

「逆反復法による固有値フィルタの構成と部分空間法」

村上 弘 (首都大学東京 数理情報科学専攻)

日本応用数理学会

研究部会 「行列・固有値問題の解法とその応用」
第2回研究会

2006年11月16日(木) (13:00~13:30)

於 国立情報学研究所 (NII)

問題: 対称定値の一般固有値問題:

$$Av = \lambda Bv$$

すべての固有値は実数。

区間 $I = [\alpha, \beta]$ に固有値がある固有対を (全て) 求める。

固有対を (λ_v, v_v) 、

固有ベクトルは B -正規直交 $v_v^T B v_\eta = \delta_{v,\eta}$ とする。

解法の方針: 部分空間法を使用。

=====
固有値に基づくフィルタ作用素の構成
=====

対称定値な一般固有値問題のレゾルベント表示

A, B が対称。 B は正定値。

固有対: (λ_ν, v_ν) 。固有ベクトルは B -正規直交とすると、

レゾルベント表示: $(A - \rho B)^{-1} = \sum_\nu \frac{v_\nu v_\nu^T}{\lambda_\nu - \rho}$ が成立。

固有値が区間内にある固有ベクトル成分の濃縮

任意の数 ρ_i, ρ_j に対し、 $(A - \rho_i B)^{-1} B$ と $(A - \rho_j B)^{-1} B$ の積は

$$\begin{aligned} & (A - \rho_i B)^{-1} B \cdot (A - \rho_j B)^{-1} B \\ &= \sum_{\mu} \frac{v_{\mu} v_{\mu}^T}{\lambda_{\mu} - \rho_i} B \cdot \sum_{\nu} \frac{v_{\nu} v_{\nu}^T}{\lambda_{\nu} - \rho_j} B \\ &= \sum_{\mu} \frac{v_{\mu} v_{\mu}^T}{(\lambda_{\mu} - \rho_i)(\lambda_{\mu} - \rho_j)} B \end{aligned}$$

$(A - \rho_i B)^{-1} B$ と $(A - \rho_j B)^{-1} B$ は可換。

k 個の $(A - \rho_i B)^{-1} B, i = 1, \dots, k$ の積についても同様。

k 個の積に係数 c_k^{-1} を乗じて \mathcal{F} を定義。

$$\begin{aligned} \mathcal{F} &\equiv c_k^{-1} \prod_{i=1}^k \{ (A - \rho_i B)^{-1} B \} \\ &= \frac{1}{c_k} \sum_D \frac{v_D v_D^T}{\prod_{i=1}^k (\lambda_D - \rho_i)} B \\ &= \sum_D \frac{v_D v_D^T}{\varphi_k(\lambda_D)} B \end{aligned}$$

と書ける。但し、 $\varphi_k(\lambda) \equiv c_k \prod_{i=1}^k (\lambda - \rho_i)$ 。

代数恒等式の利用

多項式 $\varphi_k(z) = c_k \prod_{i=1}^k (z - \rho_i)$ の零点 $\{\rho_j\}$ に重複がないとき、

代数恒等式 $\frac{1}{\varphi_k(z)} = \sum_{i=1}^k \frac{\gamma_i}{z - \rho_i}$, 但し $\gamma_i = \frac{1}{\varphi'_k(\rho_i)}$ を利用すれば、

$$\begin{aligned} c_k^{-1} \prod_{i=1}^k \{ (A - \rho_i B)^{-1} B \} &= \sum_D \frac{v_\nu v_\nu^T}{\varphi_k(\lambda_\nu)} B = \sum_D \sum_{i=1}^k \frac{\gamma_i}{\lambda_\nu - \rho_i} v_\nu v_\nu^T B \\ &= \sum_{i=1}^k \gamma_i \sum_D \frac{v_\nu v_\nu^T}{\lambda_\nu - \rho_i} B = \sum_{i=1}^k \gamma_i \{ (A - \rho_i B)^{-1} B \} . \end{aligned}$$

いま、 $(A - \rho_i B)^{-1} B$ を M_i と書くと、

$$\begin{aligned}\mathcal{F} &= c_k^{-1} M_k \cdot M_{k-1} \cdots M_2 \cdot M_1 \\ &= \gamma_1 M_1 + \gamma_2 M_2 + \cdots + \gamma_{k-1} M_{k-1} + \gamma_k M_k.\end{aligned}$$

よって、 $\mathcal{F} = c_k^{-1} M_k \cdot M_{k-1} \cdots M_2 \cdot M_1$ の x への作用は:

$$\mathcal{F} x = \gamma_1 M_1 x + \gamma_2 M_2 x + \cdots + \gamma_{k-1} M_{k-1} x + \gamma_k M_k x.$$

係数 $\{\gamma_i\}$ は、 c_k と零点分布 $\{\rho_j\}$ で決まる定数。

x に異なる因子 $(A - \rho_i B)^{-1} B$ を k 回作用させたものは、
 x に異なる因子を1回作用させた k 個の結果の重み γ_i での合計。

つまり k 回の逐次的処理が k 個の並列的処理に置き換え可能。

ℱのマイルタ特性

いま任意のベクトル x に \mathcal{F} を作用させてベクトル y を作る:

$$y = \mathcal{F} x = \left[c_k^{-1} \prod_{i=1}^k \left\{ (A - \rho_i B)^{-1} B \right\} \right] x = \sum_D v_\nu \frac{v_\nu^T B x}{\varphi_k(\lambda_\nu)} .$$

固有ベクトル $\{v_\nu\}$ による x, y のモード展開を:

$$x = \sum_D \alpha_\nu v_\nu, \quad y = \sum_D \beta_\nu v_\nu .$$

モード ν の係数の間の関係は:

$$\beta_\nu = \frac{1}{\varphi_k(\lambda_\nu)} \alpha_\nu .$$

ℱによるモード ν の「増幅率」:

$$G(\lambda_\nu) = \frac{1}{\varphi_k(\lambda_\nu)} .$$

いま $\max_{\rho \in I} |\varphi_k(\rho)| = M$ とすると、

- $\lambda_\nu \in I$ のとき、 $|G(\lambda_\nu)| \geq \frac{1}{M}$.

- $\lambda_\nu \notin I$ のとき ($|t_\nu| > 1$)、 $G(\lambda_\nu) = O(|t_\nu|^{-k})$, when $|t_\nu| \gg 1$.

但し、 t_ν は区間 I に対する λ_ν の相対座標 $t_\nu = \frac{\lambda_\nu - \frac{\alpha+\beta}{2}}{\frac{\beta-\alpha}{2}}$ で、

区間 I の中心では 0、左端で -1、右端で 1 の値をとる。

区間から離れた固有値を持つ成分は、距離の逆 k 乗で強く減衰。

例: Chebyshev 多項式:

区間 I への相対座標を $t = \frac{\lambda - \frac{\alpha+\beta}{2}}{\frac{\beta-\alpha}{2}}$ と置き、

$\varphi_k(\lambda) = T_k(t)$ (k -次の Chebyshev 多項式) にとる。

$|t| \leq 1$ のときは $|T_k(t)| \leq 1$ で、 $|t| \gg 1$ のときは $|T_k(t)| \approx 2^{k-1}|t|^k$.

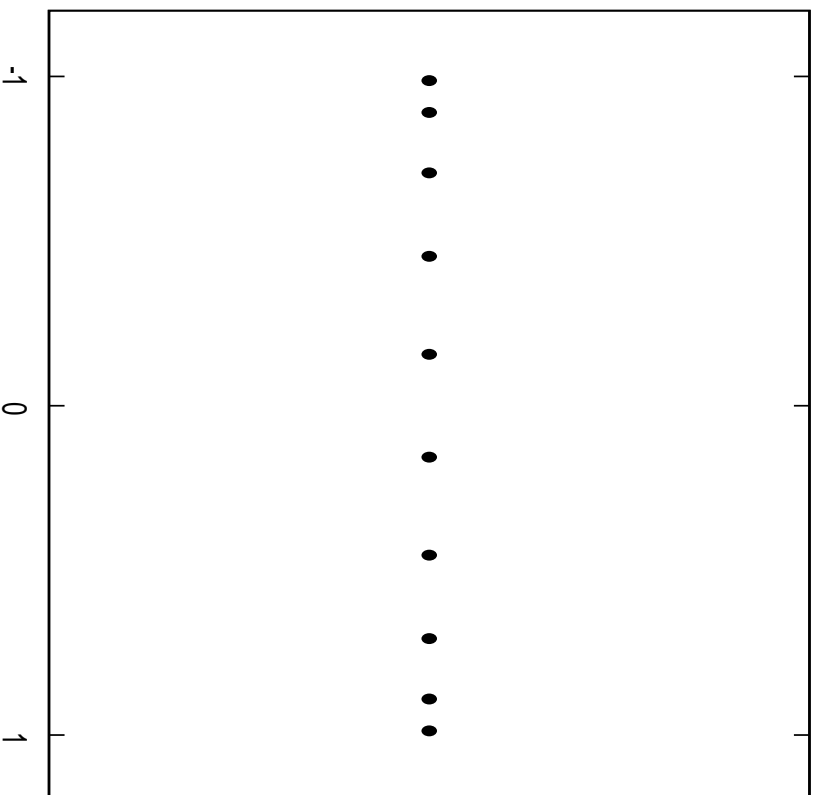
$$\begin{cases} \lambda_\nu \in I \text{ のとき、} |G(\lambda_\nu)| \geq 1. \\ \lambda_\nu \notin I \text{ のとき、} |G(\lambda_\nu)| \approx 2^{-(k-1)} |t_\nu|^{-k}, \text{ when } |t_\nu| \gg 1. \end{cases}$$

$T_k(t)$ の零点は全て区間 $[-1, 1]$ 内で、

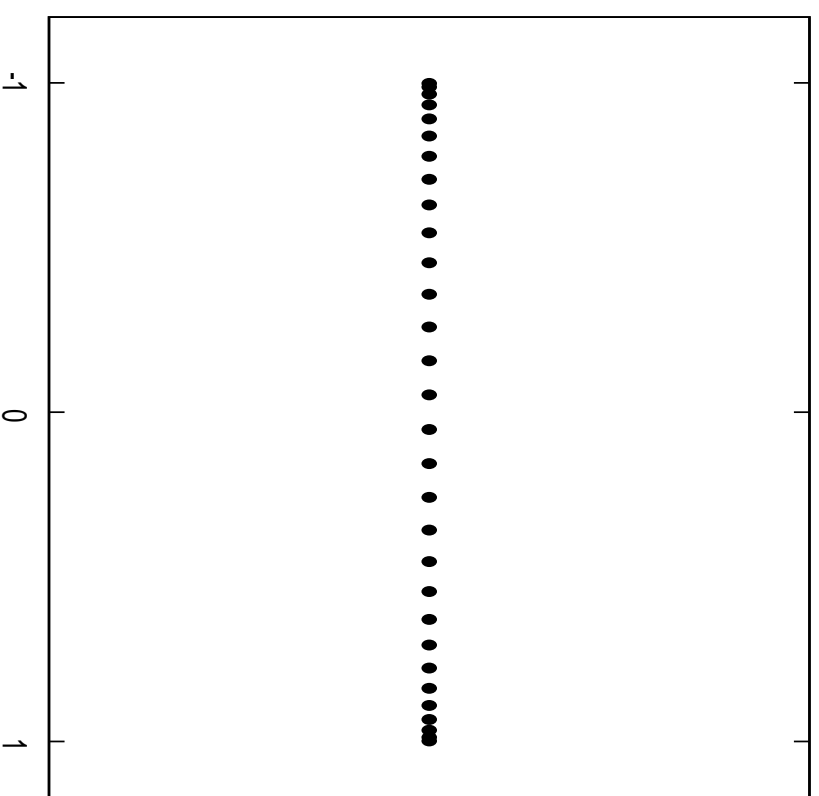
$$t_\ell = \cos\left(\left(\ell + \frac{1}{2}\right)\frac{\pi}{k}\right), \quad \ell = 0, \dots, k-1.$$

