情報処理学会論文誌　コンピューティングシステム　Vol.8　No.4　88–97 (Nov. 2015)

周回積分を用いた固有値解法の円弧領域に対する拡張

前田 恭行[1,2,a)]　櫻井 鉄也[1,3]

受付日 2015年4月14日, 採録日 2015年8月11日

概要：複素平面上の特定の円の円周近傍の固有値およびそれに対応する固有ベクトルが必要となる固有値問題がある．このような問題に対する解法として，複素平面上の多重連結領域上の固有値を求める Sakurai-Sugiura 法の拡張方法が提案されている．この解法は 2 つの円で囲まれた円環領域の固有ベクトル成分によって張られる部分空間を作成する．そのため，円周付近に固有値が多数存在している場合，部分空間サイズが大きくなり，計算コストが増大してしまうという問題がある．本論文では円周領域を分割した円弧領域で固有対を求める Sakurai-Sugiura 法の拡張を提案する．提案法は各円弧領域に対して Chebyshev 多項式によるフィルタリングを用いることで，部分空間サイズを縮小させ，計算コストを削減することができる．数値実験により提案法の有効性を確認する．

キーワード：固有値問題，周回積分，Sakurai-Sugiura 法，Chebyshev 多項式

A Method for Eigenvalue Problem in Arcuate Region Using Contour Integral

Yasuyuki Maeda[1,2,a)]　Tetsuya Sakurai[1,3]

Received: April 14, 2015, Accepted: August 11, 2015

Abstract: We consider eigenvalue problems that require eigenpairs on a specific circle. For solving such problems, an extension of Sakurai-Sugiura method has been proposed which finds the eigenvalues in a multiply connected region. In this method, a subspace spanned by eigencomponents on an annular region surrounded by two circles was generated. The method for an annular region requires a large computational cost since the subspace size increases when many eigenvalues exist around the circumference of circle. In this paper, we propose an alternative extension of Sakurai-Sugiura method in which an annular region is divided into several arcuate regions. The proposed method decreases the subspace size and reduces the computational cost by using the filter utilized with Chebyshev polynomial at each arcuate region. We evaluate the efficiency of the proposed algorithm by several numerical experiments.

Keywords: eigenvalue problem, contour integral, Sakurai-Sugiura method, Chebyshev polynomial

1. はじめに

行列値関数 $T:\mathbb{C}\rightarrow\mathbb{C}^{n\times n}$ について，

$$T(\lambda)\boldsymbol{x}=\boldsymbol{0}$$

を満たす固有値 $\lambda\in\mathbb{C}$，固有ベクトル $\boldsymbol{x}\in\mathbb{C}^n\setminus\{\boldsymbol{0}\}$ を求める問題を固有値問題という．$T(\lambda)$ には様々なタイプがある．たとえば，行列 $A,B\in\mathbb{C}^{n\times n}$ および n 次の単位行列 I について，

$$T(\lambda)=\lambda I-A,\quad T(\lambda)=\lambda B-A$$

となる問題はそれぞれ標準固有値問題，一般化固有値問題と呼ばれる．行列 $A_0,A_1,\ldots,A_p\in\mathbb{C}^{n\times n}$ について，

$$T(\lambda)=A_0+\lambda A_1+\ldots+\lambda^p A_p$$

となる問題は多項式固有値問題と呼ばれる．固有値問題は

[1] 筑波大学
University of Tsukuba, Tsukuba, Ibaraki 305–8577, Japan
[2] 日本学術振興会特別研究員 DC
JSPS Research Fellow, Chiyoda, Tokyo 102–8472, Japan
[3] JST CREST
CREST, Japan Science and Technology Agency, Kawaguchi, Saitama 332–0012, Japan
[a)] maeda@mma.cs.tsukuba.ac.jp

様々な科学や工学の分野において現れ，それらの問題には一部の固有対のみが必要な問題がある．量子ドットの電子状態計算で現れる固有値問題では，最小固有値から数個の固有対が必要となる [1]．遅延微分方程式から現れる固有値問題では，実数部が正の値を持つ固有値が重要となる [2]．ナノエレクトロニクスデバイスの構造解析から現れる固有値問題では，複素平面上の特定の円の円周近傍の固有値およびそれに対応する固有ベクトルが必要となる [3]．本論文では特に円周近傍の固有対を求める問題について考える．

