

古賀鉄也*, 宮田考史*

(*福岡工業大学)

1. はじめに

本稿では、標準固有値問題

$$Au = \lambda u \quad (1)$$

を扱う。\$A\$は\$n\$次実対称正定値行列とし、\$A\$の固有値を\$\lambda\$、固有ベクトルを\$u\$とする。特に\$0 < \lambda_1 < \lambda_2 \le \dots \le \lambda_n\$とし、対応する固有ベクトル\$u_1, u_2, \dots, u_n\$とする。式(1)を直接解くことは、\$n\$の値が大きい場合、計算時間が長くなり困難である。そのため、本研究では少数の基底を用いて行列を縮小し、計算時間の短縮を目指す。本研究では、最小固有値\$\lambda_1\$と対応する固有ベクトル\$u_1\$を近似的に求める。

2. レイリーリッツ法

本研究では、4次元の基底行列\$V\$を用いてレイリーリッツ法を行うことで、近似固有対を求める。また、基底行列\$V\$の空間を\$\mathcal{V}\$で表す。近似固有値を\$\theta\$、近似固有ベクトルを\$x\$とする。基底空間\$\mathcal{V}\$の中で固有ベクトルを構築するため、\$x \in \mathcal{V}\$より\$x = Vz\$と表される。ただし、\$z\$は4次元のベクトルとする。近似固有対の残差\$Ax - \theta x\$に対してガレルキン条件\$Ax - \theta x \perp V\$を課すと、

$$V^T AVz = \theta V^T Vz \quad (2)$$

となる。このとき、\$V\$が正規直交基底ではないため、\$V^T V = I\$とはならない。この式(2)の4次元に縮小した一般化固有値問題を解くことで近似固有対を求める。

3. 加速勾配法

本研究では、基底行列\$V\$を定める際に加速勾配法[1]の考えを用いる。また、本稿で扱う加速勾配法は、ネステロフの加速勾配法(NAG法)とする。

加速勾配法の元である勾配降下法では、

$$y_{t+1} = y_t - \alpha \nabla \phi(y_t), \quad (3)$$

を用いて、局所最小値の位置ベクトルを求める。このとき、\$y_t\$を位置ベクトル、\$\alpha\$を学習率、\$\nabla \phi(y_t)\$を関数\$\phi(y_t)\$における勾配とする。

NAG法の勾配は、今までの反復で用いた勾配を参考にすることで収束を安定させ、さらに先の位置での勾配を用いる。式(3)の更新式を、以下のように書き換える。

$$\begin{cases} s_{t+1} = \beta s_t + \nabla \phi(y_t), \\ y_{t+1} = y_t - \alpha s_{t+1}. \end{cases} \quad (4)$$

\$\beta\$は過去の勾配に対する学習率、\$s_t\$は今までの勾配の合計である。式(4)は、モーメント法と呼ばれる。式(4)に先の位置の勾配の予測を加えると以下の式となる。

$$\begin{cases} \bar{y} = y_t - \beta s_t, \\ s_{t+1} = \beta s_t + \nabla \phi(\bar{y}), \\ y_{t+1} = y_t - \alpha s_{t+1}. \end{cases} \quad (5)$$

\$\bar{y}\$は現在の位置ベクトル\$y_t\$から勾配の合計\$s_t\$を引くことで一つ先の反復における位置ベクトルを予測している。これによって本来\$y_{t+1}\$がもつ位置ベクトルを予測し勾配として用いることで収束の高速化を行っている。これらを用いて最小固有値への収束を目指す。