増幅率 $G(t) = 1/T_k(t)$ はその位置に極を持つ。

Chebyshev 多項式の零点分布の例

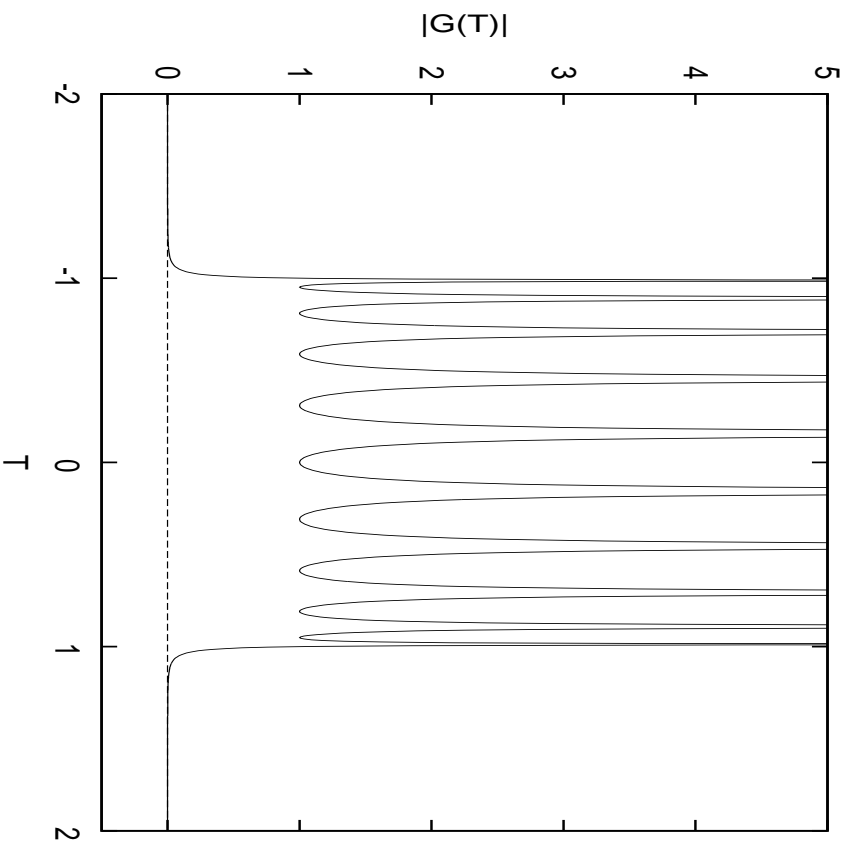


10次

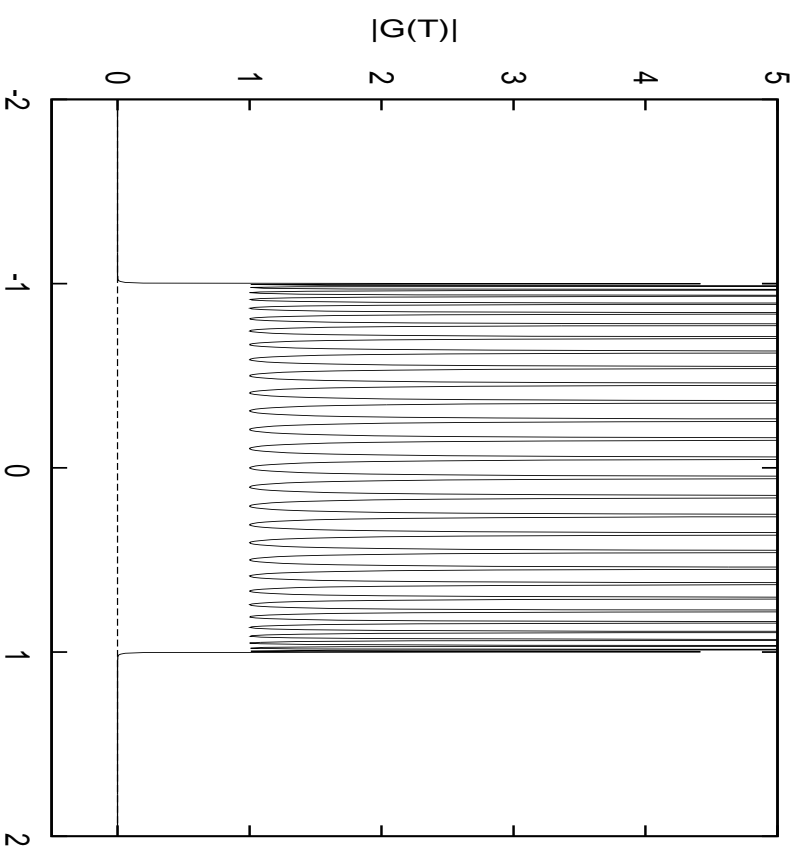


30次

フィルタ特性の絶対値 $|G(t)|$ (真数プロット)



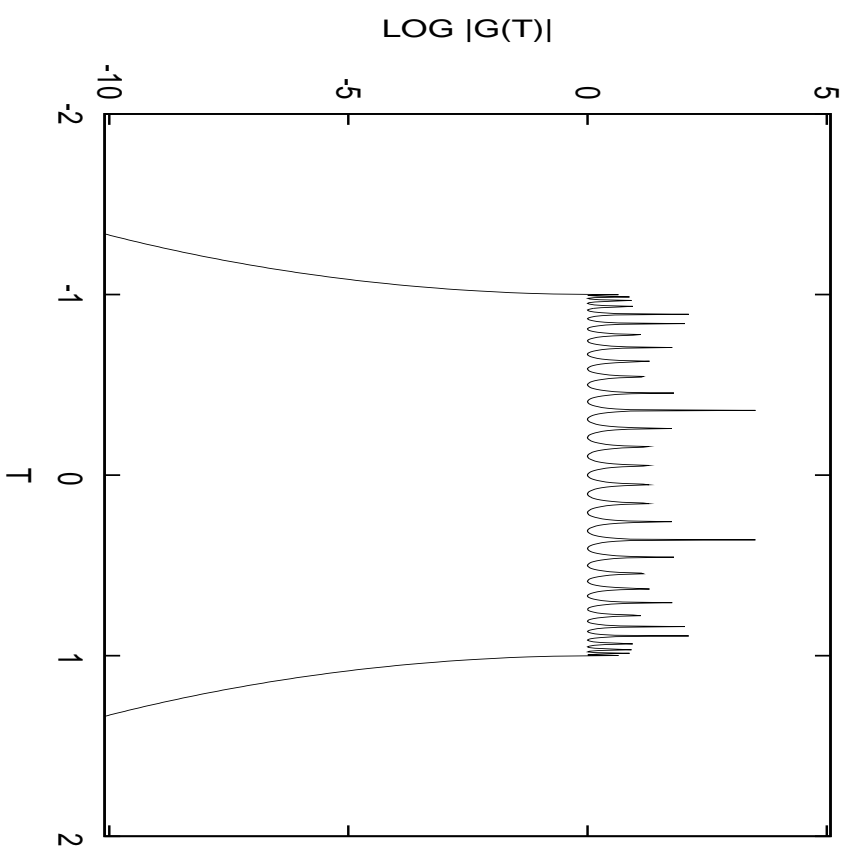
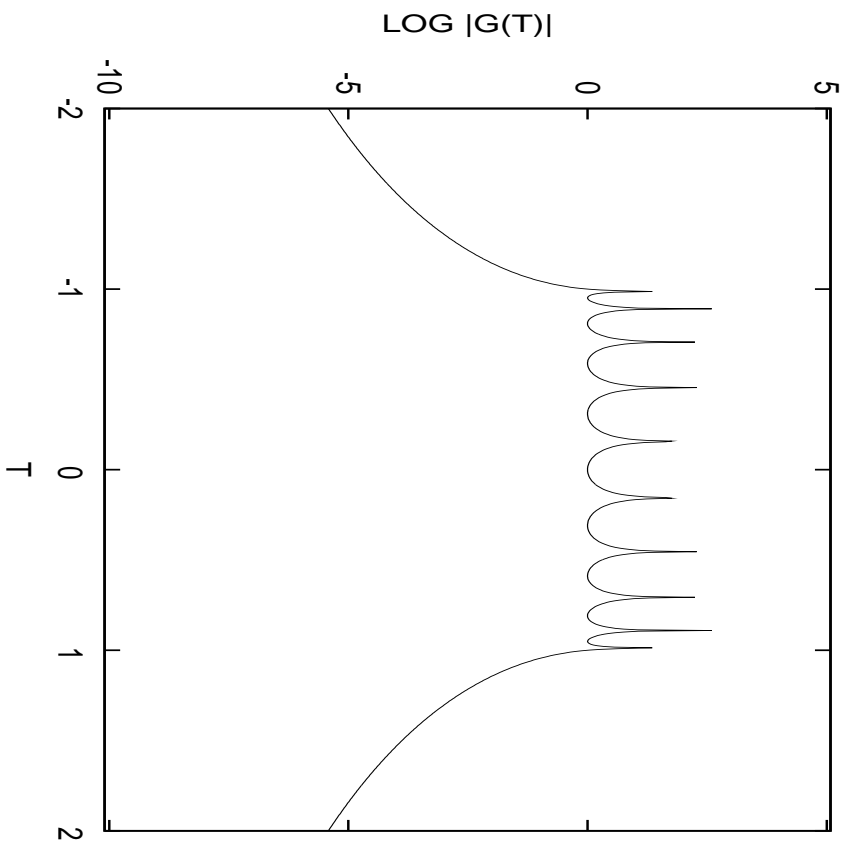
10次



30次

区間内部で1以上。高次ほど区間端での立上りが急。

フィルタ特性の絶対値 $|G(t)|$ (対数プロット)



高次ほど区間外での減衰が大きい。

実軸上に零点を持つ多項式の問題点 (共鳴)

多項式の零点に固有値と一致や極めて近接するものがあると、ベクトル $y = \mathcal{F}x$ はその特定固有ベクトル成分が大きくなり、ほかの固有ベクトル成分の割合は「相対的に」非常に小さくなる。

ベクトル y の共鳴でない固有ベクトル成分は、共鳴する固有ベクトル成分の大きな数値により覆われ、有限精度計算では丸め誤差の影響で情報が失われる。精度が低下。そのため、「部分空間」の近似が悪くなる。

この問題を回避する方策として、二つの方法を考案した。今回の発表では、そのうちの1つを実験した。以下説明する。

共鳴の困難の回避法

増幅率の絶対値 $|\varphi_k(\lambda)|^{-1}$ の区間内での
最大最小の比(一種の条件数)が大きくなるようにする。

全零点が複素数の多項式を選び、固有値との共鳴を避ける。
複素数 ρ_i により、係数 $(A - \rho_i B)$ の連立一次方程式は、
複素係数になる。

(複素共役対称性は利用可能)

全零点が複素数の多項式の例

次数 k を偶数、 $\gamma > 0$ で、値をずらした Chebyshev 多項式:

$$\varphi_k(t) = \frac{1}{2\gamma} (T_k(t) + 1 + 2\gamma).$$

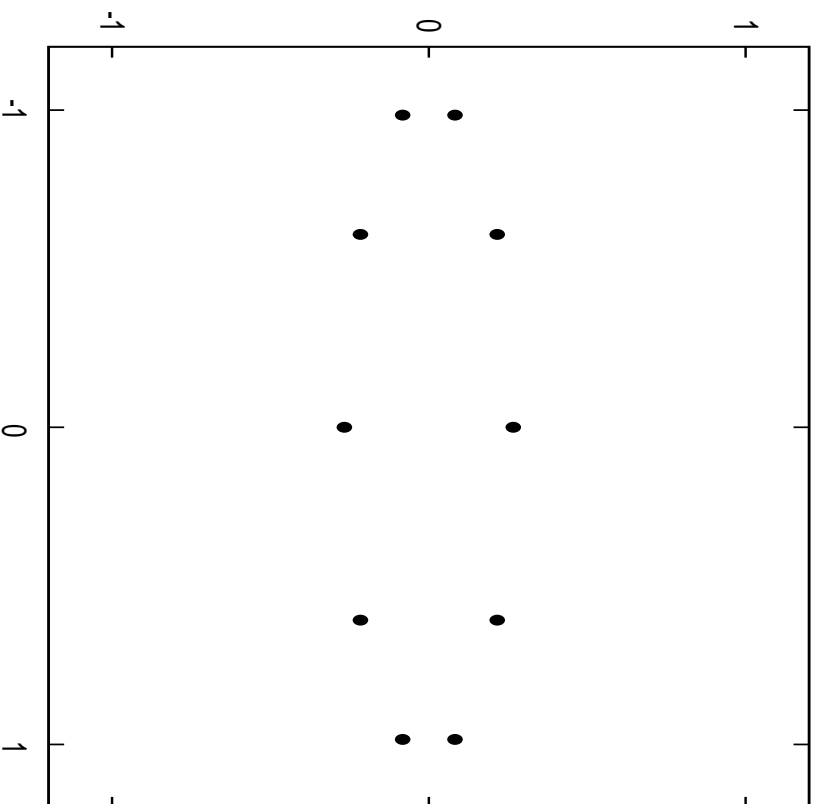
● 区間 $[-1, 1]$ 内の $\varphi_k(t)$ の値の最大最小の比は $1 + \gamma^{-1}$.
 γ が大きいほど区間内のフイルタ特性が平らに。

