

ダブルシフト逆ベキ乗法による 大次元スパース対称行列の固有解の一算定法

柏木 光博* 奥間 優樹** 永田 晃久***

A method for determining eigensolutions of large, sparse, symmetric matrices
by the double shifted inverse power method

by
Mitsuhiro KASHIWAGI, Yuki OKUMA and Akihisa NAGATA

(Received : September 23, 2008, Accepted : February 6, 2009)

Abstract

Rapid and stable analysis of eigensolutions is a problem of considerable practical importance. The inverse power method is often used to solve large, sparse and symmetric eigenproblems. This paper presents a useful method on the double shifted inverse power method in the eigensolution of large sparse and symmetric matrices. The proposed method is a method requiring only a relatively small computational time which has the good accuracy and stability. The results obtained agree well with the exact solutions in short CPU time and this indicates that the proposed method provides efficient convergency.

1. はじめに

計算力学などによる数値シミュレーションは、大次元連立1次方程式あるいは大次元固有値問題に帰着する。ソルバーとしてICCG法やSCG法等の前処理を施した共役勾配法系の反復法(PCG法)やAMG法とCG法を組み合わせた方法などがよく使われている^{1),2),4),7),8),13),14),19)}。これらは、直接法に比べ主記憶領域を極めて少なくできるため、有限要素法などに見られる大次元でスパースな行列に対して有力な解析手段となる。しかし、固有値解析は行列式が零を扱う悪条件下での数値解析であり、AMG法やICCG法のような優対角行列向き解法は中間の固有値解析に有効でない。大次元固有値問題に有限要素法などのスパース性を活かすためには、ベキ乗法系解法やランチョス法系解法などの反復法系解法に頼らざるを得ない。ベキ乗

法やサブスペース法^{3),15)}は、古典的解法の仲間入りをしたかに見えるが、固有値の小さい方あるいは大きい方からいくつかの固有解(固有値と対応する固有ベクトル)を求め得る。大次元スパース対称固有値問題に対して有効なランチョス法^{2),6),15)}はハウスホルダー法と同じように行列の3重対角化を可能とし、サブスペース法と同様に最小あるいは最大固有値近辺のいくつかの固有解を求め得る。しかし、演算時の丸め誤差による共役性のくずれにより縮重固有値や無縁固有値を生じる。これら避けるためにブロックランチョス法^{5),9)}が考案されたが、ブロックサイズやブロック数の設定の煩わしさや記憶容量および計算時間の増加など問題点も多い。また、リスタート・ランチョス法²⁾は部分空間固有値問題を繰り返すことによって固有解を得る方法であり、現在では最も利用されている。ランチョス法などの Krylov 部分空間に基づく反復法^{2),6),18)}に代わ

* 産業工学部建築学科教授 ** 産業工学部研究科社会開発工学専攻院生

*** 産業工学部建築学科学生

る有効な方法として Jacobi-Davidson 法^{17,18)}があるが、対角優位性の弱い有限要素解析における固有値問題に対し効率がよくないことも示されている¹⁹⁾。最近、柏木は ICCG 法や SCG 法などの前処理を施した共役勾配法系の反復法や原点移動逆ベキ乗法および 2 分法を利用しながら、大次元スパース行列で小さい方からあるいは大きい方から数個の固有解を求める場合に有効であると共に、多重根に対しては特に収束が早い方法を示した^{10,11)}。しかし、逆ベキ乗法以外のいずれの解法も中間固有値解析に有効でない。

逆ベキ乗法やサブスペース法およびリスタート・ランチョス法などの反復系解法は、最小固有値や最大固有値からいくつかの固有値を求める場合に有効であるが、任意の中間の原点移動点付近の固有値解析には解析不能や解の見落としを呈する。また、中間固有値を求める適切な方法がないので、小さい方から何百とか何千とかの固有解を求めているのが現状と思われる。固有値解析は非常に大きい計算負荷を伴うので、ある固有値近辺の固有解を多くても何十か求めれば効率的な設計ができるものと思われる。

固有値の近傍に原点移動して、固有値を探す方法を原点移動逆ベキ乗法という。原点移動量を適切に設定すると、原点移動していない場合に比べ、収束を速くする効果を期待できる。古典的方法ではあるが、反復法系の原点移動逆ベキ乗法は、任意の中間の原点移動点付近の安定した固有値解析に有効な唯一の方法であろうと思われる。ただし、特に最小固有値と最大固有値のほぼ中間の原点移動点付近の行列は特に悪条件となり、反復回数と計算時間は極端に多くなる。悪条件な線形方程式を解くこと自体がヘビーな問題なので、PCG 法による反復法系解法の反復回数を少なくすることは困難であり、逆ベキ乗法の反復回数を少なくする解析法が望まれる。

本論文は大次元スパース対称行列の任意の中間の原点移動点付近の固有解を求める 1 方法を提案している。原点移動逆ベキ乗法は原点移動点を固定しているが、提案法では、前回反復時の固有値に対する現時点の固有値の相対残差値がある収束値以上では、従来の原点移動逆ベキ乗法（ここでは、同次シフト逆ベキ乗法と称す）を使用し、ある収束値以下では、反復毎に原点移動量を設定する原点移動逆ベキ乗法（ここでは、逐次シフト逆ベキ乗法と称す）を使用することにより、反復回数と計算時間を従来の原点移動逆ベキ乗法のほぼ半分以下にすることを可能とした（この方法をダブルシフト逆ベキ乗法と称す）。原点移動

量の適切な設定は収束回数や計算時間に影響を及ぼすので、一般固有値問題の場合の設定値についても提案している。逆ベキ乗法によって、対象とする行列の原点移動点付近の固有値を差の小さい方から順次計算できる。SCG 法などの前処理を施した共役勾配法系の反復法を利用しながら、大次元スパース行列で特に任意の中間の固有解をいくつか求める場合に有効である。また、提案法で大きい方から数個の固有解を求める場合も、逆ベキ乗法で小さい方から数個の固有解を求める場合と同様に数値解析できるのも特徴である。しかし、逆ベキ乗法では解の存在を保証できないので必要とする個数以上の固有解を求める必要があり、この求める固有解数についても提案している。

以下に、逐次シフト点の設定値の理論およびアルゴリズムを述べると共に、多重根を持つ 2 次元及び 3 次元ヘルムホルツ標準固有値問題による数値実験により、その有効性を示す。

2. 原点移動量

ここでは、以下のような一般固有値問題を扱う。

$$Ax = \lambda Bx \quad (1)$$

ここに、 A は $n \times n$ の実対称行列、 B は $n \times n$ の正定値対称行列、 λ は固有値、 x は対応する固有ベクトルである。

