i$,
 and compute $(\hat{\lambda}_i, \hat{\mathbf{x}}_i) = (\theta_i, U_1 \mathbf{t}_i)$ for $i = 1, 2, \dots, \hat{m}$

定理 1 は部分空間 $\mathcal{R}(S)$ が対象の固有ベクトル $\mathbf{x}_i, \lambda_i \in \Omega$ のみを含み、部分空間 $\mathcal{R}(S)$ に基づく射影法により対象の固有対が計算可能であることを意味する。各種の複素モーメント型固有値解法は上記の定理 1, 2 に基づき解法が設計され、周回積分 (2) を N 点台形則等の数値積分により

$$\hat{S} := [\hat{S}_0, \hat{S}_1, \dots, \hat{S}_{M-1}], \quad \hat{S}_k := \sum_{j=1}^N \omega_j z_j^k (z_j B - A)^{-1} B V$$

のように近似することでアルゴリズムが導出される。ここで、 z_j は積分点、 ω_j は対応する重みであり、一般に

$$\sum_{j=1}^N \omega_j z_j^k \begin{cases} = 0, & k = 0, 1, \dots, N-2 \\ \neq 0, & k = -1 \end{cases}$$

を満たすよう設定される。

2.1 block SS-RR 法

代表的な複素モーメント型固有値解法の一つである block SS-RR 法 [5] は、定理 1 に基づき、部分空間 $\mathcal{R}(\hat{S})$ に基づく Rayleigh-Ritz の技法を一般化固有値問題 (1) に適用することで導出される。実用上は、計算コストの削減および数値安定性の改善のため、行列 $\hat{S}$ の低ランク近似

$$\hat{S} = [U_1, U_2] \begin{bmatrix} \Sigma_1 & O \\ O & \Sigma_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} W_1^H \\ W_2^H \end{bmatrix} \approx U_1 \Sigma_1 W_1^H,$$

を行い、 U_1 を基底として用いる。この時、得られる小規模固有値問題は

$$U_1^H A U_1 \mathbf{t}_i = \theta_i U_1^H B U_1 \mathbf{t}_i$$

であり、近似固有対は $(\hat{\lambda}_i, \hat{\mathbf{x}}_i) = (\theta_i, U_1 \mathbf{t}_i)$ として計算される。block SS-RR 法のアルゴリズムを Algorithm 1 に示す。

2.2 block SS-CAA 法

行列 $\widehat{S}_k$ の関係性として、以下の定理が成り立つ [7].

定理 3 $0 \leq k \leq N-1$ に対して、行列 $\widehat{S}_k$ は以下のように展開される.

$$\widehat{S}_k = C^k \widehat{S}_0, \quad C := X_r \Lambda_r \widetilde{X}_r^H.$$

このため、 $M \leq N$ に対し、

$$\mathcal{R}(\widehat{S}) = \mathcal{K}_M^\square(C, \widehat{S}_0)$$

が成り立つ.

定理 4 $M \leq N$ に対し、一般化固有値問題 (1) は、標準固有値問題

$$C \mathbf{x}_i = \lambda_i \mathbf{x}_i, \quad \mathbf{x}_i \in \mathcal{R}(X_r), \quad \lambda_i \in \Omega \subset \mathbb{C} \quad (3)$$

と等しい右固有対を持つ.

近年我々は、定理 3, 4 に基づき、標準固有値問題 (3) に対する block Arnoldi 法として、block SS-Arnoldi 法 [6], またその改良として block communication-avoiding Arnoldi 法に基づく block SS-CAA 法 [9] を提案した.

