3D－4

準ブロック対角行列を経由する固有値算法

別 府 良 孝
愛知学院大学・情報社会政策学部

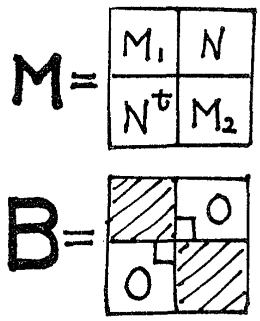
1．はじめに

n次元の実対称行列Aに関する標準固有値問題AV＝VEを解くための算法としては、中継行列としてn次元の三重対角行列Tを用いる方法がよく用いられてきた。ここで、Eは固有値行列、Vは固有ベクトル行列である。並列計算機の普及と共に、三重対角行列Tに対する分割統治法は盛んに研究されてきたが、行列Aに対する直接分割統治法は余り研究されてこなかったようである。

直接分割統治法への第一歩として、中継行列として準ブロック対角行列Bを用いる算法を、本講演で提案する。

2．算　法

n次元の行列Mを $k=\frac{n}{2}$ 次のミニ正方行列 M_1 、M_2、N 、N^T に分けて考えた時、そのブロック非対角要素Nのうち(k, k+1)要素 β のみが非ゼロな行列が、**準ブロック対角行列**である。準ブロック対角行列Bは、行列Aに対する三重対角化をkステップで止めることなどにより得ることができる。



行列Bを $\beta=0$ とおいて強制直和分解すれば、M_1 と M_2 の固有解を素早く求めることにより、Bの近似固有解を求めうる。こうした強制直和分解による摂動誤差は、(1/(n×n)) のオーダーである。因みに、従来研究されてきた三重対角行列を強制直和分解した場合の摂動誤差は、(1/n) のオーダーである。

3．おわりに

準ブロック対角行列を経由する算法は、標準固有値問題AV＝VEを一回だけ解く場合にも有望であるが、分子や原子核などの波動方程式を自己無撞着的に解く場合に特に有効である。なぜなら、反復の初期には、元々荒い物理近似解を初期値に用いていたからである。講演では、SCF計算におけるパフォーマンスなどについて報告する。

・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・

Eigenvalue Algorithm through Nearly Block-diagonalized Matrix

Yoshitaka BEPPU
Department of Infomatics, Aichi Gakuin University
Iwasaki, Nisshin, Aichi 470-0195 Japan