原点移動量 λ_0 を適切に選ぶことにより低次の固有ベクトルへの収束を加速することが出来る。固有値の近似値が予め得られている場合、原点をその近似固有値の近傍に移すことにより近似固有値に対応する固有ベクトルへの収束が加速される。一般には近似固有値が予め得られていることは稀であり、反復の途中で得られる近似固有ベクトルのレーリー商とそれに対応する残差ベクトルのノルムを用いて固有値の存在範囲を推定し、その存在範囲を基に原点移動量を決定する方法について述べる¹²⁾。

実対称行列 A の固有値 λ_i ($1 \leq i \leq n$) に対する B -直交化された固有ベクトルを ϕ_i ($1 \leq i \leq n$) とすれば、 x は固有空間の直和に分解されるから、 ϕ_i にかかる係数を c_i とすると

$$x = \sum_{i=1}^n c_i \phi_i \quad (2)$$

と書ける。このとき、

$$x^T A x = \sum_j c_j \phi_j^T A \sum_i c_i \phi_i = \sum_{i=1}^n \lambda_i c_i^2 \quad (3)$$

となる。

$$x^T B x = I \quad (4)$$

により

$$x^T B x = \sum_i c_i \phi_i^T B \sum_j c_j \phi_j = \sum_i c_i^2 = 1 \quad (5)$$

したがって

$$x^T Ax = \sum_{i=1}^n x^T A x c_i^2 \quad (6)$$

$A\phi_i = \lambda_i B\phi_i$ および 式(2)から

$$Ax = \sum c_i A\phi_i = \sum c_i \lambda_i B\phi_i$$

$$x^T AB^{-1}Ax = \sum c_j \lambda_j \phi_j B B^{-1} \sum c_i \lambda_i B\phi_i = \sum c_i^2 \lambda_i^2 \quad (7)$$

となる . 式(3)と(6)より , $\sum_{i=1}^n (x^T Ax - \lambda_i) c_i^2 = 0$ であるから

$$\begin{aligned} \sum (x^T Ax - \lambda_i)^2 c_i^2 &= \sum \left\{ (x^T Ax)^2 - 2x^T Ax \lambda_i + \lambda_i^2 \right\} c_i^2 \\ &= \sum (x^T Ax)^2 c_i^2 - 2 \sum x^T Ax \lambda_i c_i^2 + \sum \lambda_i^2 c_i^2 \\ &= (x^T Ax)^2 \sum c_i^2 - 2x^T Ax \sum \lambda_i c_i^2 + \sum \lambda_i^2 c_i^2 \\ &= (x^T Ax)^2 x^T Bx - 2x^T Ax \cdot x^T Ax + x^T AB^{-1}Ax \\ &= (x^T Ax \cdot Bx - Ax)^T (x^T Ax \cdot x - B^{-1}Ax) \\ &= (x^T Ax \cdot Bx - Ax)^T B^{-1} (x^T Ax \cdot Bx - Ax) \\ &= r^T B^{-1}r \end{aligned} \quad (8)$$

よって ,

$$\begin{aligned} |x^T Ax - \lambda_j| c_j^2 &\leq \sum_{i \neq j} |x^T Ax - \lambda_i| c_i^2 \\ &\leq \frac{1}{\rho} \sum_{i=1}^n [x^T Ax - \lambda_i]^2 c_i^2 = \frac{1}{\rho} r^T B^{-1}r \end{aligned} \quad (9)$$

のようなあるスカラー ρ が存在する . また ,

$$r^T \cdot B^{-1}r = \sum [x_i - x^T Ax]^2 c_i^2 \geq \rho^2 \sum c_i^2 \quad , \text{ から}$$

$$c_j^2 = 1 - \sum_{i \neq j} c_i^2 \geq 1 - \frac{r^T B^{-1}r}{\rho^2}$$

が成立し ,

$$\begin{aligned} |x^T Ax - \lambda_j| &\leq \frac{1}{c_j^2} \frac{r^T B^{-1}r}{\rho} \leq \frac{\frac{r^T B^{-1}r}{\rho}}{1 - \frac{r^T B^{-1}r}{\rho^2}} = \frac{\rho \cdot r^T B^{-1}r}{\rho^2 - r^T B^{-1}r} \end{aligned} \quad (10)$$

を得る . 一般に , 近似固有ベクトル x とその近似固有値 λ と残差ベクトル $r(x)$ の間には次の式が成り立つ .

$$\min_{1 \leq i \leq n} |\lambda_i - \lambda| \leq \|r(x)\| \quad (11)$$

ただし

$$r(x) = Ax - \lambda Bx$$

$$r(x) = \{r_1, r_2, \dots, r_n\}^T$$

$$\|r(x)\| = (r_1, r_2, \dots, r_n)^{\frac{1}{2}} \quad (12)$$

近似固有値としてレーリー商 $\lambda(x)$ を考えると , 式(11) は中心が $\lambda(x)$ で半径 $\|r(x)\|$ の円の中に少なくとも 1 個の固有値が存在することを示す . ℓ 反復時の近似固有ベクトル $x_1^{(\ell)}, x_2^{(\ell)}, \dots, x_m^{(\ell)}$ のレーリー商をそれぞれ $\lambda_1^{(\ell)}, \lambda_2^{(\ell)}, \dots, \lambda_m^{(\ell)}$, 残差ベクトルのノルムをそれぞれ $r_1^{(\ell)}, r_2^{(\ell)}, \dots, r_m^{(\ell)}$ とすると , 式(11)より近似固有ベクトル各々に対して固有値の存在円 $\pi_1^{(\ell)}, \pi_2^{(\ell)}, \dots, \pi_m^{(\ell)}$ を描くことが出来る . 固有値に重複がない場合 , 原点移動量を λ_0 において反復を進めると , 近似固有ベクトル $x_i^{(\ell)}$ が最初に λ_0 に最も近い固有値 λ_i に対応する固有ベクトル x_i に収束すると考えられるから , ある反復段階においてノルム $r_i^{(\ell)}$ が他のノルムに比べて小さくなり , ついには存在円 $\pi_i^{(\ell)}$ が他の存在円と分離した状態になると考えられる . 一般に最小固有値とレーリー商の間には $\lambda_i < \lambda(x)$ の関係があるから , この状態において固有値の存在範囲を次の式で推定する .

$$0 < \lambda_i^{(\ell)} - r_i^{(\ell)} \leq \lambda_i < \lambda_i^{(\ell)} \quad (13)$$

式(13)より , 求めようとする固有値に対する原点移動量は次式で決定する .

$$\lambda_0 = \lambda_i^{(\ell)} - r_i^{(\ell)} > 0 \quad (14)$$

λ_0 に最も近い固有値に対応する固有ベクトルが求めた後は , 順次次の固有ベクトルに原点を移動させるものとする . 一般に , レーリー商 $\lambda(x)$ と任意の固有値 λ_i の間に式(15)の関係があるとき , 式(16)が成り立つ .

$$|\lambda(x) - \lambda_i| \geq \rho > 0 \quad (15)$$

$$|\lambda(x) - \lambda_i| \leq \beta, \quad \beta = \frac{\rho \cdot r^T B^{-1}r}{\rho^2 - r^T B^{-1}r}, \quad j \neq i \quad (16)$$