定理 3 より block 版の communication-avoiding Arnoldi 過程 [3] を用いると、行列 $\widehat{S}, \widehat{S}_+ := [\widehat{S}_0, \widehat{S}_1, \dots, \widehat{S}_M]$ の関係式

$$C \widehat{S} = \widehat{S}_+ D_1, \quad D_1 := \begin{bmatrix} O_{L,LM} \\ I_{LM} \end{bmatrix}$$

および QR 分解

$$\begin{aligned} \widehat{S}_+ &= Q_{M+1}^\square R_{M+1}^\square, \\ \widehat{S} &= Q_M^\square R_M^\square = Q_{M+1}^\square(:, 1:LM) R_{M+1}^\square(1:LM, 1:LM) \end{aligned}$$

から $\mathcal{K}_M^\square(C, \widehat{S}_0)$ に対する block Arnoldi 過程の行列表現は

$$(Q_M^\square)^H C Q_M^\square = H_M^\square, \quad H_M^\square = D_2 R_{M+1}^\square D_1 (R_M^\square)^{-1}$$

で与えられ、対象の固有対は block Hessenberg 行列 $H_M^\square$ の標準固有値問題から求める事ができる. ここで、 $D_2 := [I_{LM}, O_{LM,L}]$ である.

また、実用上の観点から、行列 $\widehat{S}$ の低ランク近似

$$\widehat{S} = Q_M^\square R_M^\square = Q_M^\square [U_{R1}, U_{R2}] \begin{bmatrix} \Sigma_{R1} & O \\ O & \Sigma_{R2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} W_{R1}^H \\ W_{R2}^H \end{bmatrix} \approx Q_M^\square U_{R1} \Sigma_{R1} W_{R1}^H$$

を用いると、解くべき小規模固有値問題は

$$U_{R1}^H H_M^\square U_{R1} \mathbf{t}_i = \theta_i \mathbf{t}_i$$

Algorithm 2 The block SS-CAA method

Input: $L, M, N \in \mathbb{N}, \delta \in \mathbb{R}, V \in \mathbb{C}^{n \times L}, (z_j, \omega_j)$ for $j = 1, 2, \dots, N$

Output: Approximate eigenpairs $(\hat{\lambda}_i, \hat{\mathbf{x}}_i)$ for $i = 1, 2, \dots, \hat{m}$

- 1: Compute $\hat{S}_k = \sum_{j=1}^N \omega_j z_j^k (z_j B - A)^{-1} B V$, and set $\hat{S}_+ = [\hat{S}_0, \hat{S}_1, \dots, \hat{S}_M]$
 - 2: $[Q_{M+1}^\square, R_{M+1}^\square] = \text{qr}(\hat{S}_+)$
 - 3: Set $R_M^\square := R_{M+1}^\square(1:LM, 1:LM)$, $Q_M^\square := Q_{M+1}^\square(:, 1:LM)$
 - 4: Compute low-rank approx. of $R_M^\square$ using the threshold δ :
 $R_M^\square = [U_{R1}, U_{R2}][\Sigma_{R1}, O; O, \Sigma_{R2}][W_{R1}, W_{R2}]^H \approx U_{R1} \Sigma_{R1} W_{R1}^H$
 - 5: Compute eigenpairs $(\theta_i, \mathbf{t}_i)$ of $U_{R1}^H R_{M+1}^\square(1:LM, L+1:LM+L) W_{R1} \Sigma_{R1}^{-1} \mathbf{t}_i = \theta_i \mathbf{t}_i$,
 and compute $(\hat{\lambda}_i, \hat{\mathbf{x}}_i) = (\theta_i, Q_M^\square U_{R1} \mathbf{t}_i)$ for $i = 1, 2, \dots, \hat{m}$
-

となり, 近似固有対は $(\hat{\lambda}_i, \hat{\mathbf{x}}_i) = (\theta_i, Q_M^\square U_{R1} \mathbf{t}_i)$ として得られる. ここで, 係数行列 $U_{R1}^H H_M^\square U_{R1}$ は

$$U_{R1}^H H_M^\square U_{R1} = U_{R1}^H R_{M+1}^\square(1:LM, L+1:LM+L) W_{R1} \Sigma_{R1}^{-1}$$

として効率的に計算可能である [9]. block SS-CAA 法のアルゴリズムを Algorithm 2 に示す.

block SS-CAA 法は, Rayleigh-Ritz の技法を直接適用する block SS-RR 法と異なり, block communication-avoiding Arnoldi 過程に基づき小規模固有値問題を構築するため, 計算コストの面で優位性がある. また, block SS-CAA 法は block SS-RR 法と同じ部分空間 $\mathcal{R}(\hat{S})$ の正規直交基底を用いた射影法であるため, 両解法はほぼ同じ精度を示す [9].

