

区分的に値を持つ基底ベクトルを用いた逆べき乗法の高速化

崇城大学 工学部 正会員 ○片山拓朗, 平井一男, 上杉真平
九州東海大学 工学部 正会員 柏木光博

1. まえがき

筆者らは逆べき乗法を基礎とする固有値問題の反復解法を提案している¹⁾。提案法は区分的に値を持つ基底ベクトルを用いた反復ベクトルの再構成とこの基底ベクトルを逐次作り出す連立方程式の反復解法により構成される。数値実験により、大型疎行列の有力な解法である Lanczos 法と収束性や計算時間などの性能を比較した。

2. 逆べき乗法における反復ベクトルの再構成

(1)式で示される対称行列 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ の固有値問題において、低次の固有値とそれに対応する固有ベクトルを求める問題を考える。ここに、 $x \in \mathbb{R}^n$, $\lambda \in \mathbb{R}$ とする。また、 $\mathbb{R}$ と $\mathbb{R}^n$ および $\mathbb{R}^{n \times m}$ はそれぞれ実数と n 次元実ベクトルおよび $n \times m$ 次元実行列の集合を示す。(1)式の固有値とそれに対応する固有ベクトルをそれぞれ λ_i , x_i , $i=1, 2, \dots, n$ とする。逆べき乗法は、反復 s における t 番目の固有ベクトル x_t の近似固有ベクトルを $x_t^{(s)}$ とすると、(2)式の連立方程式をベクトル $u \in \mathbb{R}^n$ について繰り返し解くことに帰着する。

提案法では、互いに独立な部分空間 $V^{(s)} \in \mathbb{R}^{n \times n_v}$ と $W \in \mathbb{R}^{n \times n_w}$ が存在し、(2)式の $x_t^{(s)}$ と u がそれぞれ(3), (4)式で表せるものと仮定する。ここに、 $b, c \in \mathbb{R}^{n_v}$, $d \in \mathbb{R}^{n_w}$ である。逆べき乗法は次の段階の反復ベクトルとして u を正規化したものを用いるが、提案法は(5)式で反復ベクトルを再構成する。ここに、ベクトル $y_t \in \mathbb{R}^{n_v}$ と $z_t \in \mathbb{R}^{n_w}$ は(6)式の固有値問題を満たす最低次から数えて t 番目の固有値 $\theta_t \in \mathbb{R}$ に対応する固有ベクトルとする。

$$Ax = \lambda x \text{ ---- (1),} \quad Au = x_t^{(s)} \text{ ---- (2),} \quad x_t^{(s)} = V^{(s)}b \text{ ---- (3),} \quad u = V^{(s)}c + Wd \text{ ---- (4)}$$

$$x_t^{(s+1)} = V^{(s)}y_t + Wz_t, \text{ ---- (5),} \quad \begin{bmatrix} V^{(s)T}AV^{(s)} & V^{(s)T}AW \\ W^TAV^{(s)} & W^TAW \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y \\ z \end{bmatrix} = \theta \begin{bmatrix} V^{(s)T}V^{(s)} & V^{(s)T}W \\ W^TV^{(s)} & W^TW \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y \\ z \end{bmatrix} \text{ ---- (6)}$$

3. 区分的に値を持つ基底ベクトルと部分空間 $V^{(s)}$ の更新

係数行列を $A = (A_{ij} \in \mathbb{R}^{n_i \times n_j}; i, j = 1, 2, \dots, m)$ とブロック行列を用いて表す。対角ブロック A_{ii} のサイズに合うベクトル $\bar{v}_{i,j}^{(s)} \in \mathbb{R}^{n_i}$, $j = 1, 2, \dots, \ell$ が存在し、 A_{ii} に相当する部分では意味のあるベクトル $\bar{v}_{i,j}^{(s)}$ を持ち、他の部分ではゼロ要素を持つベクトルを $\hat{v}_{i,j}^{(s)} \in \mathbb{R}^n$ として(7)式で定義する。次に、部分空間 $V_{i,j}^{(s)} \in \mathbb{R}^{n \times m}$ を(8)式で、部分空間 $V^{(s)}$ を(9)式で定義する。ここでは、ベクトル $\hat{v}_{i,j}^{(s)}$ を区分的に値を持つ基底ベクトルと呼ぶ。(5)式で得られる近似固有ベクトル $x_t^{(s+1)}$ を、ブロックベクトル $\bar{x}_{i,j}^{(s+1)} \in \mathbb{R}^{n_i}$ を用いて、(10)式で表す。そして、ベクトル $\bar{v}_{i,j}^{(s+1)}$ を(11)式で定義する。これらのベクトル $\bar{v}_{i,j}^{(s+1)}$ を用いると部分空間 $V^{(s)}$ を更新でき、基底の増加を防ぐことができる。