よって , 近似固有値ベクトル $x_1^{(\ell)}, x_2^{(\ell)}, \dots, x_m^{(\ell)}$ がある収束条件を満たすものとする , $\lambda_1^{(\ell)}, \lambda_2^{(\ell)}, \dots, \lambda_m^{(\ell)}$ はどれも十分な精度で固有値に収束していると考えられる . 式(15)と式(16)の $\lambda(x)$, $\|r(x)\|$, λ_i をそれぞれ $\lambda_{i+1}^{(\ell)}, r_{i+1}^{(\ell)}, \lambda_i^{(\ell)}$ に置き換え , 式(15)から

$$\rho_{i+1}^{(\ell)} = |\lambda_{i+1}^{(\ell)} - \lambda_i^{(\ell)}| \quad (17)$$

と置けば , $\lambda_{i+1}^{(\ell)}$ 近傍の固有値 $\lambda_j \neq \lambda_i^{(\ell)}$ の存在領域の推定式(18)を得る .

$$|\lambda_{i+1}^{(\ell)} - \lambda_j| \leq \beta_{i+1}^{(\ell)}, \quad \beta_{i+1}^{(\ell)} = \frac{\rho_{i+1}^{(\ell)} \cdot r_{i+1}^{(\ell)T} B^{-1} r_{i+1}^{(\ell)}}{(\rho_{i+1}^{(\ell)})^2 - r_{i+1}^{(\ell)T} B^{-1} r_{i+1}^{(\ell)}} \quad (18)$$

よって, 原点を $\lambda_{i+1}^{(\ell)}$ の近傍に移動させる場合の原点移動量は式(18)より次の式(19)が得られる.

$$\lambda_0 = \lambda_{i+1}^{(\ell)} - \beta_{i+1}^{(\ell)} \quad (19)$$

上式から逐次シフト時の特異性を減ずることが出来る.

柏木が発表したトレース理論を使った固有値問題の行列式の固有値による微分式⁹⁾は, 提案のダブルシフト逆ベキ乗法による固有値の存在を確定できる. 以下に, その理論を示す. 式(1)が自明な解法外の解をもつためには, $A - \lambda B$ が特異でなければならないので

$$\det[A - \lambda B] = 0 \quad (20)$$

ここで, $f(\lambda)$ を以下のようにおく

$$f(\lambda) = \det[A - \lambda B] \quad (21)$$

トレース理論によって

$$\frac{f'(\lambda)}{f(\lambda)} = \text{trace} \left[[A - \lambda B]^{-1} [A - \lambda B]' \right] = -\text{trace} \left[[A - \lambda B]^{-1} \right] \quad (22)$$

共役勾配法によれば, $[A - \lambda B]^{-1}$ は

$$[A - \lambda B]^{-1} = \sum_i \frac{p_i B p_i^T}{p_i^T [A - \lambda B] p_i} \quad (23)$$

のように示すことができる. ここに, p_i は共役勾配法における共役方向ベクトルであり, T は転置を表している. 式(22)に式(23)を代入すると

$$\frac{f'(\lambda)}{f(\lambda)} = -\text{trace} \left[\sum_i \frac{p_i B p_i^T}{p_i^T [A - \lambda B] p_i} \right] = -\sum_i \frac{p_i^T B p_i}{p_i^T [A - \lambda B] p_i} \quad (24)$$

のように $f(\lambda)$ の微分式を得る.

いま, 連立一次方程式を以下のようにおく

$$Ax = b \quad (25)$$

ここに, A は係数マトリックス, x は解ベクトル, b は右辺ベクトルを表している. 共役勾配法における不完全逆マトリックス C として A^{-1} を利用すれば共役勾配法は1回で解ベクトルを得たことになるので,

$$p_0 = \frac{1}{r_0^T A^{-1} r_0} A^{-1} r_0 = \frac{1}{b^T A^{-1} b} A^{-1} b = \frac{1}{b^T x} x$$

$\lambda = 0$ とおくと

$$\frac{f'(\lambda)}{f(\lambda)} = -\frac{p_0^T B p_0}{p_0^T A p_0} = -\frac{\left(\frac{1}{b^T x}\right)^2 x^T B x}{\left(\frac{1}{b^T x}\right)^2 x^T A x} = -\frac{x^T B x}{x^T A x} \quad (26)$$

また, 上式は式(4)と(25)から

$$\frac{f'(\lambda)}{f(\lambda)} = -\frac{1}{x^T b} \quad (27)$$

上式から何らかの方法で連立一次方程式を解けば, 簡単に f'/f を得ることができる. この値は本研究における固有値解析に際して, 真の固有値の探索に便利に利用される. 従来, この種の探索は固有値問題を解く必要があり, 解析時の計算負担は膨大であった. しかし, 柏木の示した方法は連立一次方程式を解いた結果を使って簡単に求めることができる方法となっている.

式(19)は, 解の存在領域の中で解を跨ぐような以下の式に書き直される.

$$\lambda_0^{(k)} = \lambda^{(k)} - \text{sign}(f_d^{(k)} f_d^{(k-1)}) \left| \beta^{(\ell)} \right| \quad (28)$$

3. ダブルシフト逆ベキ乗法のアルゴリズム

A を剛性マトリックス, B を質量マトリックス, λ を固有値, x を固有ベクトルとすると, 一般固有値問題は, λ_0 を原点移動量とすると, $[A - \lambda_0 B]x = (\lambda - \lambda_0)Bx$ のように表せる. ここでは, 一般固有値問題について, ダブルシフト逆ベキ乗法のアルゴリズムを示す.

- (1) 初期ベクトル $x^{(0)}$ を一様乱数によって生成する. グラム・シュミットの方法により, すでに得られた固有値ベクトルの抜き取りと正規化を行う.
- (2) 同次シフト逆ベキ乗法による反復計算を行う.

ℓ サイクルでの $x^{(\ell)}$ は

$x^{(\ell)} = [A - \lambda_0 B]^{-1} B x^{(\ell-1)}$ によって求める. グラム・シュミットの方法により, すでに得られた固有値ベクトルの抜き取りと正規化を行う. レーリー商により近似固有値を計算する.

原点移動(シフト)判定を行う.

$$\left| \frac{\lambda^{(\ell)} - \lambda^{(\ell-1)}}{\lambda^{(\ell)}} \right| < \varepsilon_e \text{ であれば原点移動量 } \lambda_0^{(k)} \text{ を求める. 満足しなければ(2)の に戻る. ここに, } \varepsilon_e \text{ は}$$

以下の式のような固有値の同次シフト時相対誤差値である.

$$\varepsilon_e = \min(10^{-3} / (\lambda_0 + 1), 10^{-7}) \quad (29)$$

or

$$\varepsilon_e = \min(10^{-4} / (\lambda_0 + 1), 10^{-7}) \quad (30)$$

- (3) 逐次シフト逆ベキ乗法による反復計算を行う.