2.3 部分空間反復法に基づく精度改善

複素モーメント型固有値解法における数値積分の作用は, 入力行列 V に対して対象の固有ベクトルのみを強く透過するフィルターとして捉えられ,

$$\hat{S}_k = X_r \Lambda_r^k f(\Lambda_r) \tilde{X}_r^H V, \quad f(\lambda_i) := \sum_{j=1}^N \frac{\omega_j}{z_j - \lambda_i},$$

と書くことができる. このため, 部分空間 $\mathcal{R}(\hat{S})$ を利用した複素モーメント型固有値解法はフィルター $f(\lambda_i)$ の強度に応じた精度の固有対が得られる. この性質を利用し, フィルターを反復適用することによって固有対の精度改善ができることが知られている [7, 8, 11].

具体的には, 行列 $\hat{S}$ の代わりに, 初期行列を $\hat{S}_0^{(0)} = V$ とし,

$$\hat{S}_0^{(\nu)} := \sum_{j=1}^N \omega_j (z_j B - A)^{-1} B \hat{S}_0^{(\nu-1)}, \quad \nu = 1, 2, \dots, \ell - 1, \quad (4)$$

$$\hat{S}^{(\ell)} := [\hat{S}_0^{(\ell)}, \hat{S}_1^{(\ell)}, \dots, \hat{S}_{M-1}^{(\ell)}], \quad \hat{S}_k^{(\ell)} := \sum_{j=1}^N \omega_j z_j^k (z_j B - A)^{-1} B \hat{S}_0^{(\ell-1)} \quad (5)$$

Algorithm 3 The block SS-CAA method with iteration technique

Input: $L, M, N, \ell \in \mathbb{N}, \delta \in \mathbb{R}, \widehat{S}_0^{(0)} = V \in \mathbb{C}^{n \times L}, (z_j, \omega_j)$ for $j = 1, 2, \dots, N$

Output: Approximate eigenpairs $(\widehat{\lambda}_i, \widehat{x}_i)$ for $i = 1, 2, \dots, \widehat{m}$

- 1: Compute $\widehat{S}_0^{(\nu)} = \sum_{j=1}^N \omega_j z_j^k (z_j B - A)^{-1} B \widehat{S}_0^{(\nu-1)}$ for $\nu = 1, 2, \dots, \ell - 1$
 - 2: Compute $\widehat{S}_k^{(\ell)} = \sum_{j=1}^N \omega_j z_j^k (z_j B - A)^{-1} B \widehat{S}_0^{(\ell-1)}$, and set $\widehat{S}_+^{(\ell)} = [\widehat{S}_0^{(\ell)}, \widehat{S}_1^{(\ell)}, \dots, \widehat{S}_M^{(\ell)}]$
 - 3: $[Q_{M+1}^\square, R_{M+1}^\square] = \text{qr}(\widehat{S}_+^{(\ell)})$
 - 4: Set $R_M^\square := R_{M+1}^\square(1:LM, 1:LM)$, $Q_M^\square := Q_{M+1}^\square(:, 1:LM)$
 - 5: Compute low-rank approx. of $R_M^\square$ using the threshold δ :
 $R_M^\square = [U_{R1}, U_{R2}][\Sigma_{R1}, O; O, \Sigma_{R2}][W_{R1}, W_{R2}]^H \approx U_{R1} \Sigma_{R1} W_{R1}^H$
 - 6: Compute eigenpairs (θ_i, t_i) of $U_{R1}^H R_{M+1}^\square(1:LM, L+1:LM+L) W_{R1} \Sigma_{R1}^{-1} t_i = \theta_i t_i$,
 and compute $(\widehat{\lambda}_i, \widehat{x}_i) = (\theta_i, Q_M^\square U_{R1} t_i)$ for $i = 1, 2, \dots, \widehat{m}$
-

の反復計算により得られた行列 $\widehat{S}^{(\ell)}$ を用いる。この時、行列 $\widehat{S}_k^{(\ell)}$ は

$$\widehat{S}_k^{(\ell)} = X_r \Lambda_r^k f(\Lambda_r)^\ell \widetilde{X}_r^H V$$

