

スカラー計算機とベクトル計算機における固有値コードの性能評価

聖徳学園女子短大・情報系 別府 良孝(Yoshitaka BEPPU)

§ 1. はじめに

実対称三重対角行列  $T$  に関する標準固有値問題  $Tv_i = \lambda_i v_i (i=1, 2, \dots, m, \dots, n)$  を解くために<sup>1)</sup>、種々の固有値コードが開発されているが、それらのコードを速度と精度の両面から性能評価したので報告する。固有値コードとしては、分割統治コード・ホモトピーコード・NICER・NUMPAC・EISPACK・LAPACK を取り上げ、スカラー計算機とベクトル計算機における測定結果を報告する。

§ 2. テスト行列について

以下の行列をテスト行列として用いた。これらは、J、C、G、L、W、F、B、R、H 行列と略記する。

Jahn  $d_i = m + 1, s_{2i} = k\sqrt{i}, s_{2i-1} = k\sqrt{m+i}$

Constant  $d_i = 4, s_i = 1$

Graded  $d_i = i, s_i = 1$

Laguerre  $d_i = 2i - 1, s_i = i$

Wilkinson  $d_i = \begin{cases} \frac{n}{2} - i + 1 & (1 \leq i \leq \frac{n}{2}) \\ i - \frac{n}{2} & (\frac{n}{2} + 1 \leq i \leq n) \end{cases} \quad s_i = -1$

Franck  $A_{ij} = n + 1 - \max(i, j)$

Block  $A_{ij} = 4\delta(i, j) - \sum_{k=1}^{r-1} \sum_{m=0}^{r-2} B$

where  $r = \sqrt{n}$

$$B = \delta(i, k+1+m) \cdot \delta(j, i+r-1) + \delta(i, k+m) \cdot \delta(j, i+r+1) + \{\text{exchange of } i \text{ and } j\}$$

Random  $-32768 < A_{ij} < +32768$

Huckel  $A_{ij} = -7.2\delta(i, j) - \frac{3.0}{(i-j)^2} \{1 - \delta(i, j)\}$

### § 3. QR法におけるシフト戦略について<sup>2)</sup>

“平方根付きQR法”の収束を加速するためのシフト戦略として、QRループに入る前に全ての固有値を“無平方根QR法”で求める“ループ前究極シフト法”やQRループの中で固有値を一個ずつ求める“ループ内高次シフト法”が提案されてきた。“ループ内高次シフト法”の場合、与えられたTがデフレーションの結果、k次の左上三重対角行列と(n-k)次の右下対角行列とに分解されるので、シフト量 $\mu$ としては、k次の左上三重対角行列の右下L次の小行列の固有値を用いればよい。小行列の固有値は、“無平方根QR法”・“ニュートン法”・“ラゲール法<sup>3)</sup>”のいずれかを用いて見積もる事ができる。

既発表のデータ<sup>2)</sup>および新規データに基づいて、以下のごとく結論した。

#### (a) ループ前究極シフト法について

このシフト法は、近接・縮退固有値が苦手で、2n語の作業領域が必要である。速度も精度も、LU逆反復法に劣る場合が多い。だからこそ、Parlettも「The fastest way to compute a full set of eigenvectors is to execute QL algorithm with the fast Givens rotation using the previously computed eigenvalues as origin shifts. This combination of techniques seems to have been overlooked so far.」と述べているのであろう。

#### (b) ループ内高次シフト法について

- b1. ニュートン法やラゲール法は、近接・縮退固有値が苦手で、あふれの心配が有る。高速化したければ、L語の作業領域が必要である。
- b2. 無平方根QR法は、近接・縮退固有値にも強く、あふれの心配は無いが、2L語の作業領域が必要である。
- b3. 固有値の精度は、Lを大きくしても、余り改善されない。
- b4. 固有ベクトルの精度は、 $L=0.10n$ と $L=n$ の時に改善される場合が多い。
- b5.  $n=100, 265, 400, 625$ でのテスト結果によれば、ベストなLは、nにも依存する。 $n=100$ なら $L=0.20n$ に、 $n=625$ なら $L=0.03n$ にすれば良い<sup>4)</sup>。
- b6. FACOM-VP-200、NEC-SX2、HITAC-S820、FACOM-VP-2600、NEC-SX3でのテスト結果によれば、ベストなLは、ベクトル加速率にも依存する。VP-200なら $L=0.20n$ に、SX3なら $L=0.03n$ にすれば良い<sup>4)</sup>。

- b 7. 収束に必要な平面回転の数やQR変換の数は、 $L \propto n$  とすると  
Lに関して振動する場合があるが、 $L \propto k$  とすればLとともに漸減  
する。

#### § 4. 固有値のみを求める場合の性能評価

表1には使用コード名が、表2には900次元のTのすべての固有値をスカラ一機で  
求めるのに要したCPU時間が、表3には900次元のTのすべての固有値をベクトル  
機で求めるのに要したCPU時間が、表4には得られた固有値の絶対誤差が、示されて  
いる。これらのデータに基づいて、以下のごとく結論した。

- (a). 速度に関しては、NUMPACの中の無平方根QRコードが最高速である。  
(b). 精度に関しては、分割併合ホモトピー法のHRST (Homotopy for Real  
Symmetric Tridiagonal)<sup>5, 6)</sup>が最高精度である。  
(c). QR法は、nが1000を超えるとデフレーションエラーのために  
精度が低下する。だからこそ、Parlettは「The QR algorithm is the most  
effective way of finding all the eigenvalues of a small matrix.」と  
述べている。

algorithm	code	coder	year
二分割法	DSTEBZ	Lapack	1992
多分割法	HOBSVW	Ninomiya	1984
平方根付QR	HOQRVW	Ninomiya	1984
無平方根QR	DSTERF	Lapack	1992
無平方根QR	NSHOUD	Beppu	1982
分割併合ホモトピー法	HRST	K. Li, T. Y. Li & Z. Zeng	1994