ℓ サイクルでの $x^{(\ell)}$ は
 $x^{(\ell)} = [A - \lambda_0^{(\ell-1)} B]^{-1} B x^{(\ell-1)}$ によって求める。グラム・シュミットの方法により、既に得られた固有ベクトルの抜き取りと正規化を行う。レーリー商により近似固有値を計算する。

収束判定を行う

$$\left| \frac{\lambda^{(\ell)} - \lambda^{(\ell-1)}}{\lambda^{(\ell)}} \right| < \varepsilon_1 = 1 \times 10^{-14} \quad \text{あるいは}$$

残差ベクトル: $r^{(\ell)} = A x^{(\ell)} - \lambda^{(\ell)} B x^{(\ell)}$ を計算し

$$\frac{\|r^{(\ell)}\|}{\|A x^{(\ell)}\|} < \varepsilon_2 = 1 \times 10^{-9}$$

であれば収束。収束していない場合、以下の式によ

って $\lambda_0^{(\ell)}$ を計算し、(3)の に戻る。

$$e = \left| \lambda^{(\ell)} - \lambda^{(\ell-1)} \right|, \quad g = \left\{ r^{(\ell)} \right\}^T B^{-1} r^{(\ell)},$$

ただし、標準固有値問題では $B^{-1} = I$

$$\beta^{(\ell)} = eg / (e^2 - g)$$

$$\lambda_0^{(\ell)} = \lambda^{(\ell)} - \text{sign}(f_d^{(\ell)} f_d^{(\ell-1)}) |\beta^{(\ell)}|$$

$$f_d^{(\ell)} = -\frac{1}{\left\{ x^{(\ell)} \right\}^T x^{(\ell-1)}}$$

4 数値実験

ダブルシフト逆ベキ乗法における有効性を示すために、標準固有値問題に関する例題による数値実験を行った。ここでは、2次元および3次元波動方程式の定常問題におけるヘルムホルツ方程式を離散化して生じる係数マトリックスを扱った。この固有値問題では固有値の解析解が分かっており、数値実験時に求められた固有値の精度について検証できる対象となっている。また、多くの多重根や極近接根をもつ求めにくい対象でもある。自由度と原点移動量および固有値の同次シフト時相対誤差値(2種類、アルゴリズム参照)を変化させながら数値実験した。また、解析時に必要となる連立方程式の解法として反復法(SCG法)を利用した。ICCG法やSCG法などの前処理を施した共役勾配法系の反復法は、大次元スパース行列に有効であるが、ICCG法は中間固有解に対し不安定な性状を示したり、SCG法より計算時間が長かったのでここでは省いた。また、提案法は大きい方から数個の固有解を求める場合も、逆ベキ乗法で小さい方から数個の固有解を求める場合と

同様に数値解析できるのも特徴である。しかし、提案法では解の存在を保証できないので必要とする個数以上の固有解を求める必要があり、この求める固有解数についても提案している。

以下のようなヘルムホルツモデルを考える。境界条件は境界値を0とする。

最初にヘルムホルツ2次元モデルを考える(図-1)。ヘルムホルツ方程式に中心差分を用いて離散化を行うと、

$Ax = \lambda x$ の固有値問題が得られる。ここで、 $A = (a_{k,l})$ とお

けば、係数行列 A の各要素は次式となる。

$$a_{i,l} = \frac{2}{\Delta x^2} + \frac{2}{\Delta y^2}, \quad l = (i-1)n_y + j, \quad (1 \leq i \leq n_x, 1 \leq j \leq n_y),$$

$$a_{i,l+n_y} = a_{i+n_y,l} = -\frac{1}{\Delta x^2}, \quad l = (i-1)n_y + j, \quad (1 \leq j \leq n_x, 1 \leq j < n_y),$$

$$a_{i,l+1} = a_{l+1,i}$$

$$= -\frac{1}{\Delta y^2}, \quad l = (i-1)n_y + j, \quad (1 \leq i < n_x, 1 \leq j \leq n_y),$$

$$a_{l,m} = 0 \quad \text{上記以外の } l, m$$

ここで、 $\Delta x = l_x / (n_x + 1)$ 、 $\Delta y = l_y / (n_y + 1)$ はそれぞれ x, y 方向の分割幅である。この係数行列 A の固有値の解析解は次式で与えられる。

$$\lambda_{i,j} = \frac{2}{\Delta x^2} \left[1 - \cos \frac{i\pi}{n_x + 1} \right] + \frac{2}{\Delta y^2} \left[1 - \cos \frac{j\pi}{n_y + 1} \right]$$

数値実験に用いたパラメータ $l_x, l_y, n_x, n_y, n = n_x \times n_y$ を表-1 に示す。

次に以下のようなヘルムホルツ3次元モデルも考える(図-2)。2次元モデルと同様にして、中心差分を用いて離散化を行い、 $Ax = \lambda x$ の固有値問題が得られる。ここで $A = (a_{k,l})$ とおけば、係数行列 A の各要素は下式となる。

$$a_{i,l} = \frac{2}{\Delta x^2} + \frac{2}{\Delta y^2} + \frac{2}{\Delta z^2}, \quad l = (k-1)n_x n_y + (j-1)n_x + i, \\ (1 \leq i \leq n_x, 1 \leq j \leq n_y, 1 \leq k \leq n_z),$$

$$a_{i,l+1} = a_{l+1,i} = -\frac{1}{\Delta x^2}, \quad l = (k-1)n_x n_y + (j-1)n_x + i, \\ (1 \leq i \leq n_x, 1 \leq j \leq n_y, 1 \leq k \leq n_z),$$

$$a_{i,l+n_x} = a_{l+n_x,i} = -\frac{1}{\Delta y^2}, \quad l = (k-1)n_x n_y + (j-1)n_x + i, \\ (1 \leq i \leq n_x, 1 \leq j \leq n_y, 1 \leq k \leq n_z),$$

$$a_{i,l+n_x n_y} = a_{l+n_x n_y,i} = -\frac{1}{\Delta z^2}, \quad l = (k-1)n_x n_y + (j-1)n_x + i, \\ (1 \leq i \leq n_x, 1 \leq j \leq n_y, 1 \leq k \leq n_z),$$

$$a_{l,m} = 0, \quad \text{上記以外の } l, m$$

ここに、 $\Delta x = l_x / (n_x + 1)$ 、 $\Delta y = l_y / (n_y + 1)$ 、 $\Delta z = l_z / (n_z + 1)$ はそれぞれ x, y, z は方向の分離幅である。この係数行列 A の固