と書け、上記の式 (4), (5) によるフィルターの反復適用は、 $F := X_r f(\Lambda_r) \widetilde{X}_r^H$ に基づく加速部分空間法として解釈できる。

$$\widehat{S}_k^{(\ell)} = C^k \widehat{S}_0^{(\ell)}, \quad \widehat{S}_0^{(\ell)} = F^\ell V.$$

反復を伴った複素モーメント型固有値解法の精度に関し、以下の定理が成り立つ [7, 8].

定理 5 (λ_i, x_i) を一般化固有値問題 $Ax_i = \lambda_i Bx_i$ の固有対であるとし、 $|f(\lambda_i)| \geq |f(\lambda_{i+1})|$ とする。 $\mathcal{P}^{(\ell)}$ および $\mathcal{P}_{LM}$ を部分空間 $\mathcal{R}(\widehat{S}^{(\ell)})$ に対する直交射影および不変部分空間 $\text{span}\{x_1, x_2, \dots, x_{LM}\}$ に対する固有射影であるとする。行列 $\mathcal{P}_{LM}[V, CV, \dots, C^{M-1}V]$ がフルランクであるとする、各固有ベクトル $x_i, i = 1, 2, \dots, LM$ に対して、 $\mathcal{P}_{LM}s_i = x_i$ を満たすベクトル $s_i \in \mathcal{K}_M^\square(C, V)$ が唯一存在し、

$$\|(I - \mathcal{P}^{(\ell)})x_i\|_2 \leq \alpha \beta_i \left| \frac{f(\lambda_{LM+1})}{f(\lambda_i)} \right|^\ell, \quad i = 1, 2, \dots, LM,$$

が成り立つ。ここで、 $\alpha = \|X_r\|_2 \|\widetilde{X}_r\|_2, \beta_i = \|x_i - s_i\|_2$ である。

block SS-CAA 法に対して反復を適用したアルゴリズムを Algorithm 3 に示す。

3 2つの Krylov 部分空間を利用した複素モーメント型固有値解法

近年、多項式フィルター型内部固有値解法に対して、Lanczos 法に基づく反復を適用する改良法が提案された [1]. 本研究では、このアイデアを複素モーメント型固有値解法の反復に導入する。

3.1 基本的アイデア

2.3節に示したように、複素モーメント型固有値解法では、反復計算 (4), (5) により部分空間

$$\mathcal{R}(\widehat{S}_0^{(\ell)}) = \mathcal{R}(F^\ell V)$$

が生成され、高次の複素モーメントを利用して拡大された block Krylov 部分空間

$$\mathcal{R}(\widehat{S}^{(\ell)}) = \mathcal{R}([\widehat{S}_0^{(\ell)}, \widehat{S}_1^{(\ell)}, \dots, \widehat{S}_{M-1}^{(\ell)}]) = \mathcal{K}_M^\square(C, \widehat{S}_0^{(\ell)}) = \mathcal{K}_M^\square(C, F^\ell V)$$

を用いて近似固有対が計算される。

本論文では、部分空間反復法を block Arnoldi 法に変更することで収束性の改善を図る。具体的には部分空間 $\mathcal{R}(F^\ell V)$ の生成過程で計算される $F^\nu V, \nu = 1, 2, \dots, \ell$ を全て取り込んだ block Krylov 部分空間

$$\mathcal{K}_\ell^\square(F, FV) = \mathcal{R}([FV, F^2V, \dots, F^\ell V])$$

を考える。また、生成された block Krylov 部分空間 $\mathcal{K}_\ell^\square(F, FV)$ に対し、高次の複素モーメントを利用して拡大する。生成される部分空間は

$$\mathcal{R}(\widehat{T}^{(\ell)}), \quad \widehat{T}^{(\ell)} := [\widehat{S}^{(1)}, \widehat{S}^{(2)}, \dots, \widehat{S}^{(\ell)}]$$