● 零点は区間の両端を焦点とする複素平面上の楕円
 $\left(\frac{x}{\cosh \eta}\right)^2 + \left(\frac{y}{\sinh \eta}\right)^2 = 1$ の周上。

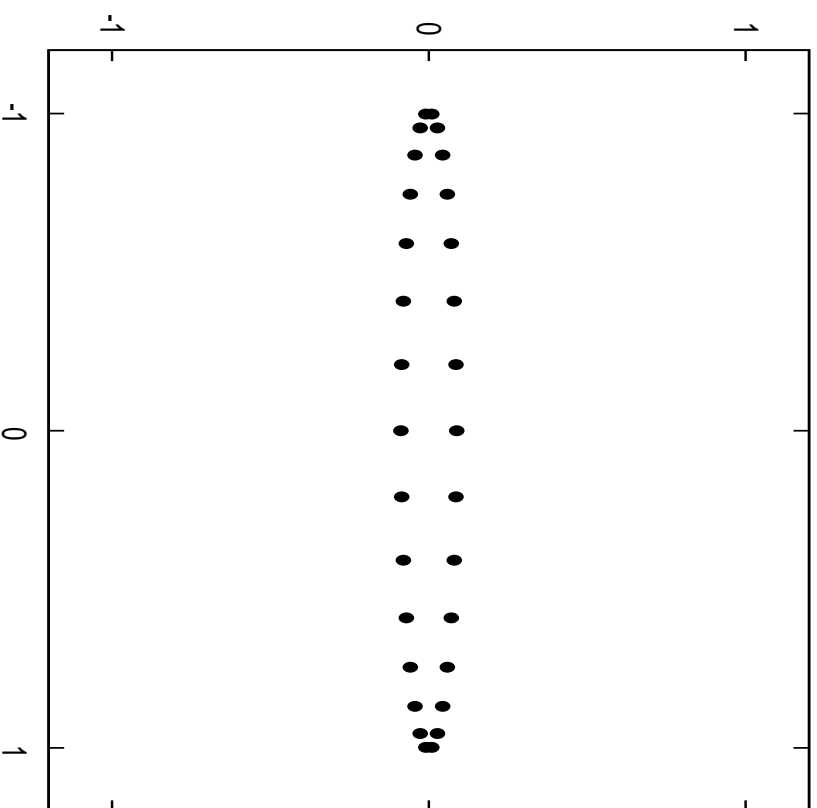
$q \equiv 1 + 2\gamma > 1$, $\theta_\ell \equiv \frac{(2\ell + 1)}{k} \pi$, $\eta \equiv \frac{1}{k} \cosh^{-1} q$ を用いて、
零点 $t_\ell = x_\ell + iy_\ell$, $\ell = 0, \dots, k-1$ は、

$$\begin{cases} x_\ell = \cos \theta_\ell \cdot \cosh \eta, \\ y_\ell = \sin \theta_\ell \cdot \sinh \eta. \end{cases}$$

値をずらした Chebyshev 多項式の零点分布の例

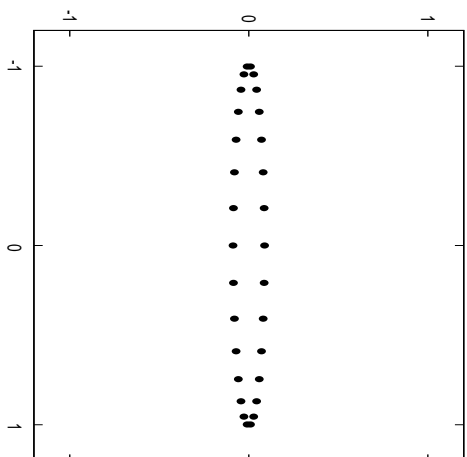


10次 ($\gamma = 3$)

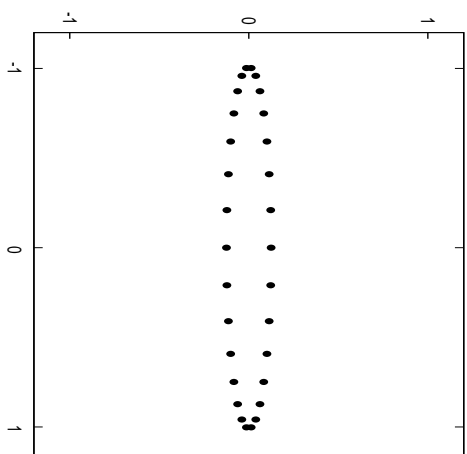


30次 ($\gamma = 3$)

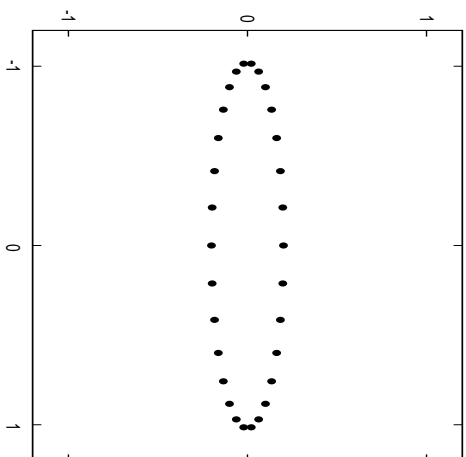
零点分布と γ (30次)



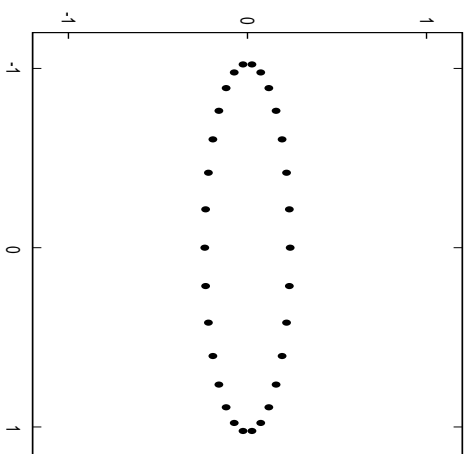
$\gamma = 3$



$\gamma = 10$

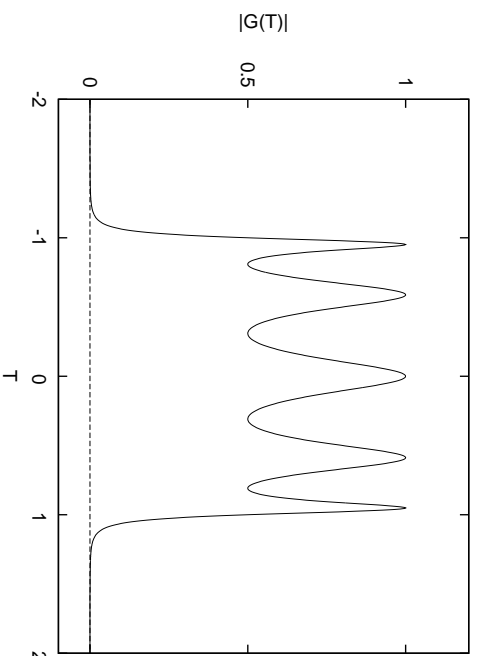


$\gamma = 100$

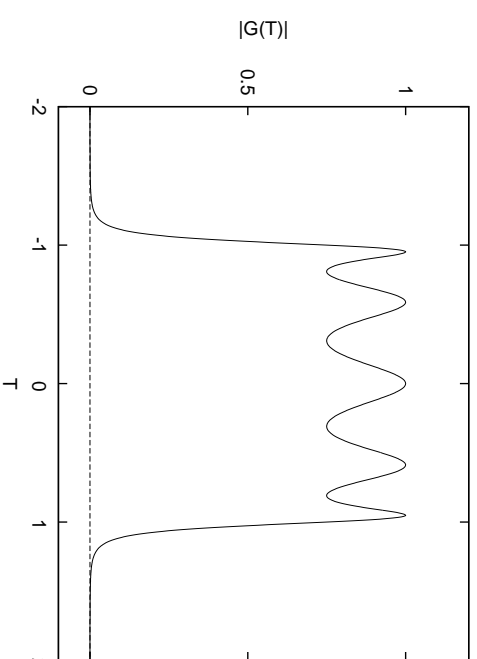


$\gamma = 300$

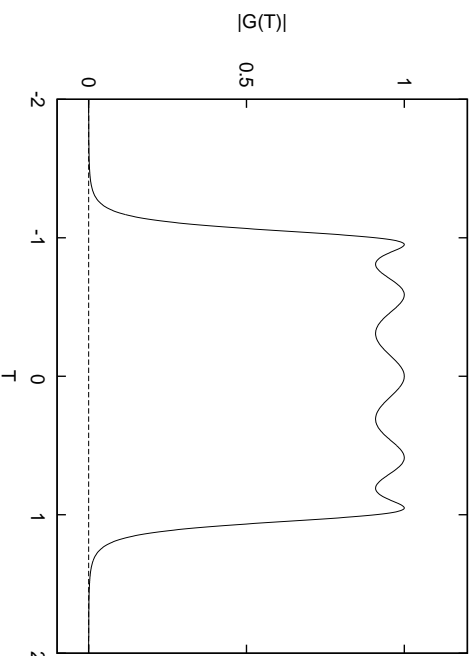
フィルタ特性 $G(t)$ の γ 依存性 (10次)



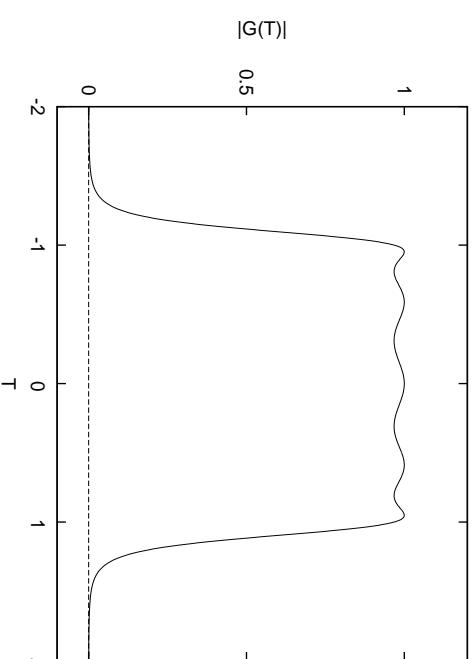
$\gamma = 1$



$\gamma = 3$



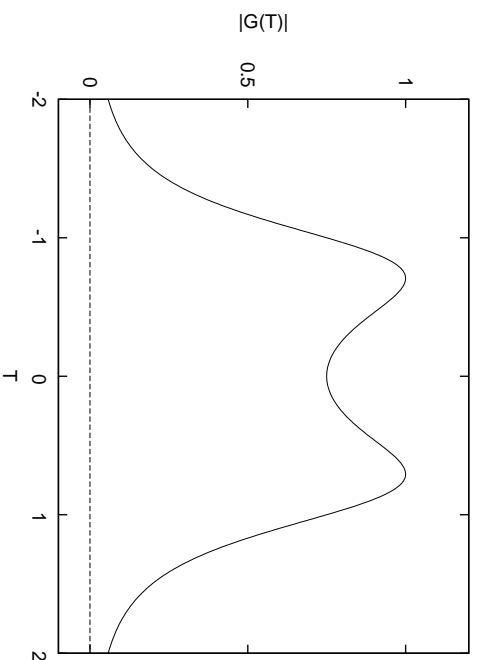
$\gamma = 10$



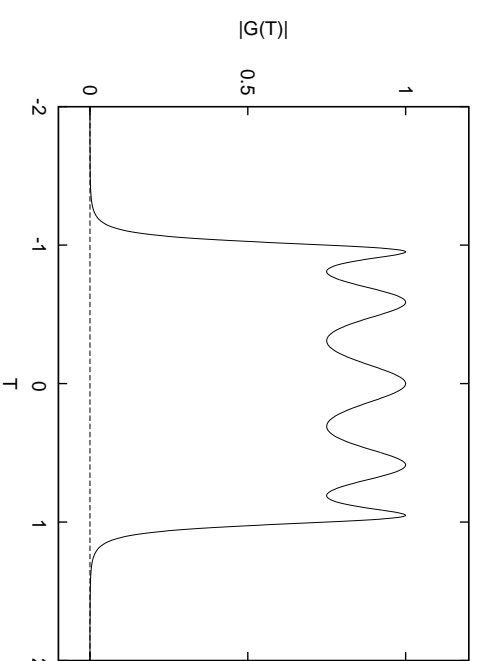
$\gamma = 30$

頂上の変動は γ に²⁰反比例して減少。

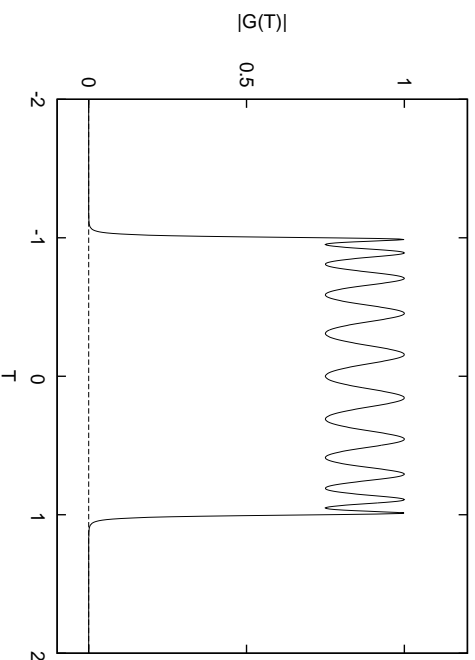
フィルタ特性 $G(t)$ の次数依存性 ($\gamma = 3$)