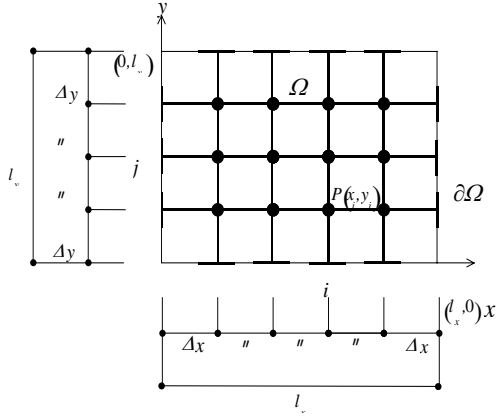


図-1 2次元モデルの一例

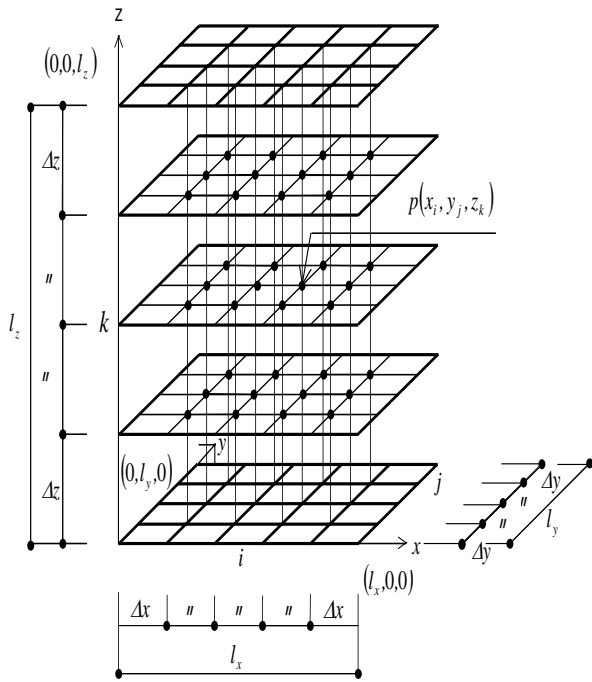


図-2 3次元モデルの一例

表-1 2次元モデルのパラメーター

モデル	タイプ名	l_x	l_y	n_x	n_y	n
A	A-1	1	1	50	50	2500
	A-2	1	1	100	100	10000
	A-3	1	1	150	150	22500
	A-4	1	1	200	200	40000
	A-5	1	1	250	250	62500

表-2 3次元モデルのパラメーター

モデル	タイプ名	l_x	l_y	l_z	n_x	n_y	n_z	n
B	B-1	1	1	1	16	16	16	4096
	B-2	1	1	1	22	22	22	10648
	B-3	1	1	1	28	28	28	21952
	B-4	1	1	1	34	34	34	39304
	B-5	1	1	1	40	40	40	64000

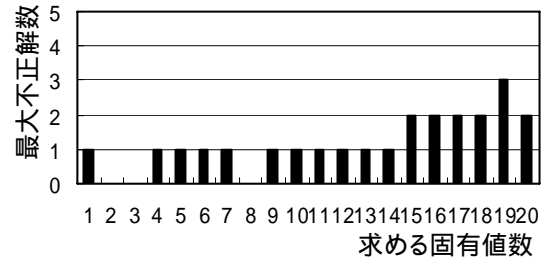


図-3 最大不正解数 (2次元モデル, 式(29)の場合)

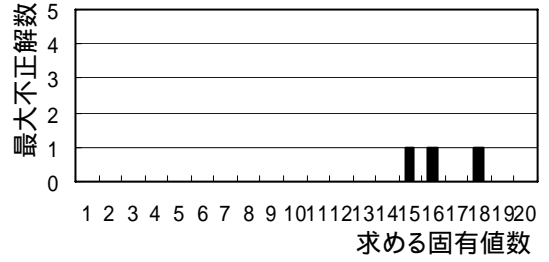


図-4 最大不正解数 (2次元モデル, 式(30)の場合)

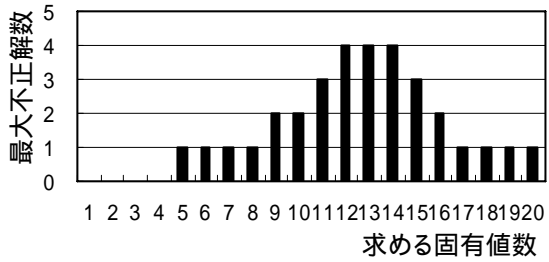


図-5 最大不正解数 (3次元モデル, 式(29)の場合)

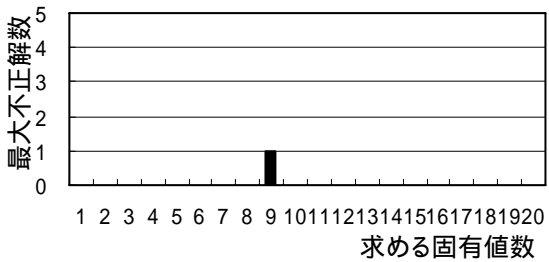


図-6 最大不正解数 (3次元モデル, 式(30)の場合)

有値の解析解は次式で与えられる.

$$\lambda_{i,j,k} = \frac{2}{\Delta x^2} \left(1 - \cos \frac{i\pi}{n_x + 1} \right) + \frac{2}{\Delta y^2} \left(1 - \cos \frac{j\pi}{n_y + 1} \right) + \frac{2}{\Delta z^2} \left(1 - \cos \frac{k\pi}{n_z + 1} \right)$$

数値実験に用いたパラメーター $l_x, l_y, l_z, n_x, n_y, n_z$, $n = n_x \times n_y \times n_z$ を表-2 に示す. ここでの数値実験は, すべて倍精度演算とした. 求める固有解の個数は $l = 1 \sim 20$ とした.

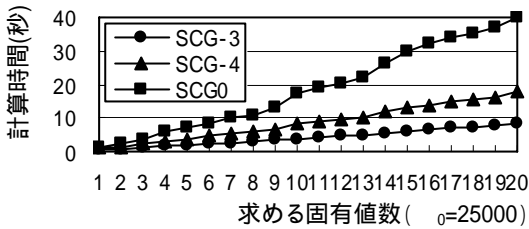
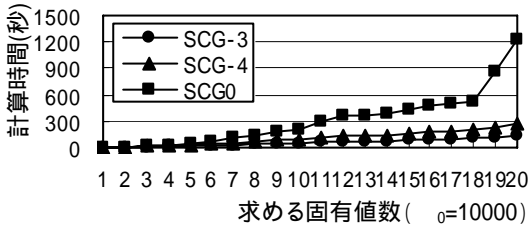
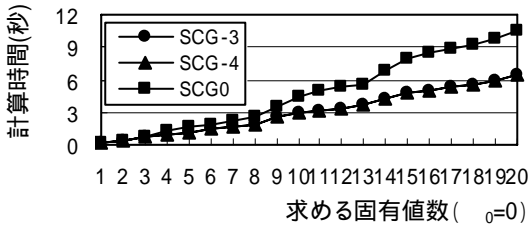


図-7 計算時間 (2次元モデル, タイプ A-1)