一般化固有値問題の解法としては，QZ 法のような行列の変形をともなう方法を用いて全固有値を求める方法や，shift-invert-Arnoldi 法 [4] や Sakurai-Sugiura 法 [5]（以下，SS 法）などの一部の固有対を求める方法が存在する．しかしナノエレクトロニクスデバイスの構造解析などで扱う行列は大規模な疎行列となり，そのような問題に対して QZ 法を用いた場合，疎行列性が失われるため計算効率が悪い．

shift-invert-Arnoldi 法は指定したシフト点に近い固有対を求める方法である．円周近傍の固有対を求める問題にこの方法を用いる場合，シフト点を円周上に複数配置し，各シフト点ごとに計算を行うなどが考えられる．しかし，この方法は求める必要がない円周の内部および外部の固有対まで求めてしまうため計算効率が悪い．

SS 法は周回積分を利用して，複素平面上で指定した閉曲線内部の固有値とそれに対応する固有ベクトルを求める方法である．この方法は並列性が高く，大規模並列環境で性能を発揮することが期待できる．並列環境向けに SS 法を実装したソフトウェアとして “z-Pares” が提供されている [6]．また，SS 法に対して様々な拡張手法 [7], [8], [9], [10] が提案されており，その中に多重連結領域上の固有値を求める拡張方法 [11] がある．この拡張は対象とする固有値問題を，円環領域の固有値のみを含む小規模な固有値問題に帰着させるため，円周近傍の固有対を求める問題に対して有効な方法である．しかし円周付近の固有値数が非常に多い場合，必要な部分空間サイズが増大してしまうことで，計算コストが増大してしまうという問題や，得られる固有対の精度が悪くなるという問題が生じる．

本論文ではそのような問題に対して，実数区間の固有対を求める SS 法の拡張方法を応用し，円周を分割した円弧領域の固有対を求める拡張方法を提案する．提案法により，比較的少ない部分空間サイズで高精度な近似固有対が得られ，計算コストが減少すると期待される．

本論文の構成は以下のとおりである．2 章で SS 法および多重連結領域に対する拡張について説明する．3 章では従来法の問題点および提案法について説明する．4 章で数値実験を行い，その結果について考察し，提案法の有効性を確認する．最後に 5 章でまとめを行う．

2. 多重連結領域に対する SS 法

本章では，Rayleigh-Ritz 型 SS 法 [8] および多重連結領域に対する SS 法の拡張 [11] について説明する．本章では簡単化のために一般化固有値問題 $T(\lambda) = \lambda B - A$ を扱う．

2.1 SS 法

一般化固有値問題 $(\lambda B - A)\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$ について，複素平面上の指定した Jordan 閉曲線を Γ とし，その内部の領域を G とし，G 上の固有値数を m とする．SS 法は固有値 $\lambda_i \in G$ およびそれに対応する固有ベクトル $\boldsymbol{x}_i$ を求める解法である．その手順は大きく 2 つのステップに分けられる．まず固有ベクトルに対するフィルタリングによる部分空間の作成を行い，次にその部分空間を利用した近似固有対の抽出を行う．SS 法には Block Hankel matrix を利用するタイプ [7] と Rayleigh-Ritz procedure を利用するタイプ [8] があり，それらの方法は近似固有対の抽出がそれぞれ異なるが，部分空間作成の方法は同様となる．

まず部分空間作成について述べる．行列 $A, B \in \mathbb{C}^{n\times n}$ について，SS 法では次の周回積分を用いる．

$$S_k = \frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \oint_\Gamma z^k \left(zB - A\right)^{-1} BV \mathrm{d}z,\ k = 0, 1, \ldots, M-1.$$

ここで，$zB - A$ は任意の $z \in \Gamma$ で正則であるとする．$V \in \mathbb{C}^{n\times L}$ は互いに線形独立な L 本の列ベクトルを持つ行列であり，M はモーメント次数である．ここで，部分空間サイズ LM は，$LM \geq m$ となるように設定する必要がある．行列束 $\mu B - A$ は対角化可能である，つまり任意の $\mu \in \mathbb{C}$ に対して次の式を満たす正則な行列 $X = (\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_n)$ および $Y = (\boldsymbol{y}_1, \boldsymbol{y}_2, \ldots, \boldsymbol{y}_n)$ が存在する場合を考える．

$$Y^{\mathrm{H}}(\mu B - A)X = (\mu I - \Lambda)$$

ここで，$\Lambda = \mathrm{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n)$ とする．このとき，S_k は留数定理より次の式で表すことができる [8]．

$$S_k = \sum_{i=1}^{n} f_k(\lambda_i)\boldsymbol{x}_i \boldsymbol{y}_i^{\mathrm{H}} BV.$$