$$\hat{v}_{i,j}^{(s)T} \equiv [0, \dots, 0, \bar{v}_{i,j}^{(s)T}, 0, \dots, 0] \text{ ---- (7),} \quad V_{i,j}^{(s)} \equiv [\hat{v}_{1,j}, \dots, \hat{v}_{m,j}] \text{ ---- (8),} \quad V^{(s)} \equiv [V_{1,1}^{(s)}, \dots, V_{i,\ell}^{(s)}] \text{ ---- (9)}$$

$$x_j^{(s+1)T} \equiv [\bar{x}_{1,j}^{(s+1)T}, \dots, \bar{x}_{m,j}^{(s+1)T}] \text{ ---- (10),} \quad \bar{v}_{i,j}^{(s+1)} \equiv \bar{x}_{i,j}^{(s+1)} / \|\bar{x}_{i,j}^{(s+1)}\|, j = 1, 2, \dots, \ell \text{ ---- (11)}$$

4. 連立方程式: $Au = x_t^{(s)}$ の反復解法と基底ベクトルの計算

反復 $[k]$ における(2)式の近似解を(12)式で表す。ただし、反復は $k=1$ から開始するものとし、 $u^{[1]} = V^{(s)}c^{[1]}$ とする。係数ベクトル $c^{[k]}, d^{[k]}$ は(13)式の部分空間の連立方程式を満たすものとする。 $w^{[k-1]}$ は区分的に値を持つ基底ベクトルからなる部分空間とし、(14), (15), (16)式で定義するように $V^{(s)}$ と同様な構造を持つ。

キーワード：逆べき乗法, 反復ベクトルの再構成, 区分的に値を持つ基底ベクトル. 連絡先：〒860-0082 熊本市池田4丁目22番1号, 崇城大学環境建設工学科, Tel:096-326-3111, Fax:326-3000, E-mail:katayama@ce.sojo-u.ac.jp

$$\mathbf{u}^{[k]} = \mathbf{V}^{(s)} \mathbf{c}^{[k]} + \mathbf{W}^{[k-1]} \mathbf{d}^{[k]} \text{---- (12)}, \quad \begin{bmatrix} \mathbf{V}^{(s)T} \mathbf{A} \mathbf{V}^{(s)} & \mathbf{V}^{(s)T} \mathbf{A} \mathbf{W}^{[k-1]} \\ \mathbf{W}^{[k-1]T} \mathbf{A} \mathbf{V}^{(s)} & \mathbf{W}^{[k-1]T} \mathbf{A} \mathbf{W}^{[k-1]} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{c}^{[k]} \\ \mathbf{d}^{[k]} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{V}^{(s)T} \mathbf{x}_t^{(s)} \\ \mathbf{W}^{[k-1]T} \mathbf{x}_t^{(s)} \end{bmatrix} \text{---- (13)}$$

$$\hat{\mathbf{w}}_{i,j}^T \equiv [0, \dots, 0, \bar{\mathbf{w}}_{i,j}^T, 0, \dots, 0] \text{---- (14)}, \quad \mathbf{W}_{i,j} \equiv [\hat{\mathbf{w}}_{1,j}, \dots, \hat{\mathbf{w}}_{m,j}] \text{---- (15)}, \quad \mathbf{W}^{[k-1]} \equiv [\mathbf{W}_{1,1}, \dots, \mathbf{W}_{k-1,1}] \text{---- (16)}$$

$\mathbf{u}^{[k]}$ の残差ベクトル $\mathbf{r}^{[k]} \in \mathbb{R}^n$ を, ブロックベクトル $\bar{\mathbf{r}}_i^{[k]} \in \mathbb{R}^{n_i}$ を用いて, (17)式で定義する. 残差ベクトルのノルムが決められた値より大きいとき, (18), (19)式で新しく $\bar{\mathbf{w}}_{i,k}$ を作り, 次に基底ベクトル $\hat{\mathbf{w}}_{i,k}$ と部分空間 $\mathbf{W}_{i,k}$ を(14), (15)式で作る, これを元の部分空間 $\mathbf{W}^{[k-1]}$ に加えることにより部分空間を拡大・更新する. 以上の操作を残差ノルムが許容値以下になるまで繰り返すと, 解ベクトル $\mathbf{u}$ と部分空間 $\mathbf{W}$ が得られる. ただし, 部分空間 $\mathbf{W}$ の基底数は計算機の記憶容量から制限を受けるので, 反復数 k に上限値 k_q を設ける.