である。また、 $C = X_r \Lambda_r \widetilde{X}_r^H, F = X_r f(\Lambda_r) \widetilde{X}_r^H$ より行列 F と C が可換 $CF = FC$ である点に着目すると、得られる空間は

$$\begin{aligned} \mathcal{R}(\widehat{T}^{(\ell)}) &= \mathcal{K}_M^\square(C, FV) + \mathcal{K}_M^\square(C, F^2V) + \dots + \mathcal{K}_M^\square(C, F^\ell V) \\ &= \mathcal{K}_\ell^\square(F, FV) + \mathcal{K}_\ell^\square(F, CFV) + \dots + \mathcal{K}_\ell^\square(F, C^{M-1}FV) \\ &=: \mathcal{K}_{M,\ell}^\square(C, F, FV) \end{aligned}$$

と書くことができ、部分空間 $\mathcal{K}_{M,\ell}^\square(C, F, FV)$ は可換な2つの係数行列を持つ block Krylov 部分空間と見ることができる。また、

$$\mathcal{K}_M^\square(C, F^\ell V) \subset \mathcal{K}_{M,\ell}^\square(C, F, FV)$$

であるため、提案法は従来の複素モーメント型固有値解法と比較して高い精度の固有対を計算できることが期待される。

3.2 効率的実装法

部分空間 $\mathcal{K}_{M,\ell}^\square(C, F, FV)$ に基づく複素モーメント型固有値解法の最も簡単な実装法は、block SS-RR 法と同様に全ての基底ベクトル $\widehat{T}^{(\ell)}$ を生成し、一般化固有値問題 (1) に対して陽に Rayleigh-Ritz の技法を適用することである。行列 $\widehat{T}^{(\ell)}$ の低ランク近似を

$$\widehat{T}^{(\ell)} = [U_{T1}, U_{T2}] \begin{bmatrix} \Sigma_{T1} & O \\ O & \Sigma_{T2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} W_{T1}^H \\ W_{T2}^H \end{bmatrix} \approx U_{T1} \Sigma_{T1} W_{T1}^H,$$

とすると、得られる小規模固有値問題は、

$$U_{T1}^H A U_{T1} \mathbf{t}_i = \theta_i U_{T1}^H B U_{T1} \mathbf{t}_i$$

となる。この実装法は非常にシンプルではあるものの、係数行列 $U_{T1}^H A U_{T1}$, $U_{T1}^H B U_{T1}$ を陽に生成する必要があり、この計算コストが大きくなる。

この問題点を解決するため本論文では、部分空間 $\mathcal{K}_{M,\ell}^\square(C, F, FV)$ の Krylov 部分空間としての性質を利用し、 $\mathcal{K}_{M,\ell}^\square(C, F, FV)$ に対する block Arnoldi 過程の行列表現を導出する。行列 $\hat{T}^{(\ell)}$ の定義から、 $\hat{T}_+^{(\ell)} := [\hat{S}_+^{(1)}, \hat{S}_+^{(2)}, \dots, \hat{S}_+^{(\ell)}]$ とすると、

$$C\hat{T}^{(\nu)} = \hat{T}_+^{(\nu)} D_1^{(\nu)}, \quad D_1^{(\nu)} := \bigoplus_{i=1}^{\nu} D_1, \quad \nu = 1, 2, \dots, \ell$$

が成り立ち、行列 $\hat{T}^{(\ell)}, \hat{T}_+^{(\ell)}$ の QR 分解を

$$\hat{T}^{(\nu)} = Q^{(\nu)} R^{(\nu)}, \quad \hat{T}_+^{(\nu)} = Q_+^{(\nu)} R_+^{(\nu)}, \quad \nu = 1, 2, \dots, \ell \quad (6)$$

と置くと、行列表現として

$$(Q^{(\nu)})^H C Q^{(\nu)} = H_M^{(\nu)}, \quad H_M^{(\nu)} = D_2^{(\nu)} R_+^{(\nu)} D_1^{(\nu)} (R^{(\nu)})^{-1}, \quad \nu = 1, 2, \dots, \ell$$