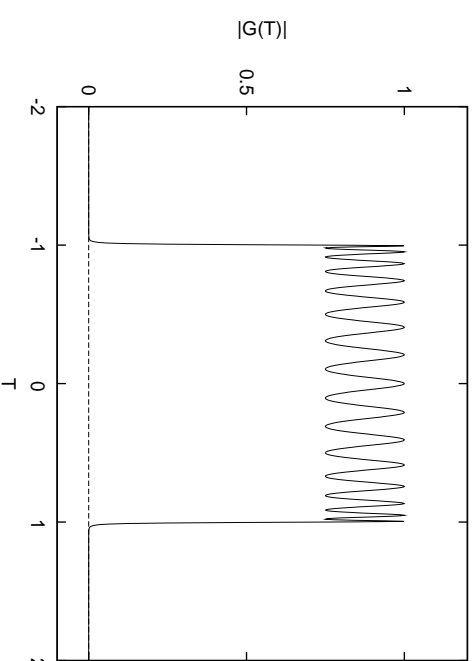
4次



10次



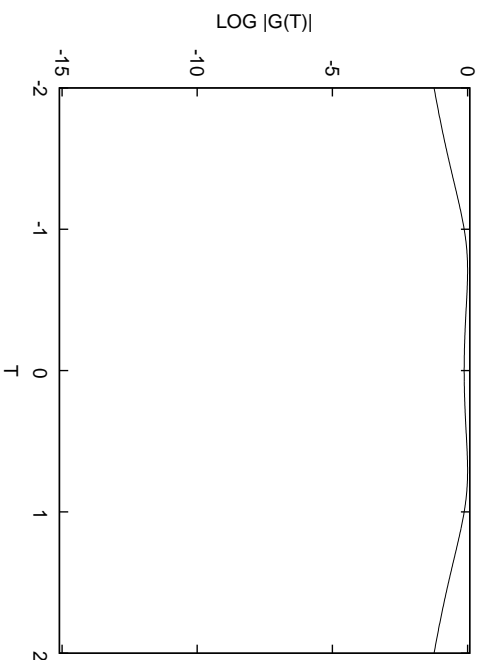
20次



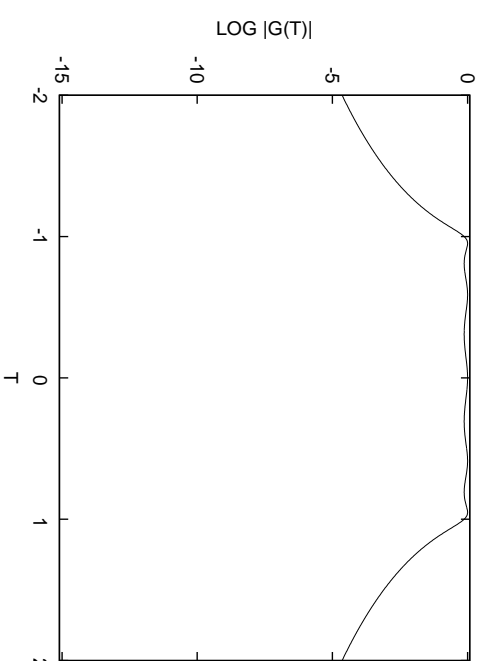
30次

次数が大きい程、立上りが急峻。区間外で急減少。

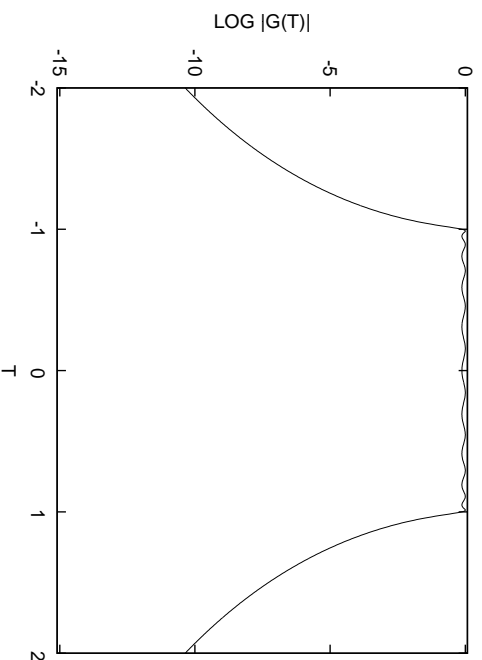
フィルタ特性 $G(t)$ の次数依存性 ($\gamma = 3$) 対数プロット



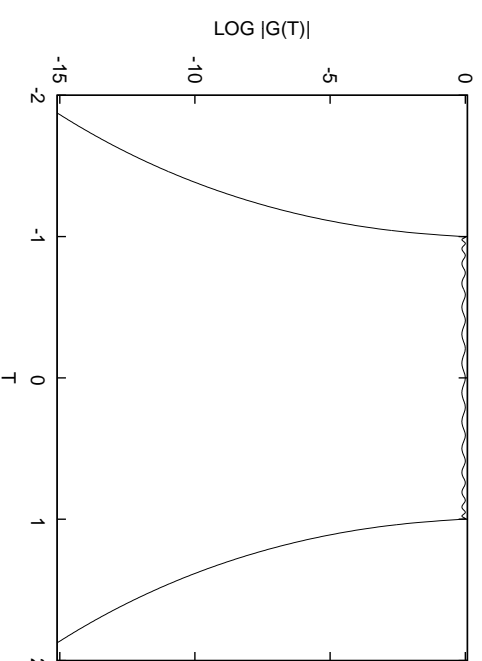
4次



10次



20次



30次

次数が大きい程、立上りが急峻。区間外で急減少。

=====
=====
**フィルタによる部分空間作成と
部分空間に制限された固有値問題**
=====

「部分空間」の作成

- 1) 区間 I とフィルタ \mathcal{F} の特性 (次数、零点分布) を決める。
- 2) I 内の固有モードの個数より大きい数 m を決める。
 m 個のベクトル $x_{(1)}, \dots, x_{(m)}$ を適当に選ぶ。
(さらに B -直交化を施すと、なお良い。)
- 3) $x_{(k)}$ に線型作用素 \mathcal{F} を作用させて得た $\mathcal{F}x_{(k)}, k = 1, \dots, m$ を (長さ 1 に) B -正規化し、 m 個のベクトル $y_{(1)}, \dots, y_{(m)}$ を作る。
- 4) $y_{(j)}, j = 1, \dots, m$ の (計量 B の) 特異値分解により、
閾値以下の小さい特異値に対応する直交ベクトルを除外し、
 m' 個の B -正規直交なベクトル $w_{(j)}, j = 1, \dots, m'$ を作る。

B-計量の特異値分解による、B-正規直交基底 W の作成

- 1) $y_{(j)}$, $j = 1, \dots, m$ を第 j 列とする行列を Y .
- 2) m 次の対称行列 $S = Y^T B Y$ を作る。
- 3) 直交行列 U による S の対角化を $S = U D U^T$.
- 4) $Z = Y U$ の列ベクトルは互いに B -直交 ($(Y U)^T B (Y U) = D$).
(Z を Y と置き直し、上の処理を更に 1, 2 回反復。)
- 5) D の対角要素 d_j が値の降順になるよう、 U の列を並べ替え。
- 6) 閾値以下の d_j に対応する Z の列は省いて、第 m' -列まで残す。
- 7) $w_{(j)} = \sqrt{1/d_j} z_{(j)}$, $j=1, \dots, m'$ により B -正規直交基底を得る。

W により張られた部分空間に制限した固有値問題の解

- 1) $w^{(j)}, j = 1, \dots, m'$ を j 列とする行列を W .
- 2) 行列 A を W に射影した行列を $H = W^T A W$.
- 3) 直交行列 P による H の対角化を $H = P \Lambda P^T$.
- 4) $V = WP$ と置くと、 $V^T A V = \Lambda, V^T B V = E$ (単位行列).
- 5) Λ の第 k 対角要素 λ_k と V の第 k 列ベクトル $v^{(k)}$ の対 $(\lambda_k, v^{(k)})$ は、 $w^{(j)}, j = 1, \dots, m'$ の張る部分空間内での固有対である。
- 6) λ_k が I の近傍にある対 $(\lambda_k, v^{(k)})$ を選び、元の固有値問題 $A v = \lambda B v$ の近似固有対とする。

フィルタ操作と部分空間法の組合せの反復法

(注: この反復法はまだ実験していない。)

1) ランダムベクトルにフィルタを適用し、部分空間の基底を作成、部分空間内で固有値問題を解き、固有解の近似を構成。

(※フィルタ特性の不完全さや規格直交化の際の誤差拡大で、区間外の固有値の成分が近似固有ベクトル解に混入する。)

2) 得られた近似固有ベクトル解にフィルタを適用し、区間外の成分を減衰させ、再び部分空間の基底を作り、部分空間内の固有値問題を解き、固有解の近似を構成。

3) 以上を繰り返す。

(フィルタの構成にLU分解を用いる場合、分解の再利用が可能。)

数值实验例

- テスト例題: 対称”帯”行列の固有値問題
次元: N 、
帯幅: W (行列要素は、帯の外 $|i - j| > W$ では0。)
行列 A : 帯内で $a_{i,j} = \max(i, j) - 1$,
行列 B : 帯内で $b_{i,j} = \frac{1}{i+j-1} + \delta_{i,j}$.
- フィルタのパラメタ: 帯域 $I = [\alpha, \beta]$, 次数DEG, $\gamma = 1$ とした。
- 部分空間:
乱数ベクトル X の個数: NV 、
フィルタを X に適用して得た Y の階数: RK
- 固有解:
 I 内の個数: NS

- 残差の大きさ DELTA:
近似固有対 (λ, v) , (但し $v^T B v = 1$) に対し、
残差 $r = A v - \lambda B v$ を求めて、
残差の大きさ $\Delta = \sqrt{r^T B^{-1} r}$ を作る。
(Δ は λ に最も近い「真の固有値」と λ との距離の上限。)

数値実験は、倍精度 (IEEE-754, 64bit) で行なった。
簡単に書いたコードはFortran90でトータル1600行程度。
メモリアクセスパターンの最適化などは行っていない。

実験のグラフの説明

例題の固有値分布は良く分離しているので、「フィルタ部分空間法」の結果に対し、通常の逆反復を適用して固有対を改良した。(固有値の精度は最初から比較的高い)