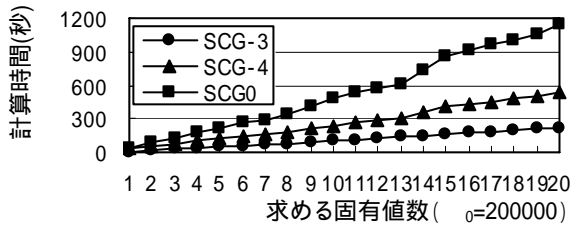
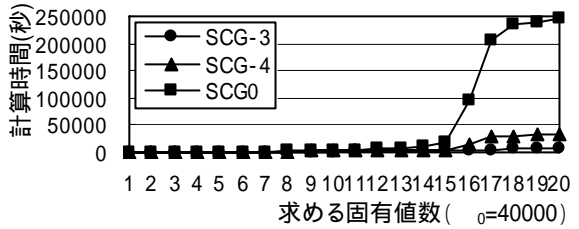
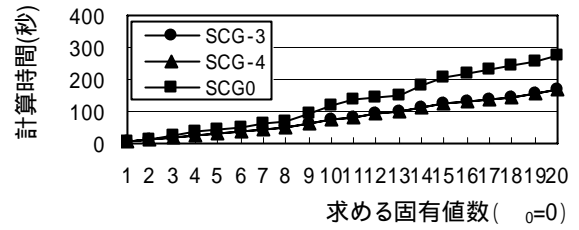


図-9 計算時間 (2次元モデル, タイプ A-3)

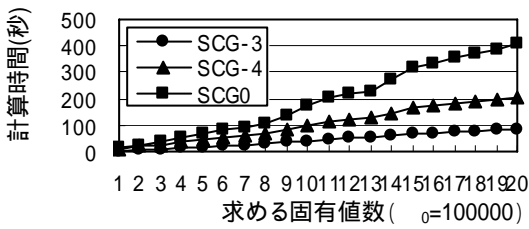
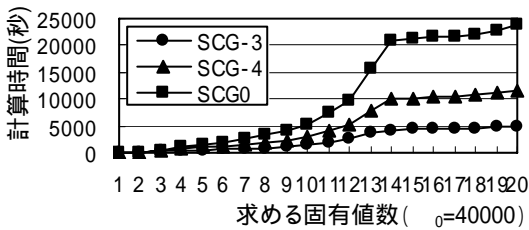
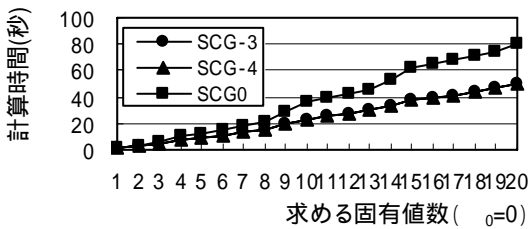


図-8 計算時間 (2次元モデル, タイプ A-2)

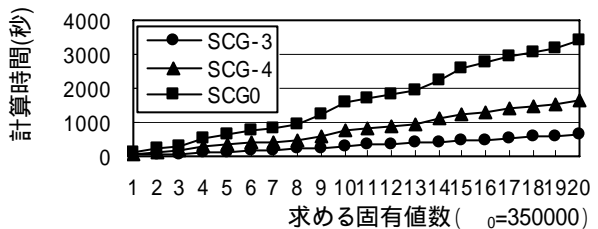
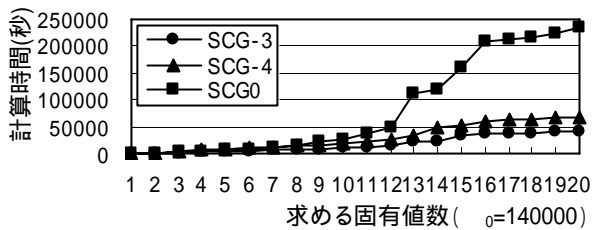
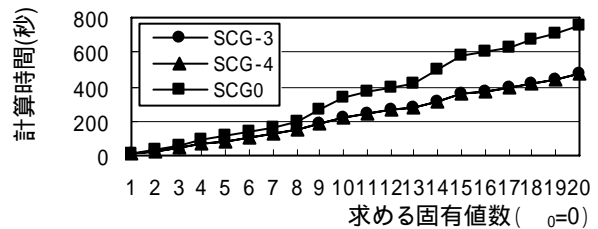


図-10 計算時間 (2次元モデル, タイプ A-4)

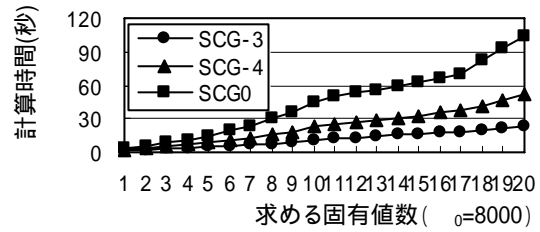
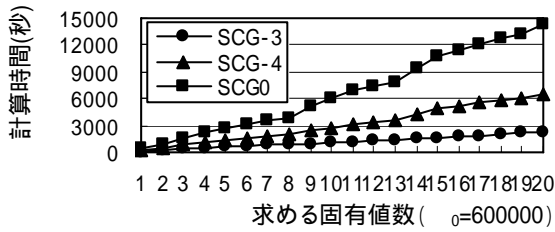
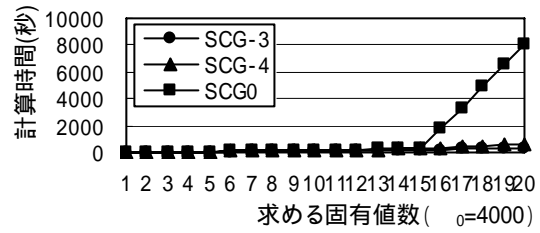
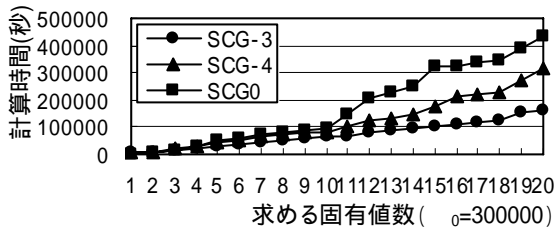
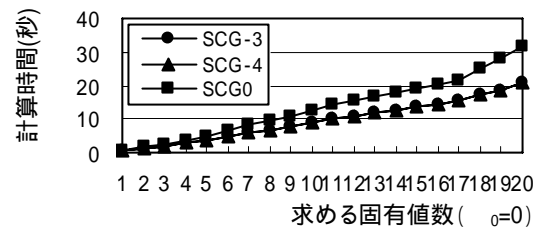
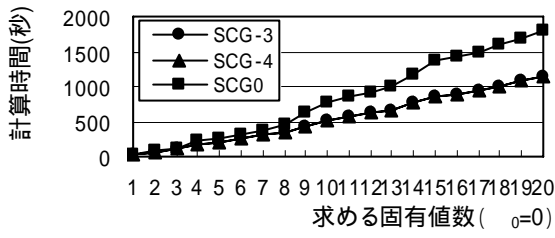