を得る。ここで、

$$D_2^{(\nu)} := \bigoplus_{i=1}^{\nu} D_2$$

である。ただし、行列 $\hat{T}_+^{(\nu)}$ の QR 分解は逐次的に行うことができ、また $Q^{(\nu)}, R^{(\nu)}$ は $Q_+^{(\nu)}, R_+^{(\nu)}$ の部分行列として取り出すことができる。このため、QR 分解 (6) は $\hat{T}_+^{(\ell)}$ の QR 分解 1 回分の計算コストで計算可能である。

block SS-CAA 法と同様に行列 $\hat{T}^{(\ell)}$ の低ランク近似

$$\hat{T}^{(\nu)} = Q^{(\nu)} R^{(\nu)} = Q^{(\nu)} [U_{R1}^{(\nu)}, U_{R2}^{(\nu)}] \begin{bmatrix} \Sigma_{R1}^{(\nu)} & O \\ O & \Sigma_{R2}^{(\nu)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} (W_{R1}^{(\nu)})^H \\ (W_{R2}^{(\nu)})^H \end{bmatrix} \approx Q^{(\nu)} U_{R1}^{(\nu)} \Sigma_{R1}^{(\nu)} (W_{R1}^{(\nu)})^H$$

を行うことで、小規模固有値問題

$$(U_{R1}^{(\nu)})^H D_2^{(\nu)} R_+^{(\nu)} D_1^{(\nu)} W_{R1}^{(\nu)} (\Sigma_{R1}^{(\nu)})^{-1} \mathbf{t}_i = \theta_i \mathbf{t}_i$$

が得られる。近似固有対は $(\hat{\lambda}_i, \hat{\mathbf{x}}_i) = (\theta_i, Q^{(\nu)} U_{R1}^{(\nu)} \mathbf{t}_i)$ により計算される。提案法のアルゴリズムは Algorithm 4 に示される。

4 数値実験

本節では、提案法 (Algorithm 4) の有効性を代表的な複素モーメント型固有値解法である block SS-RR 法 (Algorithm 1) と比較し、検証する。テスト問題は

$$A \mathbf{x}_i = \lambda_i B \mathbf{x}_i,$$

$$A = \text{diag}(-49.99, -49.98, \dots, 49.91), \quad B = I_{1000}, \quad \lambda_i \in [-1, 1]$$

Algorithm 4 A proposed method

Input: $L, M, N, \ell \in \mathbb{N}, \delta \in \mathbb{R}, \widehat{S}_0^{(0)} = V \in \mathbb{C}^{n \times L}, (z_j, \omega_j)$ for $j = 1, 2, \dots, N$

Output: Approximate eigenpairs $(\widehat{\lambda}_i, \widehat{x}_i)$ for $i = 1, 2, \dots, \widehat{m}$

- 1: **for** $\nu = 1, 2, \dots, \ell$ **do**:
 - 2: Compute $\widehat{S}_0^{(\nu)} = \sum_{j=1}^N \omega_j z_j^k (z_j B - A)^{-1} B \widehat{S}_0^{(\nu-1)}$
 - 3: Set $\widehat{S}^{(\nu)} = [\widehat{S}_0^{(\nu)}, \widehat{S}_1^{(\nu)}, \dots, \widehat{S}_{M-1}^{(\nu)}]$ and $\widehat{S}_+^{(\nu)} = [\widehat{S}_0^{(\nu)}, \widehat{S}_1^{(\nu)}, \dots, \widehat{S}_M^{(\nu)}]$
 - 4: Set $\widehat{T}^{(\nu)} = [\widehat{T}^{(\nu-1)}, \widehat{S}^{(\nu)}]$ and $\widehat{T}_+^{(\nu)} = [\widehat{T}_+^{(\nu-1)}, \widehat{S}_+^{(\nu)}]$
 - 5: Compute QR factorizations $\widehat{T}_+^{(\nu)} = Q_+^{(\nu)} R_+^{(\nu)}$ from $Q_+^{(\nu-1)}, R_+^{(\nu-1)}$
 - 6: Set $Q^{(\nu)}, R^{(\nu)}$ s.t. $\widehat{T}^{(\nu)} = Q^{(\nu)} R^{(\nu)}$ as submatrices of $Q_+^{(\nu)}, R_+^{(\nu)}$
 - 7: Compute low-rank approx. of $R^{(\nu)}$ using the threshold δ :