グラフ中、

ITER0: 今回のフィルタによる部分空間法で得た固有対。

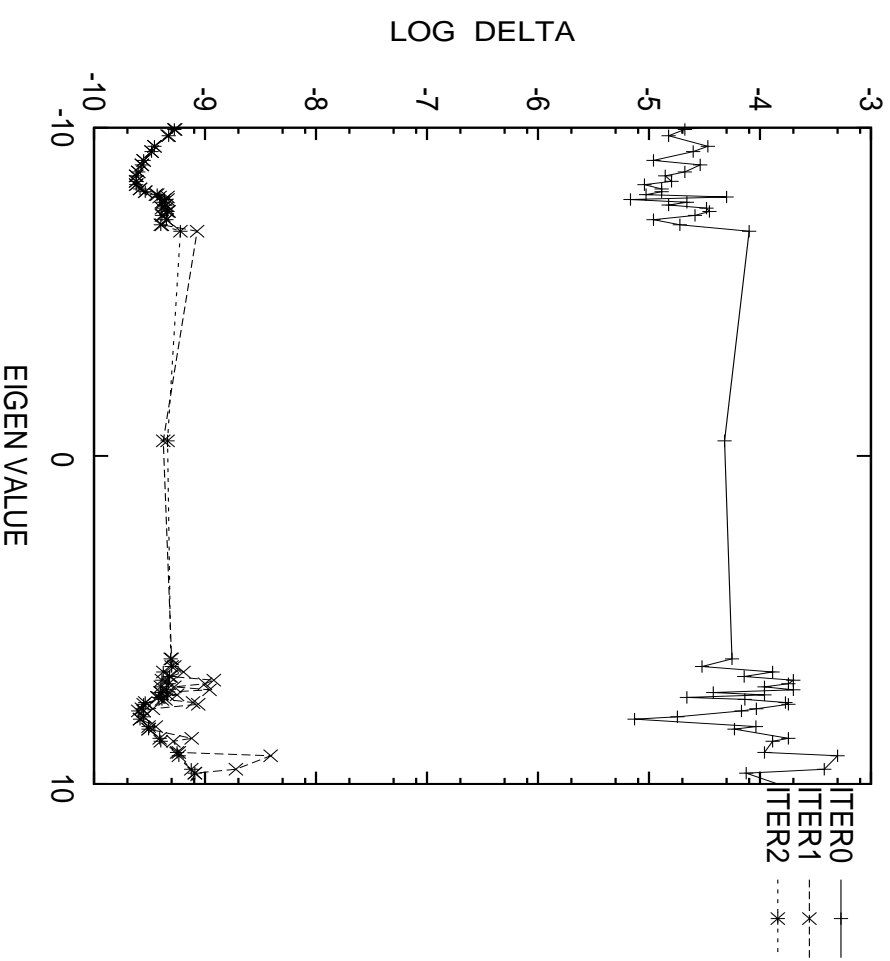
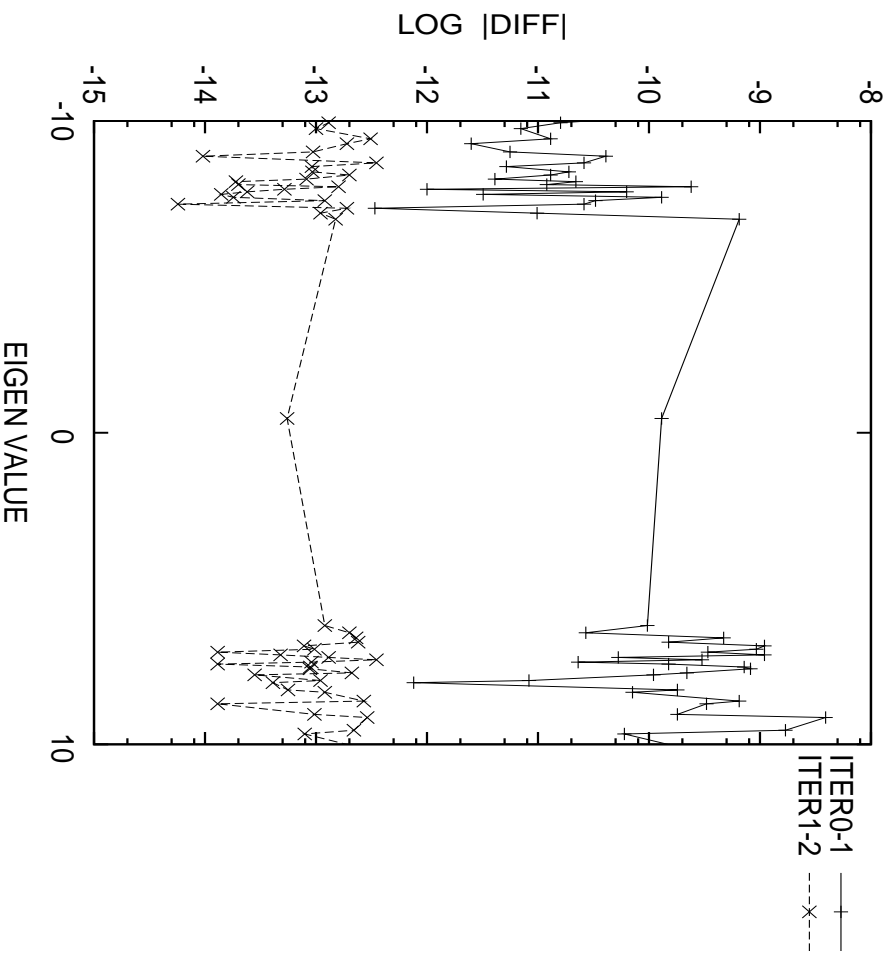
ITER1: ITER0の固有対に通常の逆反復を1回適用。

ITER2: ITER0の固有対に通常の逆反復を2回適用。

主な実験例のグラフは、得られた固有解のうち、固有値が区間 $I = [\alpha, \beta]$ の内部のものだけをプロット。

1,000,000(百万)次元, 帯幅50, 区間[-10,10] (固有解は50個);

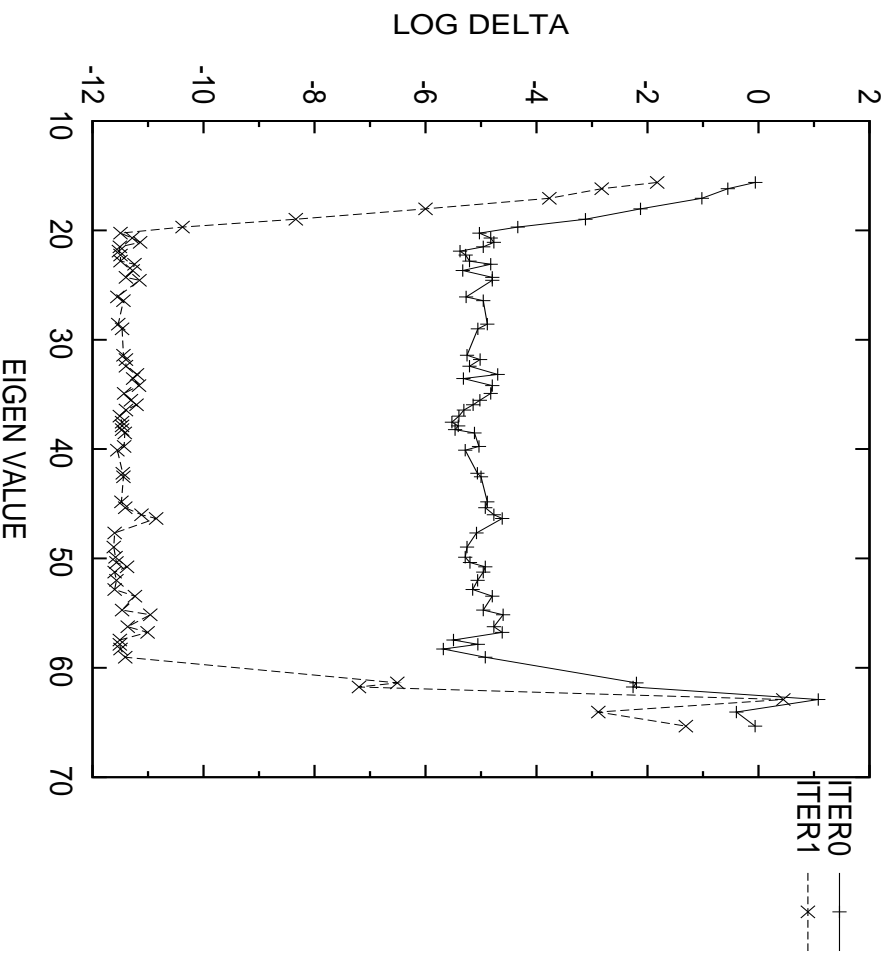
DEG=16, NV=100 (RK=65)



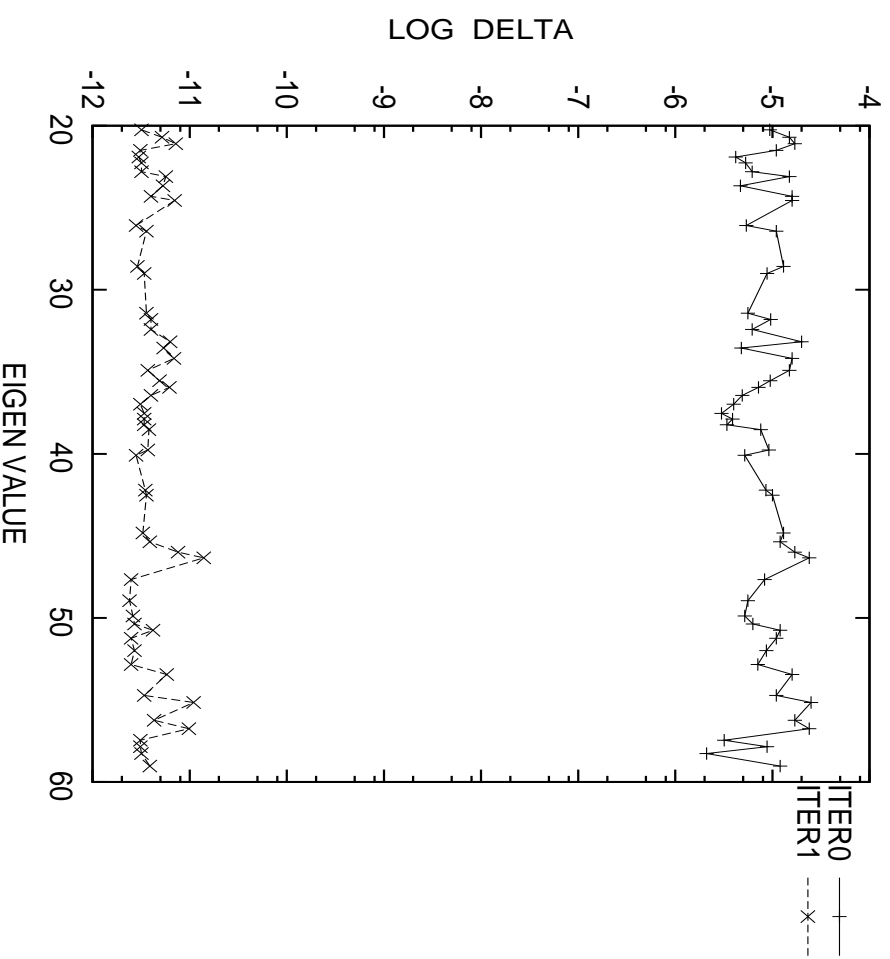
逆反復による固有値変動(≈誤差) DELTAの値
フィルタ部分空間法による「固有値」の精度はかなり良い。

10,000(一万)次元, 帯幅30, 区間 [20,60] (固有解は55個);