表1. テストに使用した固有値コード。

code	F	B	R	H	J	C	G	L
DSTEBZ	6112	1807	9548	6681	8178	6236	8179	8469
DSPMG	2492	4294	3130	3177	1458	3207	1042	3072
DSTERF	951	947	1355	1197	1040	1277	790	1172
NSHOUD	294	436	519	397	346	420	313	484
HOQRVW	466	753	923	702	619	864	553	887
HOBSVW	7851	7911	7903	7908	7923	7915	7919	7919

表2. Cpu-time (milli sec.) for finding all the eigenvalues when n=900  
FACOM-M-1800 was used on March, 1994.

code	F	B	R	H	J	C	G	L
DSTEBZ	6089	1797	9500	6637	8131	6199	8133	8419
DSPMG	2398	4141	3019	3061	1407	3088	1004	2951
DSTERF	485	478	689	607	531	651	401	596
NSHOUD	290	427	512	391	340	414	308	476
HOQRVW	462	745	911	693	611	855	546	876
HOBSVW	132	132	131	131	131	131	131	132

表3. Cpu-time (milli sec.) for finding all the eigenvalues when n=900.  
FACOM-VP-2600 was used on March, 1994.

code	F	B	R	H	J	L	W
DSTEBZ	2.1D-11	1.8D-11	5.8D-10	1.3D-11	1.3D-11	1.2D-11	1.2D-11
DSPMG	1.3D-14	1.1D-14	2.6D-11	1.9D-16	1.9D-14	2.6D-14	3.1D-14
DSTERF	4.3D-13	1.0D-13	2.0D-08	1.0D-13	1.2D-11	6.6D-12	1.1D-11
NSHOUD	2.9D-07	1.2D-13	5.3D-08	3.9D-13	7.7D-12	6.5D-12	6.5D-11
HOQRVW	3.2D-12	1.5D-13	5.1D-08	1.4D-13	2.1D-11	3.1D-11	5.3D-11
HOBSVW	1.6D-07	2.5D-10	3.3D-05	5.2D-10	2.7D-08	1.0D-07	1.3D-08

表4. Eigenvalue error  $\Delta \lambda$  for the case of n=900.  
FACOM-VP-2600 was used on March, 1994.

### § 5. 固有対を求める場合の性能評価

すべての固有値と固有ベクトルを求めるために、表5に示した固有値コードを使用し<sup>2)</sup>、以下の結論を得た。

- (a) . スカラー機で固有対を高速に求めたければ、QR・逆反復法のQR I Iコード<sup>7)</sup>を用いるとよい。
- (b) . ベクトル機で固有対を高速に求めたければ、中次シフト法のQ10コードを用いるとよい。
- (c) . 固有ベクトルを精度よく求めたければ、HRST I IコードまたはHOMOコード<sup>8)</sup>を用いるとよい。
- (d) . ホモトピーコードの高速性は確認できなかった。

algorithm	code	coder	year
平方根付QR(D2 shift)	D2	Ninomiya	1984
平方根付QR(Q10 shift)	Q10	Beppu	1990
平方根付QL(D2 shift)	TQL2	Eispack	1976(1992)
平方根付QR/QR (D2 shift)	DSTEV	Lapack	1992
分割統治 <sup>9)</sup>	TREEQR	Dongarra	1987
無平方根QR + 逆反復	QR I I	Beppu-Ninomiya	1982
分割併合 + 逆反復	HRST I I	Li, Li & Zeng	1994
ホモトピー	HOMO	Li & Rhee	1989

表5. テストに使用した固有値コード。

## § 6. おわりに

今後も固有値コードの性能評価は機会あるごとになされるであろうが、HRSTコード・QR IIコード・Q10コードを含めての性能評価が望まれる。

謝 辞：電算機を使用させていただいた、名大・京大・東大・分子研の大型計算機センターに深謝いたします。

## 参 考 文 献：

- 1) B. Parlett: The Symmetric Eigenvalue Problem (1980) Prentice-Hall.
- 2) Y. Beppu, "Origin-Shift Strategies in the QR method", PCG94(1994)251.
- 3) H. Isaka, Y. Beppu and K. Takeuchi: QR法の原点移動方法の比較、数値解析シンポジウム (1991)
- 4) S. Sasaki, H. Isaka and J. Yorozu: SX-3におけるQR法の原点移動方法の比較、情報処理学会第43回全国大会(1991)
- 5) T.Y. Li & Z. Zeng: Laguerre's Iteration in Solving the Symmetric Tridiagonal Eigenproblem, SIAM J. Sci. Comp. 15(1994)1145.
- 6) K. Li, "A Fully Parallel Method for Tridiagonal Eigenvalue Problem", Int. J. Math. Math. Sci., (1994)
- 7) Y. Beppu & I. Ninomiya, "HQR II: A Fast Diagonalization Subroutine", Computers & Chemistry, Vol. 6(1982)87.
- 8) T. Li and N. Rhee: Homotopy Algorithms for Symmetric Eigenvalue Problems, Numer. Math. 55(1989)265.
- 9) J. Dongarra and D. Sorensen: A Fully Parallel Algorithm for the Symmetric Eigenvalue Problem, SIAM J. Sci. Stat. Comput. 8(1987)139.