$$R^{(\nu)} = [U_{R1}^{(\nu)}, U_{R2}^{(\nu)}][\Sigma_{R1}^{(\nu)}, O; O, \Sigma_{R2}^{(\nu)}][W_{R1}^{(\nu)}, W_{R2}^{(\nu)}]^H \approx U_{R1}^{(\nu)} \Sigma_{R1}^{(\nu)} (W_{R1}^{(\nu)})^H$$
 - 8: Compute eigenpairs (θ_i, t_i) of $(U_{R1}^{(\nu)})^H D_2^{(\nu)} R_+^{(\nu)} D_1^{(\nu)} W_{R1}^{(\nu)} (\Sigma_{R1}^{(\nu)})^{-1} t_i = \theta_i t_i$,
 and compute $(\widehat{\lambda}_i, \widehat{x}_i) = (\theta_i, Q^{(\nu)} U_{R1}^{(\nu)} t_i)$ for $i = 1, 2, \dots, \widehat{m}$
 - 9: **end for**
-

とし, $m = 20$ 個の固有対を求める. パラメータは $(M, N, \ell, \delta) = (4, 16, 5, 10^{-15})$ とし, 初期部分空間サイズ LM が対象の固有値数よりも小さい場合 $L = 3$ ($LM = 12 < m = 20$), $L = 4$ ($LM = 16 < m = 20$), 等しい場合 $L = 5$ ($LM = 20 = m = 20$), 大きい場合 $L = 6$ ($LM = 24 > m = 20$) の固有対の精度を比較する. 積分路は中心 0, 長径 1, 短径 0.1 の楕円とし, N 点台形則を用いて数値積分を行う. 数値実験は MATLAB2016a で行った.

Fig. 1 に各 L における残差ノルムを示す. Fig. 1 に示されるように, block SS-RR 法は部分空間サイズ LM が対象となる固有値数より小さい場合 ($LM \leq m$) に対しては解を得ることができない. これは, block SS-RR 法が構築する部分空間サイズ LM が反復によらずに一定である点に起因する. 一方, 提案法の部分空間サイズ $LM\ell$ は反復回数 ℓ に併せて拡大するため, 初期部分 LM が小さい場合においても高精度の近似固有対を計算できる結果が得られた.

5 まとめ

本論文では, 2 つの Krylov 部分空間を利用した複素モーメント型固有値解法を提案した. 複素モーメント型固有値解法の初期部分空間サイズ LM の設定は解法の性能に大きく影響を与える. しかしながら, 一般に対象の固有値数 m は未知であるため, 初期部分空間サイズ LM の適切な設定には予め固有値分布を推するなど様々な工夫が必要である. これに対して, 提案法は初期部分空間サイズの設定に対して非常にロバストであり, LM の設定によらず常に高い精度の近似固有対を計算できることが数値実験から示された.

今後の課題として, より大規模な問題に対して提案法を適用しその有効性を検証することが挙げられる.