ここで，$\boldsymbol{y}_i$ および $\boldsymbol{x}_i$ はそれぞれ行列束 $\mu B - A$ の左固有ベクトルおよび右固有ベクトルであり，$f_k(\lambda_i)$ は次のフィルタ関数である．

$$f_k(x) = \frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \oint_\Gamma \frac{z^k}{z - x} \mathrm{d}z = \begin{cases} x^k, & (x \in G) \\ 0, & (\text{otherwise}) \end{cases}.$$

これにより，SS 法の周回積分は G 上の固有値に対する固有ベクトルを透過し，G 外部の固有ベクトルを遮断するフィルタリングを行っていると見なせる．

周回積分の計算は解析的に行えないため，実際には Γ 上に N 個配置された分点 z_j および重み w_j を用いた次の数値積分により近似的に計算する．

$$S_k \approx \hat{S}_k = \sum_{j=1}^{N} w_j \zeta_j^k X_j. \tag{1}$$

ここで，ζ_j は正規化された積分点であり，X_j は複数右辺ベクトルを持つ線形方程式

$$(z_j B - A)\, X_j = BV \tag{2}$$

の解である．これにより，フィルタ関数 $f_k(x)$ は次の式で近似される．

$$f_k(x) \approx \hat{f}(x) x^k = \sum_{j=1}^{N} \frac{w_j}{z_j - x} x^k. \tag{3}$$

本論文では閉曲線 Γ を中心 γ，半径 ρ とした円領域型を用いる．このとき z_j, ζ_j, w_j は次の式で表される．

$$z_j = \gamma + \rho \mathrm{e}^{\frac{2\pi \mathrm{i}}{N}(j+\frac{1}{2})},\ \zeta_j = \frac{z_j - \gamma}{\rho},\ w_j = \frac{z_j - \gamma}{\rho N}.$$

円領域型のフィルタ関数 $\hat{f}(x)$ は G 上では 1 付近で，G の端から徐々に 0 に減少していく関数となる [8], [12].

SS 法では式 (1) で表される数値積分の積分点 N および ζ_j，z_j，w_j を変化させることで，式 (3) のフィルタ関数 $\hat{f}(x)$ が変化する．フィルタ関数が変化することにより $\hat{S}_k$ に含まれる固有ベクトル成分が変化する．多重連結領域に対する SS 法の拡張 [11] などは N，ζ_j，z_j および w_j を変化させ，求めたい固有ベクトル成分を透過させるフィルタ関数を作成していると見なせる．

次に部分空間を利用した近似固有対の抽出について述べる．Rayleigh-Ritz 型 SS 法 [8] では $\hat{S}_k$ を列方向に結合した行列 $S = [\hat{S}_0, \hat{S}_1, \ldots, \hat{S}_{M-1}] \in \mathbb{C}^{n\times(LM)}$ に対し特異値分解

$$S = Q\Sigma W^{\mathrm{H}} \tag{4}$$

を行い，ユニタリ行列 $Q = (\boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_2, \ldots, \boldsymbol{q}_{LM}) \in \mathbb{C}^{n\times(LM)}$ および対角要素に特異値を持つ次の行列を作成する．

$$\Sigma = \mathrm{diag}(\sigma_1, \sigma_2, \ldots, \sigma_{LM}), \quad \sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \ldots \geq \sigma_{LM}$$

得られた特異値の中で，ある閾値 δ よりも大きい特異値の数を K とし，小さい特異値に対応するベクトルを取り除いた行列 $\hat{Q} = (\boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_2, \ldots, \boldsymbol{q}_K) \in \mathbb{C}^{n\times K}$ を作成する．$\hat{Q}$ を用いて小規模な一般化固有値問題

$$(\alpha_i \hat{Q}^{\mathrm{H}} B \hat{Q} - \hat{Q}^{\mathrm{H}} A \hat{Q})\boldsymbol{u}_i = \boldsymbol{0} \tag{5}$$