$$\mathbf{r}^{[k]} \equiv [\bar{\mathbf{r}}_1^{[k]T}, \bar{\mathbf{r}}_2^{[k]T}, \dots, \bar{\mathbf{r}}_m^{[k]T}]^T = \mathbf{x}_t^{(s)} - \mathbf{A} \mathbf{u}^{[k]} \text{---- (17)}, \quad \mathbf{A}_{ii} \bar{\mathbf{q}}_i^{[k]} = \bar{\mathbf{r}}_i^{[k]} \text{---- (18)}, \quad \bar{\mathbf{w}}_{i,k} \equiv \bar{\mathbf{q}}_i^{[k]} / \|\bar{\mathbf{q}}_i^{[k]}\| \text{---- (19)}$$

5. 数値計算とまとめ

提案法の有効性を検証するため, 図1に示す正方形板 (□:1m, 板厚:0.01m) の4隅が固定された平面応力問題を取り上げ, 有限要素法で離散化して得られる剛性行列の低次の固有値・固有ベクトルを求める問題について数値実験を行った. 図2に正方形要素 $84 \times 84 = 7056$ 個, 自由度数 $n = 14,442$ で離散化したモデルの固有値分布を示す. 1次と2次および6次と7次の固有値が重複している問題である. 提案法における係数行列のブロック分割は図1に示す領域分割 $\Omega_1, \Omega_2, \dots, \Omega_{16}$ に合わせて行った. 分割数は $m = 16$ となる. (18)式の解法には ICCG 法を用い, 収束判定値は相対残差ノルムに対して 0.1 とした. (13)式の解法には変形コレスキー法を用い, (6)式の解法にはサブスペース法を用いた. 固有ベクトルの収束判定値は残差ベクトルの相対残差ノルムに対して 10^{-7} とした. 計算には CPU: Intel Pentium Xeon (550MHz) と RAM: 512MB を実装した WS を用い, 計算精度は倍精度とした.

図3は低次の5個の固有値・固有ベクトルを求めたときの計算時間を, 問題のサイズつまり自由度数を変えて, Lanczos 法と比較したものである. 提案法では, 部分空間 $\mathbf{V}^{(s)}$ の基底数に対して $\ell = 10$, 部分空間 $\mathbf{W}$ の基底数に対して $k_q = 10$ とした. なお, ここで用いた Lanczos 法は Lanczos ベクトルに対するグラムシュミットの直交化と原点移動なしのスペクトル変換を伴うもので, 主要な計算となる連立方程式の解法には ICCG 法を用い, ICCG 法の収束判定値は相対残差ノルムに対して 10^{-8} とした. 固有ベクトルの収束判定値は提案法と同じ 10^{-7} である.

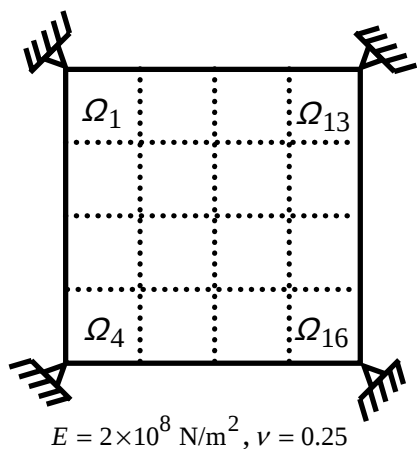


図1 正方形板の平面応力問題

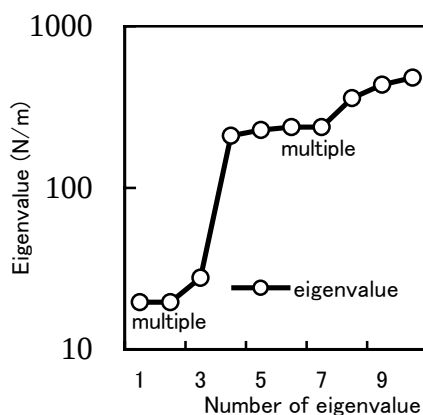


図2 固有値分布

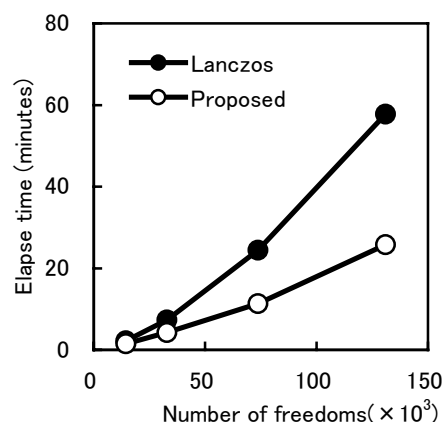


図3 計算時間の比較

参考文献 1) 片山, 平井, 柏木, 区分的に値を持つ基底ベクトルを用いた逆べき乗法の改良法, 土木学会, 第55回年次学術講演会講演概要集, -A49, 2000年9月.