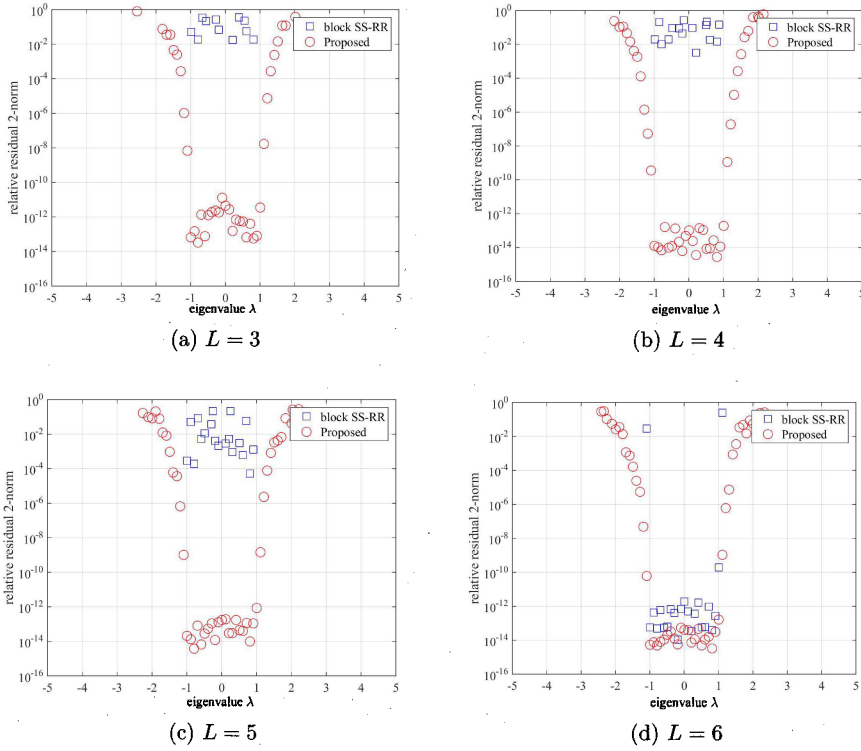


Fig. 1: Relative residual 2-norms.

謝辞

本研究は JST/ACT-I, JST/CREST, 筑波大学研究基盤支援プログラムの援助を受けた。

参考文献

- [1] H.-R. Fang, Y. Saad, A filtered Lanczos procedure for extreme and interior eigenvalue problems, SIAM J. Sci. Comput., **34**(2012), 2220–2246.
- [2] S. Güttel, E. Polizzi, T. Tang, G. Viaud, Zolotarev quadrature rules and load balancing for the FEAST eigensolver, arXiv:1407.8078.
- [3] M. Hoemmen, Communication-avoiding Krylov subspace methods, PhD thesis, University of California, Berkeley (2010).

- [4] T. Ikegami, T. Sakurai, U. Nagashima, A filter diagonalization for generalized eigenvalue problems based on the Sakurai-Sugiura projection method, *J. Comput. Appl. Math.*, **233**(2010), 1927–1936.
- [5] T. Ikegami, T. Sakurai, Contour integral eigensolver for non-Hermitian systems: a Rayleigh-Ritz-type approach, *Taiwan. J. Math.*, **14** (2010), 825–837.
- [6] A. Imakura, L. Du, T. Sakurai, A block Arnoldi-type contour integral spectral projection method for solving generalized eigenvalue problems, *Applied Mathematics Letters*, **32** (2014), 22–27.
- [7] A. Imakura, L. Du, T. Sakurai, Error bounds of Rayleigh–Ritz type contour integral-based eigensolver for solving generalized eigenvalue problems, *Numer. Alg.*, **71**(2016), 103–120.
- [8] A. Imakura, L. Du, T. Sakurai, Relationships among contour integral-based methods for solving generalized eigenvalue problems, *J. Ind. Appl. Math.*, **33** (2016), 721–750.
- [9] A. Imakura, T. Sakurai, Block Krylov-type complex moment-based eigensolvers for solving generalized eigenvalue problems, *Numer. Alg.*, (accepted).
- [10] P. Kravanja, T. Sakurai, M. van Barel, On locating clusters of zeros of analytic functions, *BIT*, **39** (1999), 646–682.
- [11] E. Polizzi, A density matrix-based algorithm for solving eigenvalue problems, *Phys. Rev. B*, **79** (2009), 115112.
- [12] T. Sakurai, H. Sugiura, A projection method for generalized eigenvalue problems using numerical integration, *J. Comput. Appl. Math.*, **159** (2003), 119–128.
- [13] T. Sakurai, H. Tadano, CIRRR: a Rayleigh-Ritz type method with counter integral for generalized eigenvalue problems. *Hokkaido Math. J.*, **36** (2007), 745–757.
- [14] P. T. P. Tang, E. Polizzi, FEAST as a subspace iteration eigensolver accelerated by approximate spectral projection, *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, **35**(2014), 354–390.
- [15] G. Yin, R. H. Chan, M.-C. Yeung, A FEAST algorithm for generalized non-Hermitian eigenvalue problems, *arXiv:1404.1768*.