の固有対 $(\alpha_i, \boldsymbol{u}_i)$ を求める．ここで，$\hat{Q}^{\mathrm{H}} A \hat{Q}, \hat{Q}^{\mathrm{H}} B \hat{Q} \in \mathbb{C}^{K\times K}$ である．得られた K 個の近似固有対には領域 G 外部の固有対も含まれているため，それらを取り除くことで領域 G 上の近似固有対 $(\lambda_i, \boldsymbol{x}_i) = (\alpha_i, \hat{Q}\boldsymbol{u}_i)$ $(i = 1, 2, \ldots, \tilde{m})$ が得られる．ここで，$m \leq \tilde{m} \leq K$ である．$\tilde{m}$ 個の固有対の中には実際には存在しない固有対が数個現れることがある．実際には存在しない固有対は残差の値が悪いため，残差を確認することで取り除くことが可能である．

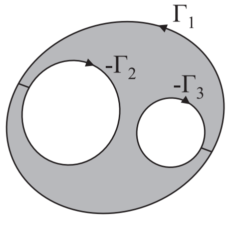

図 1　多重連結領域の簡略図
Fig. 1　Simplified schematic of a multiply connected region.

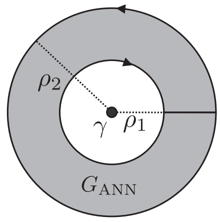

図 2　円環領域の簡略図
Fig. 2　Simplified schematic of an annulus region.

2.2　多重連結領域に対する SS 法の拡張

図 1 に示すように，Γ_d $(d = 1, 2, \ldots, D)$ を複素平面上の Jordan 閉曲線とし，Γ_1 内部の領域から Γ_d $(d = 2, 3, \ldots, D)$ 内部の領域を取り除いた多重連結領域を設定する．モーメント行列 $S_{k,d}$ を次のように定義する．

$$S_{k,d} = \frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \oint_{\Gamma_d} z^k (zB - A)^{-1} BV \mathrm{d}z, \quad \begin{array}{l} k = 0, \ldots, M-1 \\ d = 1, \ldots, D \end{array}.$$

作成した $S_{k,\ell}$ を用いて次の S_k を作成する．

$$S_k = S_{k,1} - \sum_{d=2}^{D} S_{k,d}.$$

得られた S_k を用いて，前節で述べた部分空間を利用した近似固有対の抽出を行うことで，多重連結領域上の固有対を求めることができる．本論文では円周近傍の固有対を求めるため，**図 2** に示すように $D = 2$ とし，閉曲線 Γ_1 を中心 γ，半径 ρ_1，閉曲線 Γ_2 を中心 γ，半径 ρ_2 とした同心円の円環領域 G_{ANN} を用いる．このとき，2 つの閉曲線を用いるため，積分点数の総数は $N' = 2N$ となる．また，$\hat{S}_k$ は次のように表せる．

$$\hat{S}_k = \sum_{j=1}^{2N} w_j \zeta_j^k X_j, \quad (z_j B - A)\, X_j = BV.$$

このとき $\zeta_j = \mathrm{e}^{\frac{2\pi \mathrm{i}}{N}(j+\frac{1}{2})}$ であり，z_j，w_j は次の式のようになる．

$$w_j = \begin{cases} \frac{\zeta_j}{N},\ (j \leq N) \\ -\frac{\zeta_j}{N}\ (j \geq N+1) \end{cases},$$

$$z_j = \begin{cases} \gamma + \rho_1 \zeta_j\ (j \leq N) \\ \gamma + \rho_2 \zeta_j\ (j \geq N+1) \end{cases}.$$

この式により，円領域型の拡張は，式 (1) の数値積分の積分点 N，ζ_j，z_j および w_j を変化させたと見ることができる．

3. SS 法の円弧領域への拡張

3.1 円環領域型 SS 法の問題点

前章で示したSS法について，計算のコストが高い部分は式 (2) の線形方程式の求解，式 (4) の特異値分解，式 (5) の小規模固有値問題の求解である．これらの計算コストは積分点数 N，右辺ベクトル数 L およびモーメント次数 M によって決まる．また，前述したように部分空間サイズ LM は，$LM \geq m$ となるように設定する必要がある．これは円環領域型でも同様である．そのため円環領域 G_{ANN} 上に多数の固有値が存在している場合，L および M を大きく設定しなければならず，これにより特異値分解および小規模固有値問題の求解の計算コストが大きくなるという問題が発生する．