図-11 計算時間 (2次元モデル, タイプA-5)

図-13 計算時間 (3次元モデル, タイプB-2)

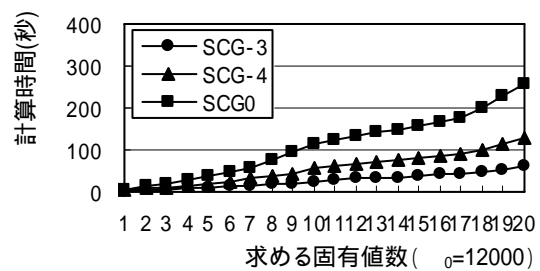
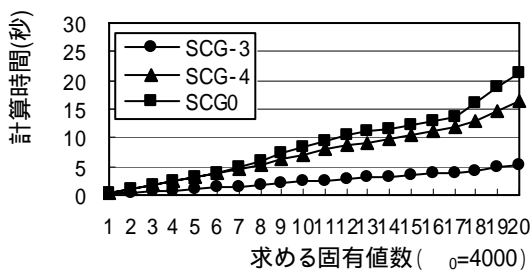
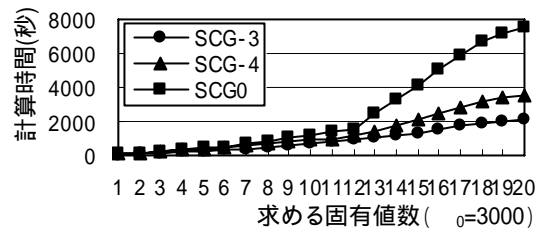
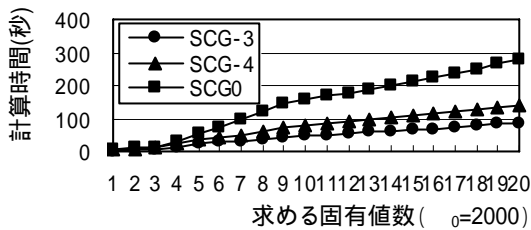
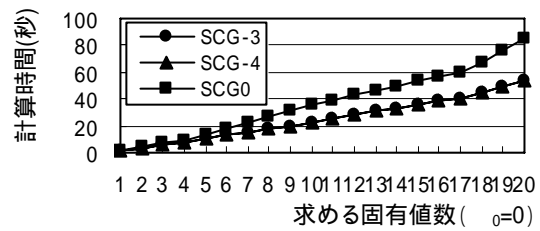
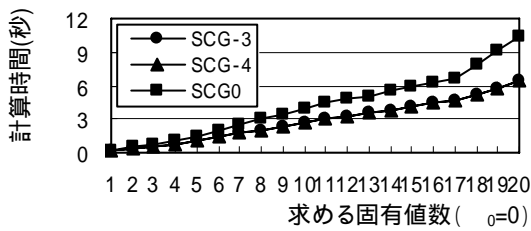


図-12 計算時間 (3次元モデル, タイプB-1)

図-14 計算時間 (3次元モデル, タイプB-3)

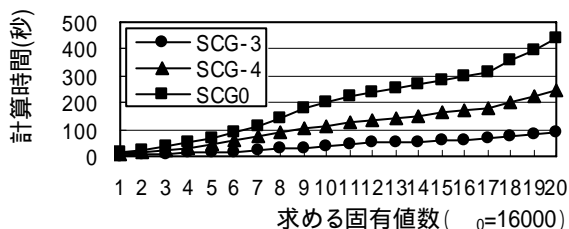
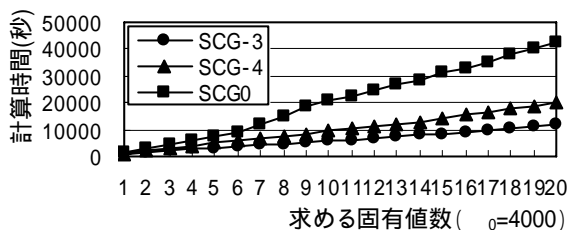
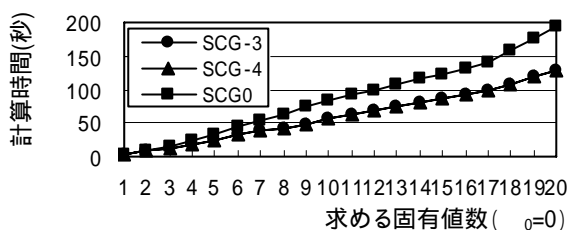


図-15 計算時間 (3次元モデル, タイプB-4)

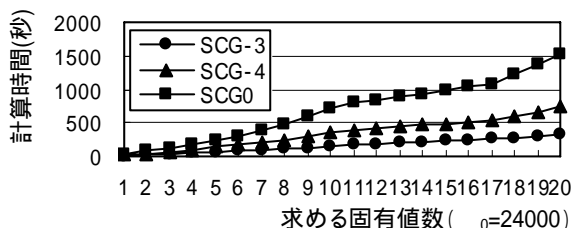
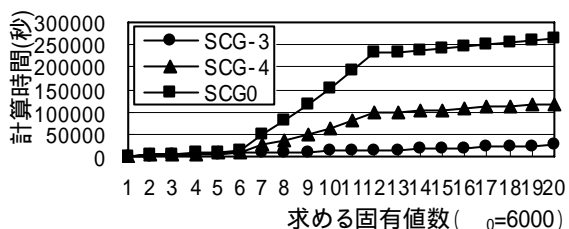
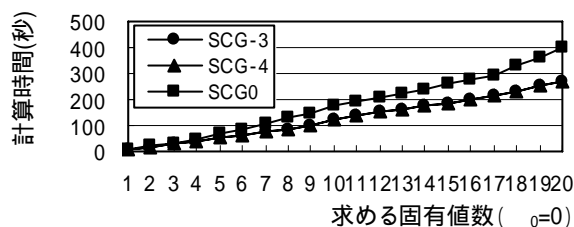


図-16 計算時間 (3次元モデル, タイプB-5)

初期ベクトルはランダムに与えた。計算機は、今回はスーパーコンピュータを対象としていないこと、および最近のパーソナルコンピュータの性能向上などを考慮し、E machines (Pentium4 2.8GHz, RAM1536MB, Windows XP, Fujitsu Fortran & C Academic Package V4.0L10)を使用した。

図-3~6 は全モデルについての不正解数の最大値を描いている。固有値の同次シフト時相対誤差値が式(29)の場合、2次元モデルで最大3個、3次元モデルで最大4個の不正解数が生じている。固有値の同次シフト時相対誤差値が式(30)の場合、2次元モデルで最大1個、3次元モデルで最大1個の不正解数が生じている。