DEG=20, NV=100, RK=66



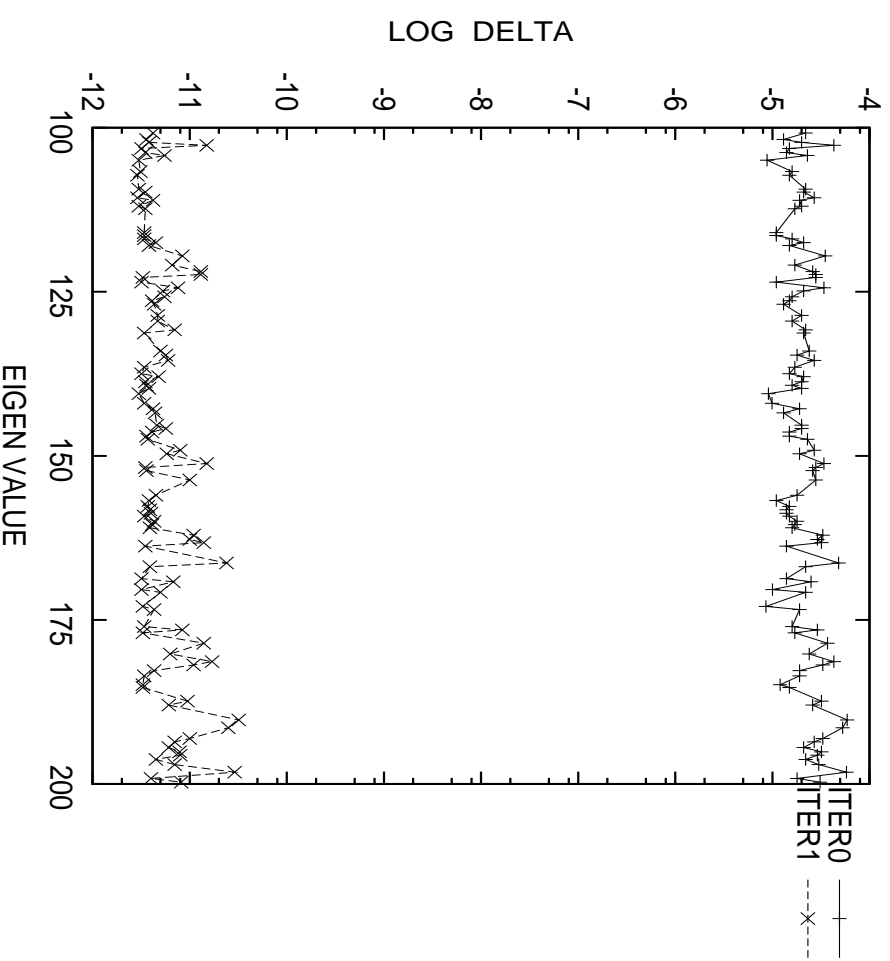
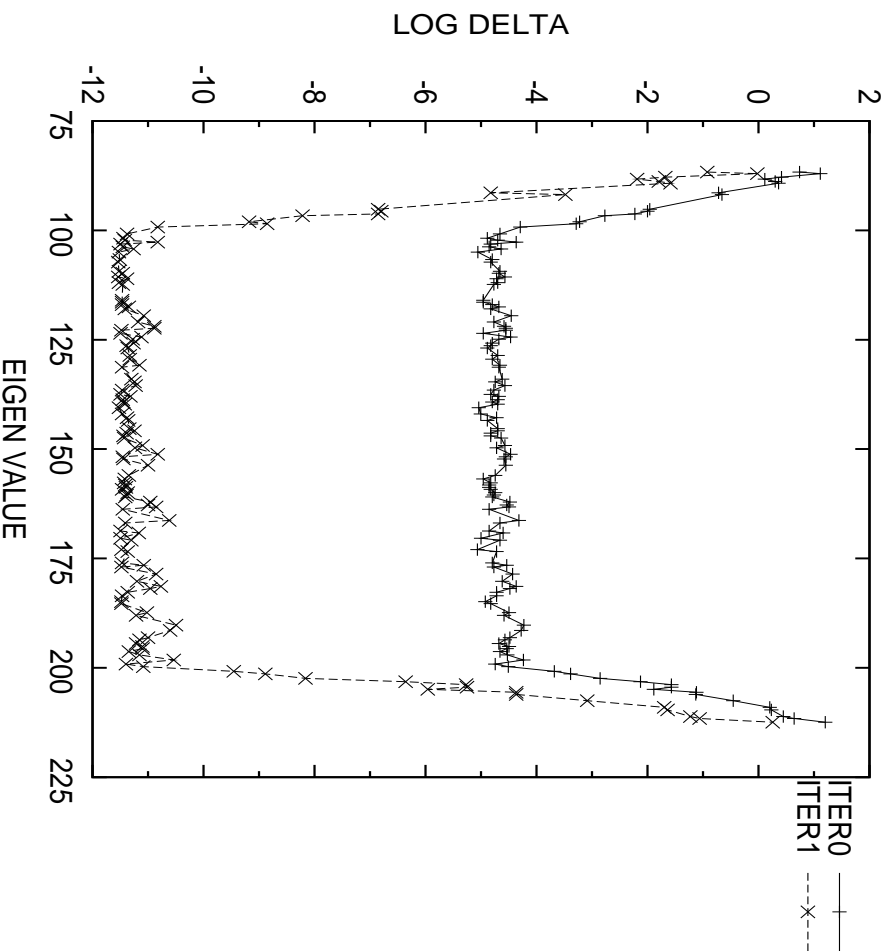
固有値が区間外の解も表示



区間内の解のみ表示

10,000(一万)次元, 帯幅30, 区間[100,200] (固有解は106個);

DEG=20, NV=200, RK=136



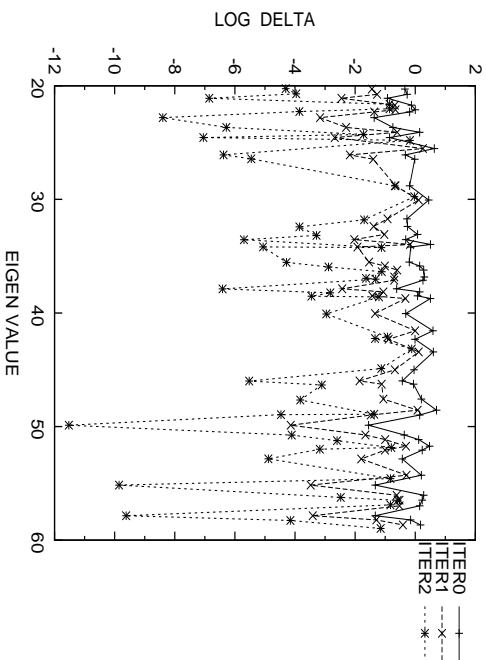
固有値が区間外の解も表示

34

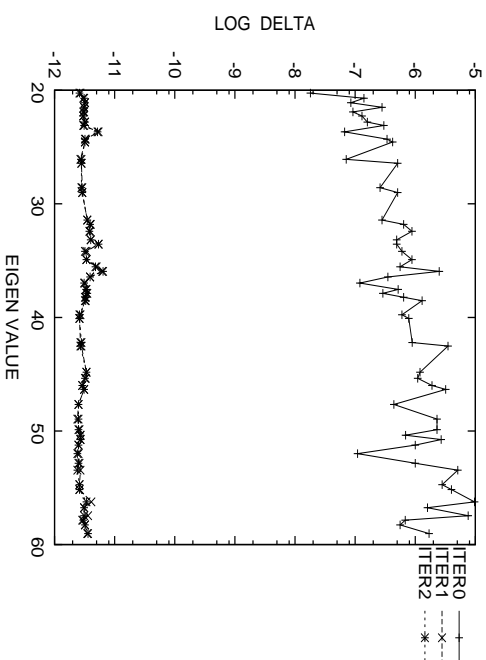
区間内の解のみ表示

部分空間の自由度と解の振舞いの例

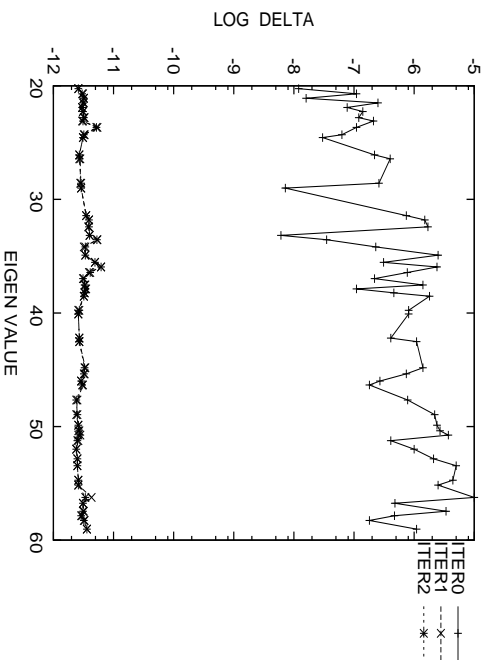
10,000(一万)次元, 帯幅30, 区間[20,60] (固有解は55個); DEG=100



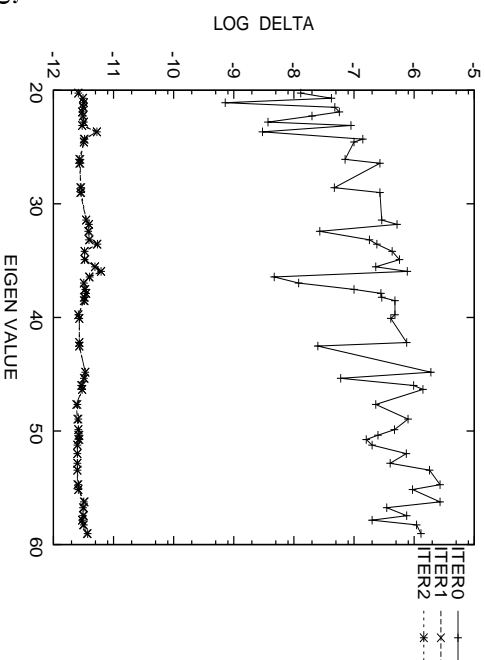
NV=54(RK=54) 自由度不足



NV=55(RK=55) 自由度一致

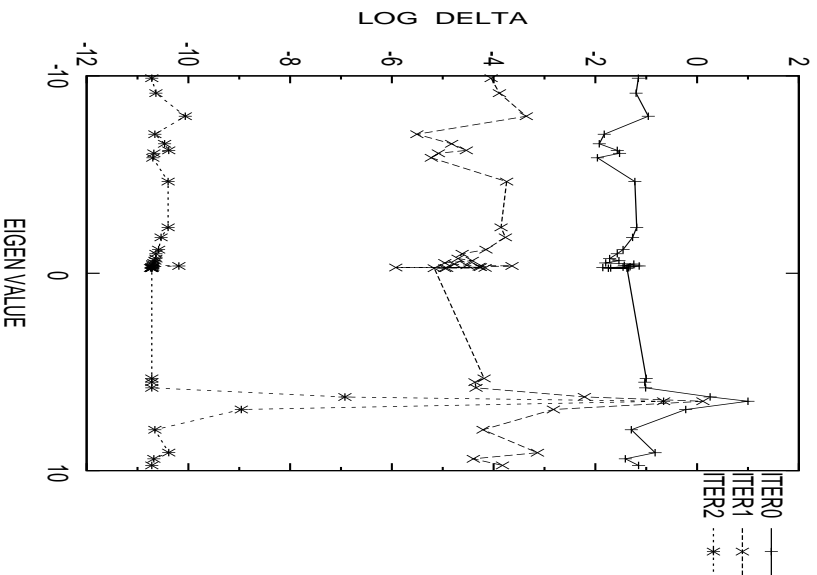


NV=60(RK=55) 自由度過剩



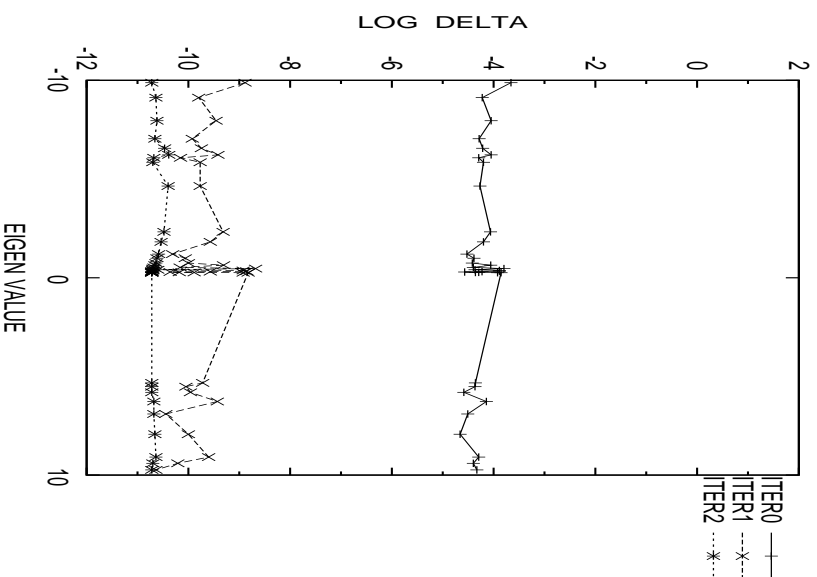
NV=100(RK=55) 自由度大過剩

100,000(十万)次元, 帯幅30, 区間[-10,10] (固有解は35個);
フィルタの次数 DEG と求めた解の品質 (NV=50)