式 (1) に示すように，$\hat{S}_k$ は数値積分による近似計算によって求められているため，$\hat{S}_k$ には G 上の固有値に対応する固有ベクトル成分だけでなく，G 周辺の固有ベクトル成分も含まれる．円環領域型の場合は G_{ANN} 付近の固有ベクトル成分が含まれる．そのため G_{ANN} 付近に固有値が多数存在している場合，$\hat{S}_k$ に G_{ANN} 外部の固有値に対応する固有ベクトル成分が多く含まれ，得られる近似固有対の精度が悪くなるという問題が発生する．

精度を改善させる方法として，LM を大きくする，N を増やし高精度な数値積分を行うなどがあげられる．L の値を増やした場合，線形方程式の求解および特異値分解にかかる計算コストは増加するが，近似固有対の精度は改善される．M の値を増やした場合，特異値分解かかる計算コストのみが増加するため，L の増加よりも計算コストの増加を抑えることができる．しかし $M > N$ のとき作成される行列 $\hat{S}_k$ が線形従属となるため，$M \leq N$ とする必要がある [13]．また，M を増加させることでフィルタ関数の減衰が弱くなるため，領域外部の固有ベクトル成分がより多く含まれる [7]．そのため，M の増加による近似固有対の精度の改善の度合いは，L の増加によるものと比べて弱い．以上のことから，近似固有対の精度を改善するためには M を固定して L を変更するのがよいと考えられるが，L の増加によって，主要部分の計算コストが大きくなる．また，N を増やした場合，線形方程式の求解回数が多くなる．

以上のことから，円環領域型は，円環領域内部に固有値が多数存在しているとき $LM > m$ から LM を大きく設定しなければならないという問題がある．また，円環領域の近くに固有値が多数存在しているとき解の精度が悪くなるという問題がある．本章ではそのような問題に対して，円弧領域に対するSS法の拡張方法を提案する．提案法では，円弧近傍の固有ベクトル成分を透過させるフィルタ関数を作成するために，実数区間の固有ベクトル成分を透過させるフィルタ関数を応用する．

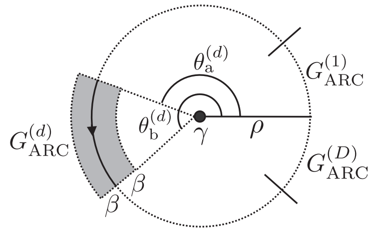

図 3　円弧領域の簡略図

Fig. 3 Simplified schematic of arcuate region.

3.2 実数区間に対する SS 法の拡張

文献 [12], [14] では，実軸上に配置した Chebyshev 点によってある実数区間内の固有ベクトル成分を透過させるフィルタ関数を作成し，それを用いて固有対を求める方法を提案している．実数区間 $[-1, 1]$ 上の固有対を求めるとしたとき，ζ_j，z_j，w_j を以下のように設定する [14]．

$$z_j = \zeta_j = \cos\left(\frac{2j-1}{2N}\pi\right), \quad w_j = \frac{T_{N-1}(\zeta_j)}{N}. \tag{6}$$

ここで，$T_k(x)$ は以下に定義される第 1 種 Chebyshev 多項式であり，ζ_j および z_j は $T_N(x)$ の零点である．

$$T_k(x) = \begin{cases} 2xT_{k-1}(x) - T_{k-2}(x), & (k \geq 2) \\ x, & (k = 1) \\ 1, & (k = 0) \end{cases}.$$

これによりフィルタ関数は $\hat{f}(x) = 1/T_N(x)$ で表され，実数区間 $[-1, 1]$ 外部では 0 に減衰する関数となる [12]．

この方法は多重連結領域に対する SS 法の拡張と同様に，SS 法の式 (1) の N，ζ_j，z_j および w_j を変化させ，求めたい区間の固有ベクトル成分を透過させるフィルタ関数を作成していると見なすことができる．そのため，式 (1) の ζ_j，z_j，w_j に式 (6) の値を用いることで，$\hat{S}_k$ には実数区間 $[-1, 1]$ 内部の固有ベクトル成分が多く含まれる．得られた $\hat{S}_k$ から前章と同様の手順で近似固有対の抽出を行うことで，実数区間 $[-1, 1]$ 内の近似固有対を得ることができる．そのため，実軸上に配置した Chebyshev 点を用いたフィルタ関数を用いることで，SS 法を実数区間へ拡張することができる．提案法では実数区間に対する SS 法の拡張を円弧領域に応用する．