本対象は重根や極近接根が多い対象であることを考慮するとそれほどの不正解数とはいえない。固有値の同次シフト時相対誤差値が式(29)の場合、求める固有値数が20個程度までは、求める固有値数に6~8個程度をプラスした固有値数で実際に計算することが望ましい。また、固有値の同次シフト時相対誤差値が式(30)の場合、求める固有値数が20個程度までは、求める固有値数に2~3個程度をプラスした固有値数で実際に計算することが望ましい。

次に、図-7~16 は、固有値の同次シフト時相対誤差値が式(29)の場合(図中のSCG-3)と固有値の同次シフト時相対誤差値が式(30)の場合(図中のSCG-4)および原点移動逆ベキ乗法(図中のSCG0,同次シフト逆ベキ乗法のみ)についての計算時間の結果を計算結果の一部について描いている。ただし、最小固有値と最大固有値については全てを、中間固有値については計算時間が最も長い場合について示している。SCG0は不正解率が0であり安定した解法であるといえよう。しかし、SCG0で計算する場合、ある中間固有値近辺20個の最小固有値近辺20個に対する計算時間のそれぞれのタイプの最大倍率は2次元問題で126~897倍、3次元問題で32~656倍であり、中間固有値を求める時の計算時間は長大である。中間固有値を求める場合がいかにかへビーであるかが分かる。

図からも分かるように、提案法はSCG0に比べ2分の1程度以下で計算されている。ただし、提案法は固有値の見落としをするので、固有値の同次シフト時相対誤差値の適切な設定が必要である。SCG-3はSCG-4より計算時間は短い不正解数は多い。逆に、SCG-4はSCG-3より計算時間は長い不正解数は少なく安定している。両方法ともSCG0より計算時間は短く、SCG-4で平均2分の1程度、SCG-3で平均5分の1程度となっている。

4 . 結び

提案のダブルシフト逆ベキ乗法において、固有値の同次シフト時相対誤差値の適切な設定値と求める固有解数とについて、ヘルムホルツ 2 次元および 3 次元モデルによる標準固有値問題数値実験を行った結果、以下のことが分かった。

- (1) 中間固有値を求める場合は計算負荷が非常に大きい問題（最小固有値近辺を求める場合の何十倍から何百倍）となる。古典的の原点移動逆ベキ乗法は、ここでの数値実験では不正解数は 0 で安定した解法となっているが、提案法より計算負荷が大きい。提案のダブルシフト逆ベキ乗法は、計算負荷を小さくし、多少の不正解数があっても安定的に解を求める方法である。また、プログラムも古典的の原点移動逆ベキ乗法をベースに多少の追加で済むのでシンプルである。
- (2) 提案法では、固有値の同次シフト時相対誤差値が式(29)の場合、求める固有値数が 20 個程度までは、求める固有値数に 4 個以上をプラスした固有値数で実際に計算することが望ましい。また、式(30)の場合、求める固有値数が 20 個程度までは、求める固有値数に 1 個以上をプラスした固有値数で実際に計算することが望ましい。
- (3) 同次シフト時相対誤差値が式(29)の場合は式(30)の場合より計算時間は短い不正解数は多い。逆に、式(30)の場合は式(29)の場合より計算時間は長い不正解数は少なく安定している。両方法とも古典的逆ベキ乗法より計算時間は短く、式(30)の場合で平均 2 分の 1 程度、式(29)の場合で平均 5 分の 1 程度である。

参考文献

- 1) Ajiz,M.A. and Jennings,A., A Robust Incomplete Choleski-Conjugate Gradient Algorithm, *Int. J. Numer. Meth. Engng*, 1984, 20, 949-966.
- 2) Arbenz,P. and Lehoucq,R.B., A Comparison of Algorithms for Modal Analysis in the Absence of a Sparse Direct Method, *Int. J. Numer. Meth. Engng*, 2003, 1, 1-21.
- 3) Bathe,K.J., *Finite Element Procedures in Engineering Analysis*, Prentice-Hall, 1982.
- 4) Briggs,W.L., Henson,V.E. and McCormick,S.F., *A Multigrid Tutorial Second Edition*, SIAM, Philadelphia, 2001, 137-161.

- 5) Golub,G.H. and Underwood,R. : *The Block Lanczos Method for Computing Eigenvalues, in Mathematical Software* , J.Rice,ed, Academic Press, New York, 1977.
- 6) Golub,G.H. and van Loan,C.F., *Matrix Computation*, Johns Hopkins, Baltimore, MD, 1983.
- 7) Hestenes,M.R. and Stiefel,E., Methods of Conjugate Gradients for Solving Linear Systems, *Journal of Research of the National Bureau of Standards*, 1952, 49(6), 409-436.
- 8) 柏木光博, 一般化共役勾配法(GCG法)の有限要素法への適用に関する研究 その4 特異性判定修正式と平面・立体骨組の悪条件化数値実験, 日本建築学会構造系論文集,1999, 521, 185-192
- 9) 柏木光博, 共役勾配法による最大あるいは最小固有解の一算定法, 日本計算工学会論文集,1999, 1, 1-5
- 10) 柏木光博, 共役勾配法による大次元スパース対称行列の固有解, 日本応用数理学会論文誌,2005, 15, 29-43
- 11) Kashiwagi,M., A Method for Determining Eigensolutions of Large, Sparse, Symmetric Matrices by the Preconditioned Conjugate Gradient Method in the Generalized Eigenvalue Problem, 日本建築学会構造系論文集,2008, 73-629, 1209-1217
- 12) 片山拓朗, 清田秀二, 柏木光博, 大脇信一, 平井一男, 残差ベクトルを用いた標準固有値問題の部分空間解法, 日本応用数理学会論文誌,1994, 4-4, 299-325
- 13) Meijerink,J.A. and van der Vorst,H.A., Guidelines for the Usage of Incomplete Decompositions in Solving Set of Linear Equations as They Occur in Practical Problems, *Journal of Computational Physics*, 1981, 44, 134-155.
- 14) 村田健郎,小国力,三好俊郎,小柳義夫編著,工学における数値シミュレーション・スーパーコンピュータの応用,丸善,1988.
- 15) Nour-omid,B., Parlett,B.N. and Taylor, R.L. : Lanczos versus Subspace Iteration for Solution of Eigenvalue Problems, *Int. J. Numer. Meth. Engng*, 1983, 19, 859-971,.
- 16) Paige,C.C., Computational Variants of the Lanczos Method for the Eigenproblem, *J.Inst.Maths Applies*, 1972, 10, 373-381.
- 17) Sleipen,G.L.G. and van der Vorst,H.A., A Jacobi-Davidson Iteration Method for Linear Eigenvalue Problems, *SIAM*, 1996, 17, 401-425.
- 18) van der Vorst,H.A., 超大型固有値問題の解法, 応用数理, 1998, 8, 6-20.
- 19) 矢川元基,青山裕司,有限要素固有値解析 大規模並列計算法,森北出版,2001.