4. EPIC法

EPIC法[1]は、行列\$A\$の\$n\$次元空間を\$n-1\$次元の凸空間へと射影を行う。凸空間上では、局所最小値が大域的な最小値となる性質があるため、\$n-1\$次元空間でNAG法を用いることを考える。減らす1次元のベクトルは\$q\$とし、以下を満たすものとする。

$$\lambda_1 \leq f(q) < \frac{\lambda_1 + \lambda_2}{2}.$$

このとき、関数\$f\$はレイリー商

$$f(q) = q^T A q, \quad \|q\|_2 = 1$$

とする。ベクトル\$q\$の直交補空間を行列\$Q \in \mathbb{R}^{n \times (n-1)}\$とする。射影\$\psi: \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}^{n-1}\$と\$\psi^\dagger: \mathbb{R}^{n-1} \mapsto \mathbb{R}^n\$は、それぞれ

$$\psi(x) = \frac{Q^T x}{q^T x}, \quad \psi^\dagger(y) = \frac{Qy + q}{\|Qy + q\|_2}$$

とする。\$\psi\$と\$\psi^\dagger\$はお互いに単射である。また、\$x\$は近似固有ベクトルであるため\$f(x) \le f(q)\$を満たす。これを満たす空間を\$X\$で表す。また、\$\psi(x)\$の集合を表す空間は\$Y\$とし、\$Y\$は凸空間となる。これを利用し空間\$Y\$の中で、NAG法を用いる。ただし、固有対を求める式(5)の\$y_{t+1}\$を求める式はLOPCG法を真似て、

$$y_{t+1} = \arg \min_{y \in \text{span}\{y_t, \bar{y}, \nabla \phi(\bar{y}_t)\}} \phi(y_t) \quad (6)$$

とおく。このとき、\$\phi(y_t) = f(Qy + q)\$とする。\$n-1\$次元上で用いたベクトル\$\bar{y}, s_{t+1}, y_{t+1}\$を\$\psi^\dagger(y)\$の演算によって\$n\$次元空間へと戻し反復を行う。このとき式(6)は、

$$x_{t+1} = \arg \min_{x \in \text{span}\{q, x_t, \bar{x}, \bar{r}_t\}} f(x_t) \quad (7)$$

となる。\$\bar{r}_t\$は残差ベクトルに対して前処理行列を掛けたものとする。式(7)は\$V = [q, x_t, \bar{x}, \bar{r}_t]\$と考え、レイリーリッツ法を用いて解く。

5. 本研究

本研究では、前処理は対角近似とし、前処理を加えるタイミングを変えて実験を行った。残差として相対残差

$$w = \begin{cases} \|Ax_t - f(x_t)x_t\|_2 / |f(x_k)| & (f(x_t) \geq 0), \\ \|Ax_t - f(x_t)x_t\|_2 / |f(x_k)| & (f(x_t) < 0) \end{cases}$$

を用い、相対残差を参考に前処理を付け加える。\$w \le 10^{-8}\$を収束条件とし、\$w \le 10^{-2}, 10^{-4}, 10^{-6}\$のタイミングで前処理を加え、その結果を比較する。

6. 数値実験

行列は、CYLSHELLよりS2RMQ4M1を用いる。その結果を図1に示し、横軸を反復回数、縦軸を相対残差\$w\$の対数をとったものとする。

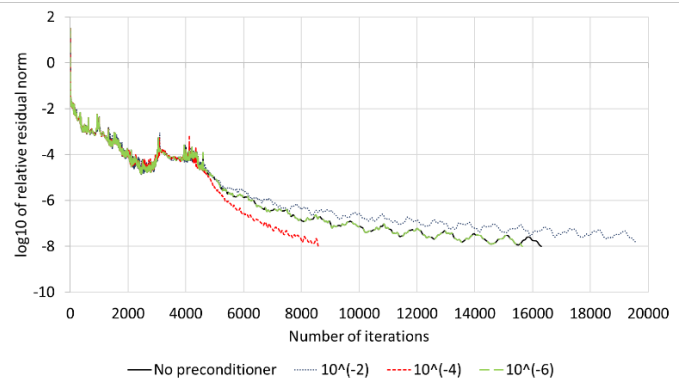


図1 実験結果

図1より、今回の実験では\$w \le 10^{-4}\$のタイミングで前処理を行うことが適切であると分かった。

参考文献

- [1] N. Shao et al., EPIC: A provable accelerated eigensolver based on preconditioning and implicit convexity, SIAM J. Matrix Anal. Appl, 46 (1), pp. 45-73, 2025.