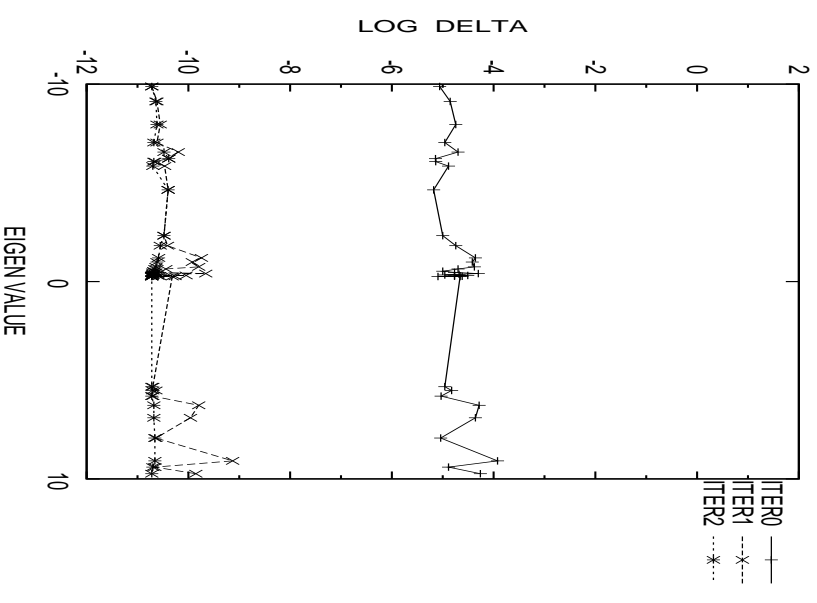
DEG=10

RK=50, 偽の解1個



DEG=20

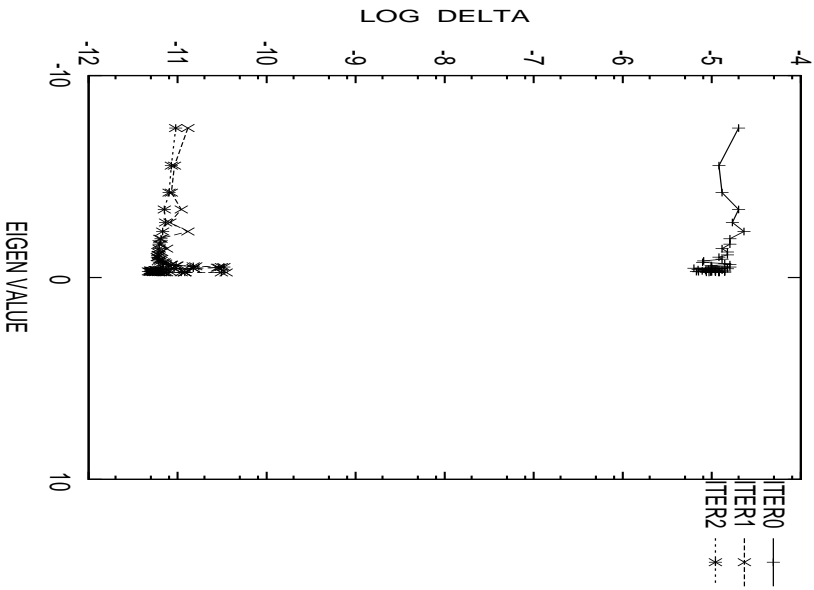
R₃K=48



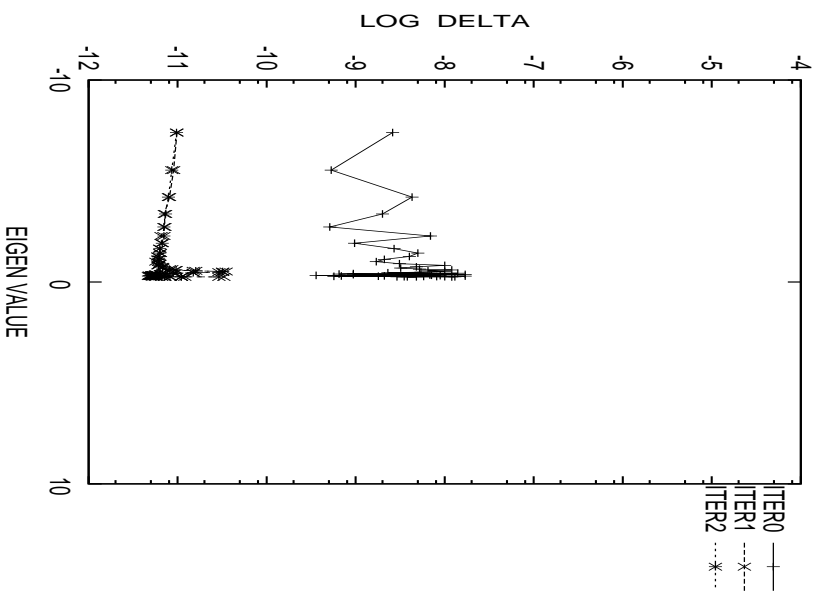
DEG=30

RK=42

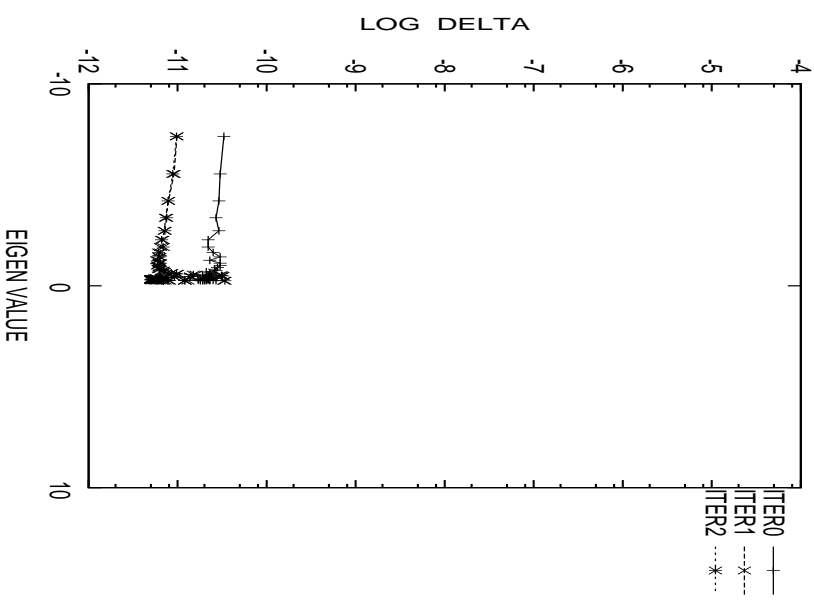
10,000(一万)次元, 帯幅100, 区間[-10,10] (固有解は45個);
ファイルタの次数 DEFG と求まった解の品質 (NV=100)



DEFG=10
RK=50



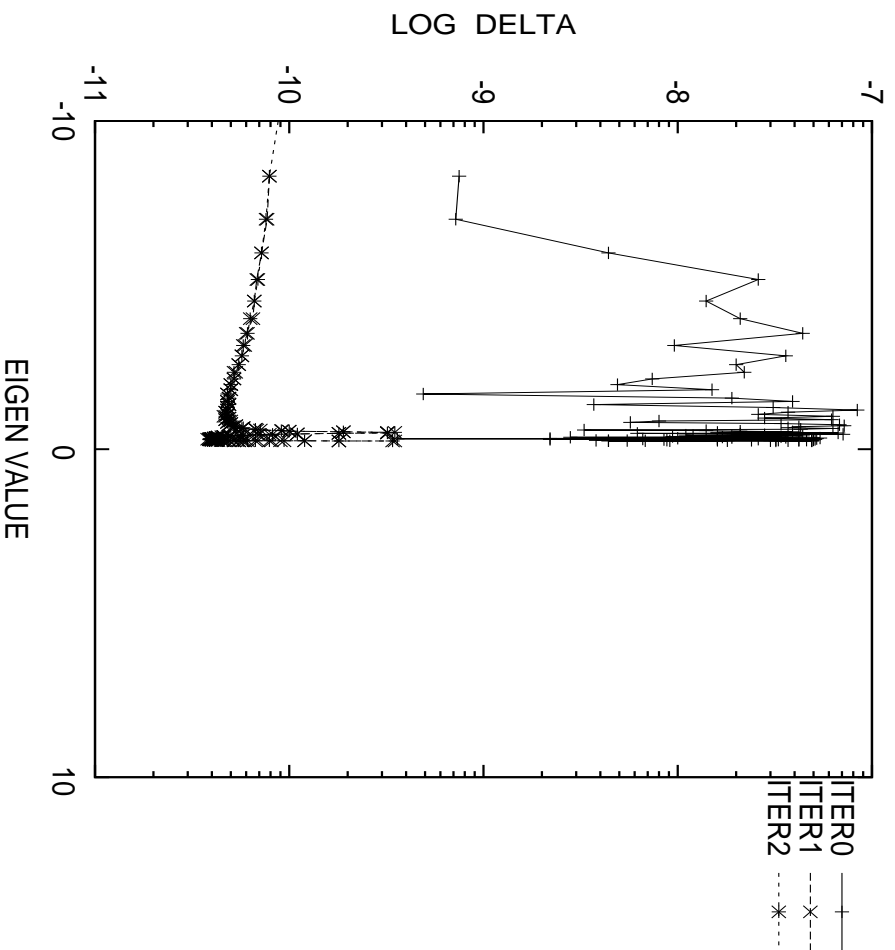
DEFG=20
RK=46



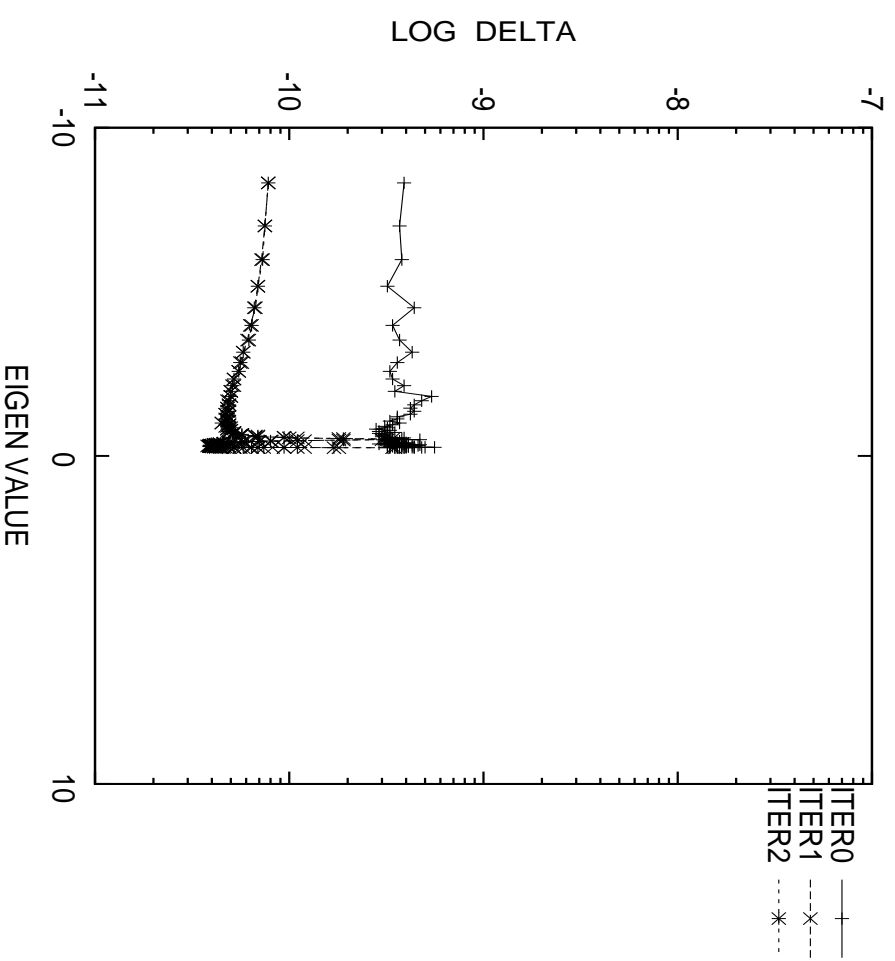
DEFG=30
RK=46

100,000(十万)次元, 帯幅100, 区間[-10,10] (固有解は88個);

ファイルの次数 DEG と求めた解の品質 (NV=100)

