固有値方程式の並列解法

5 F − 3

笹川辰弥
日本大学工学部情報工学科

I. はじめに

いままで、永年方程式

$$\det(E-H)=0 \tag{1}$$

を解くためにいろいろな方法が考えられてきた。 有名なヤコビ法は、非対角要素がゼロとなるように2次元平面上での回転を繰り返すもので、対角要素のみが残った場合、それらは固有値である。 この方法は、直列解法と呼んでよい。

これに対し、本論文では、すべての固有値を並列に求める方法を提唱する。 この方法は2つのアイディア に基ずいている。まず(1)を分散式の形

$$\sum_i \frac{c_i}{E-\omega_i}=1 \tag{2}$$

に書きあらわす。c_iの具体的な形とその求めかたは参考文献1に書いてある。 次に(2)でω_iは固有値 E の漸近値であることに注目し、Eの全領域を$-\infty<E<\omega_1,\omega_1<E<\omega_2,\cdots,\omega_{n-1}<E<\omega_n,\omega_n<E<\infty$ の$n+1$個の小領域に分け、E を全領域に走らせる。II で述べる方法に従って各小領域で並列に計算すると固有値が速やかに間違いなく求まる。

II. 分散式(2)の計算法

I で述べた小領域$\omega_i<E<\omega_{i+1}$を等間隔δの点列に分ける。それらの点の1つをx_0とし、$f(x_0)$を

$$f(x_0)=\omega_i+\frac{c_i}{1-\sum_{j\neq i}\frac{c_j}{x_0-\omega_j}} \tag{3}$$

で定義する。$f(x_0)$を計算し、その値をx_1と呼ぶと

$$x_1=f(x_0) \tag{4}$$

である。δを与えて、この小領域のすべての点x_0に対して$f(x_0)$を計算し,$|x_1-x_0|$が最小になる点x_0を見いだす。x_0の近くでδを更に小さくとってこのような計算を$|x_1-x_0|$が十分小さくなるまで何度も繰り返す。このようにして得られたx_0が固有値である。勿論、このことは、最大のω_nよりも大きいEの領域でも実行できる。このようにして、すべての領域で固有値が並列に計算できる。

次に、簡単な例として、

$$\frac{3}{E-3}+\frac{4}{E-2}+\frac{5}{E-1}=1 \tag{5}$$

をとり、この式の固有値を求めることを考える。

Parallel Computations of Eigenvalue Equations
Tatuya Sasakawa
Department of Computer Science
College of Engineering, Nihon Univeristy
Koriyama 963, Japan

表 1

x_0	x_1	$\lvert x_1 - x_0\rvert$
5	1.1052	3.8949
8	-4.8750	12.8750
11	57.0000	46.0000
14	13.6364	0.3636
17	10.1287	6.8713

表 2

x_0	x_1	$\lvert x_1 - x_0\rvert$
13.6	14.6122	1.0122
13.8	14.0950	0.2950
14.0	13.6364	0.3636
14.2	13.2269	0.9731

$3 < E < \infty$ の領域では、(3),(4) は

$$x_1 = 3 + \frac{3}{1 - \left(\frac{4}{x_0-2} + \frac{5}{x_0-1}\right)} \tag{6}$$

となる。x_0を 3 より大きい値に対して流し、$|x_1 - x_0|$ がこの領域での最小値となるまで、x_0を求める。$\delta = 3$ととって (6) を計算した結果は表 1 となる。この表から $x_0 = 14$ で $|x_1 - x_0|$ は最小になることがわかる。次に $x_0 = 14$ の近くで$\delta = 0.2$ ととって計算する。その結果を表 2 に示す。このような処法を繰り返して$\delta = 0.001$ のとき、$x_0 = 13.888$ を得る。これが、(5) の最大固有値である。

$2 < E < 3$ の領域にある固有値を求めるためには、

$$x_1 = 2 + \frac{4}{1 - \left(\frac{3}{x_0-3} + \frac{5}{x_0-1}\right)} \tag{7}$$

を計算する。$\delta = 0.01$ に対する結果は表 3 に与えてある。この場合、固有値は 2.64 に近いので、その近くで計算を繰り返すと $x_0 = 2.639$ で $|x_1 - x_0| = 0.0000196$ となる。この x_0が固有値である。

表 3

x_0	x_1	$\lvert x_1 - x_0\rvert$
2.63	2.6622	0.0278
2.64	2.6365	0.0035
2.65	2.6115	0.0385

$1 < E < 2$ での固有値は

$$x_1 = 1 + \frac{5}{1 - \left(\frac{3}{x_0-3} + \frac{4}{x_0-2}\right)} \tag{8}$$

を計算して得られる。$\delta = 0.0001$ に対し $|x_1 - x_0|$ の最小値は $x_0 = 1.4735$ のとき、$|x_1 - x_0| = 0.0002$ である。

この様にして、(5) の固有値が並列計算で求まり、それらは $E = 13.8, 88, 2.639, 1.474$ であることがわかった。

III. 議論

II で述べた方法を用いないで、例えば逐次代入法を考えたりすると、予期する値に収束しないなど、場合に応じていろいろな困難が生ずるので、固有値を並列に求めるのに適さない。

参考文献

1. T. Sasakawa, J. Math. Phys. **4**, 970(1963); **5**, 379(1964).