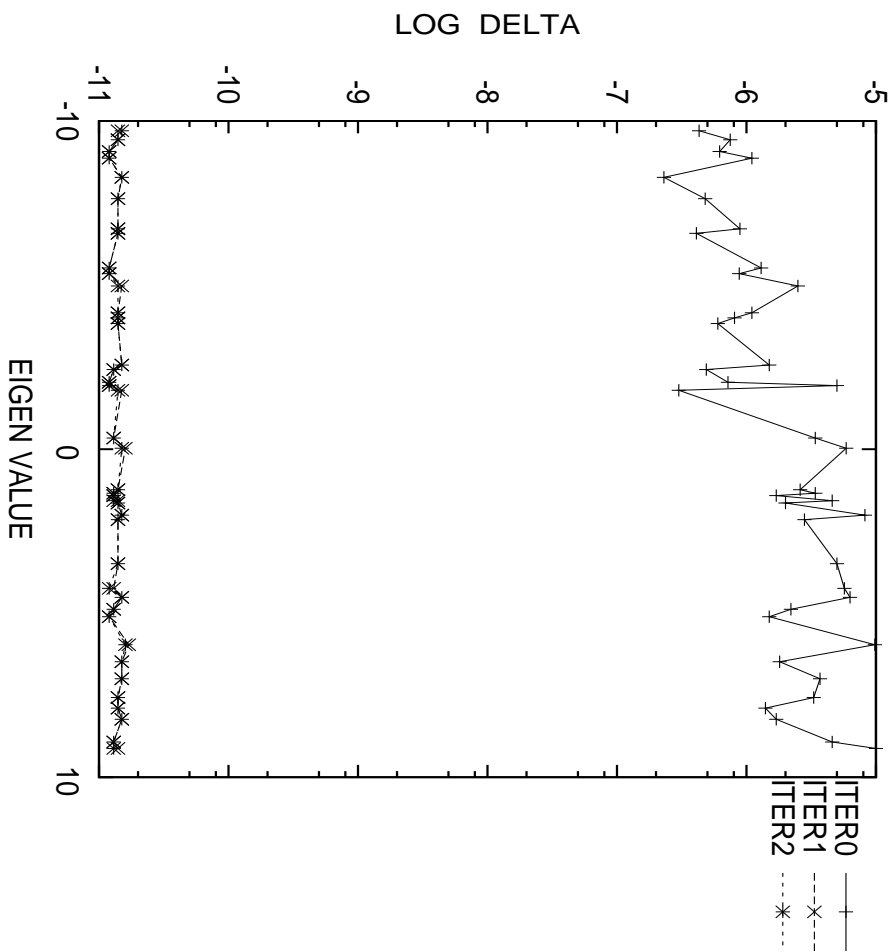


DEG=30 (RK=89)

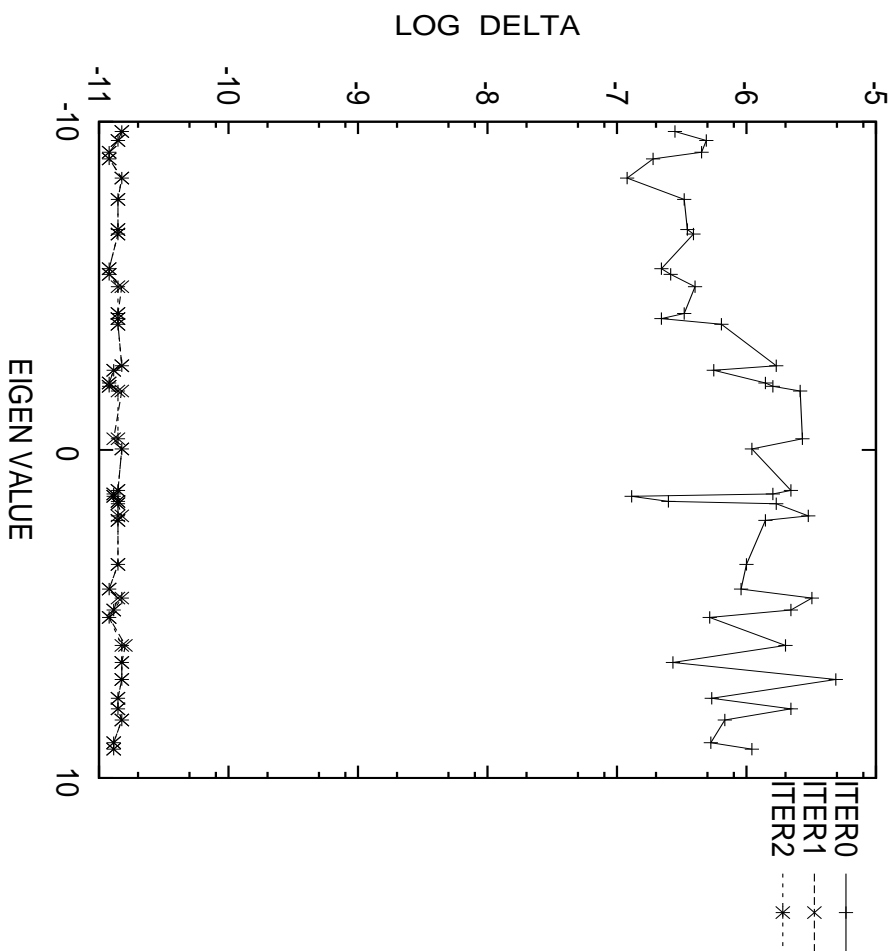


DEG=40 (RK=89)

100,000(十万)次元, 帯幅10, 区間[-10,10] (固有解は41個);
初期ベクトル個数 NV と求まった解の品質 (DEG=40)



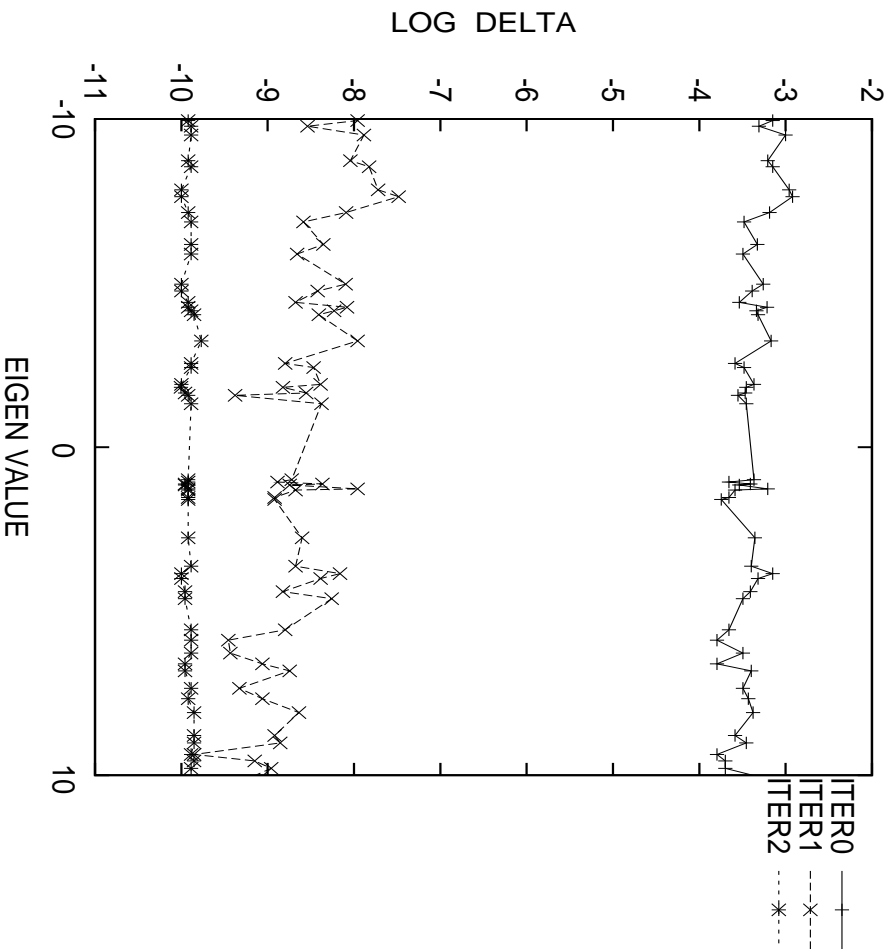
NV=50 (RK=43)



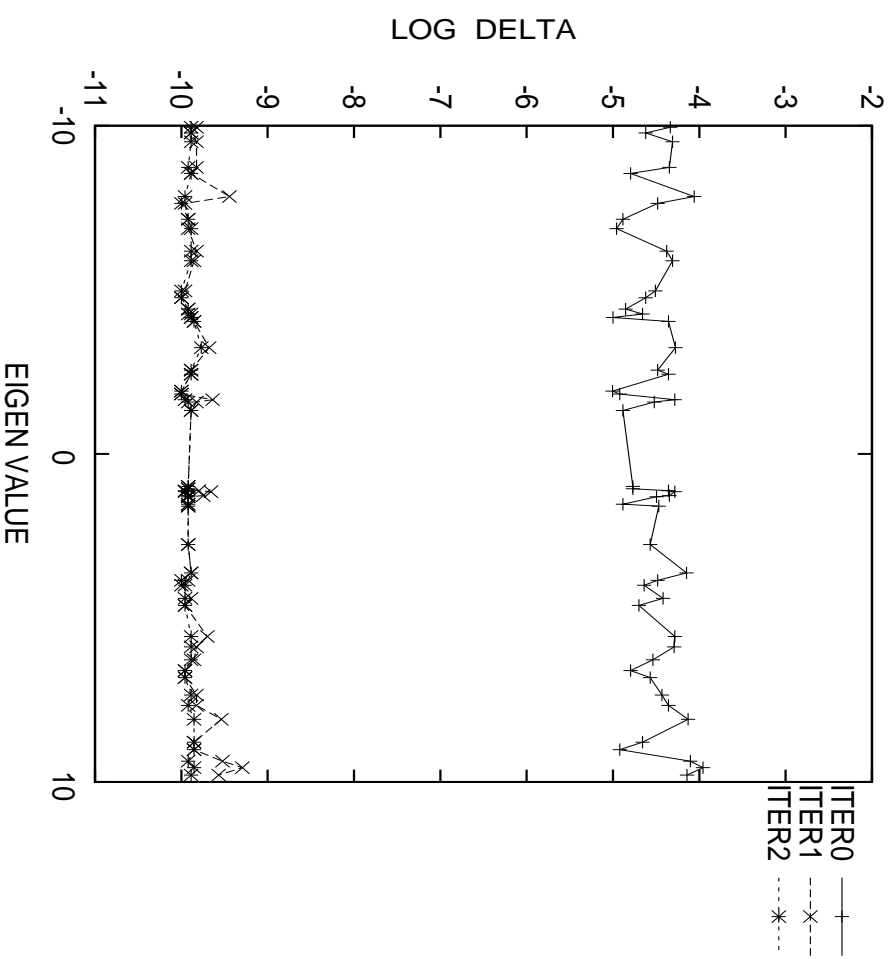
NV=100 (RK=43)

1,000,000(百万)次元, 帯幅10, 区間[-10,10] (固有解は52個);

ファイルの次数 DEG と求まった解の品質 (NV=100)



DEG=10 (RK=100)



DEG=20 (RK=60)

参考文献

- [1] 村田 健郎: 「線形代数と線形計算法序説」, サイエンス社(1986年4月).
- [2] 村田 健郎・小国 カ・唐木 幸比古: 「スーパーコンピュータ 科学技術計算への適用」, 丸善 (1985).
- [3] 小国カ編, 村田 健郎・三好 俊郎・ボンガラ J.J.・長谷川 秀彦 共著: 「行列計算ソフトウェア」, 丸善(1991)
- [4] 森 正武: 「数値解析」, 共立出版(1973).

- [5] Martin R.S. and Wilkinson J.H.:
"Solution of Symmetric and Unsymmetric Band Equations
and the Calculations of Eigenvectors of Band Matrices",
Numer. Math. Vol.9 (1967),pp.279-301.
- [6] Golub G. H. and Van Loan C. F.:
Matrix Computations, 3rd Ed.,
John Hopkins Univ. Press (1996).
- [7] Wilkinson J.H. and Reinsch C.:
Handbook for Automatic Computation, Vol. II, Linear Algebra,
Part II: 'The Algebraic Eigenvalue Problem',
Springer-Verlag (1971).