3.3 円弧領域に対する SS 法の拡張

複素平面上の中心 γ，半径 ρ の円の円周近傍の固有対を求めるとする．**図 3** に示すように，円周を指定した角度

$$\theta_{\mathrm{a}}^{(d)}, \theta_{\mathrm{b}}^{(d)}, \quad (0 \leq \theta_{\mathrm{a}}^{(d)} < \theta_{\mathrm{b}}^{(d)} < 2\pi,\ d = 1, 2, \ldots, D)$$

によって D 個の円弧に分割し，円弧の内側と外側に幅 $\beta \ll \rho$ を与えた領域を $G_{\mathrm{ARC}}^{(d)}$ とする．このとき積分点 z_j を以下のように設定する．

$$z_j = \gamma + \rho e^{i\theta_j}, \quad \theta_j = \theta_{\mathrm{a}}^{(d)} + (\theta_{\mathrm{b}}^{(d)} - \theta_{\mathrm{a}}^{(d)})\frac{\zeta_j + 1}{2}. \tag{7}$$

Algorithm of SS method for an arcuate region
Input: $A, B \in \mathbb{C}^{n\times n}, V \in \mathbb{C}^{n\times L}, \gamma, \rho, N, M, \delta, \mathrm{tol}, \theta_{\mathrm{a}}^{(d)}, \theta_{\mathrm{b}}^{(d)}, \beta$
Output: $(\lambda_i, \boldsymbol{x}_i)$ for $i = 1, 2, \ldots, \tilde{m}'$

1: **Set** ζ_j, w_j, z_j by Eq.(6) and Eq.(7)
2: **Solve** $(z_jB - A)\, X_j = BV$ at each quadrature point
3: **Compute** $\hat{S}_k = \sum_{j=1}^{N} w_j \zeta_j^k X_j$ for $k = 0, 1, \ldots, M-1$
4: **Perform** a singular value decomposition of $S = (\hat{S}_0, \hat{S}_1, \ldots, \hat{S}_{M-1})$: $S = Q\Sigma W^{\mathrm{H}}$ where $W \in \mathbb{C}^{LM\times LM}$ $Q = (\boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_2, \ldots, \boldsymbol{q}_{LM}) \in \mathbb{C}^{n\times LM}, \Sigma = \mathrm{diag}(\sigma_1, \sigma_2, \ldots, \sigma_{LM})$
5: **Omit** small singular value components $\sigma_j < \delta\sigma_1$ for $j = K, K+1, \ldots, LM$, where $K < LM$ so that $\hat{Q} = (\boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_2, \ldots, \boldsymbol{q}_K)$
6: **Compute** eigenpairs $(\alpha_1, \boldsymbol{u}_1), (\alpha_2, \boldsymbol{u}_2), \ldots, (\alpha_K, \boldsymbol{u}_K)$ of the projected matrix $\hat{Q}^{\mathrm{H}} T(z) \hat{Q} \in \mathbb{C}^{K\times K}$
7: **Compute** $\lambda_i = \alpha_i,\ \boldsymbol{x}_i = \hat{Q}\boldsymbol{u}_i$ for $i = 1, 2, \ldots, K$
8: **Select** eigenpairs inside of the region $\lambda_i \in G_{\mathrm{ARC}}^{(d)}$ for $i = 1, 2, \ldots, \tilde{m}$
9: **Omit** spurious eigenpairs $\|(\lambda_i B - A)\boldsymbol{x}_i\|_2 >$ tol for $i = \tilde{m}', \tilde{m}'+1, \ldots, \tilde{m}$, where $, \tilde{m}' \leq \tilde{m}$

図 4　1 つの円弧領域に対する SS 法の拡張アルゴリズム
Fig. 4　Algorithm of SS method for an arcuate region.

ζ_j および w_j は式 (6) と同じものを用いる．設定した ζ_j，z_j および w_j を用いて式 (1) を計算することにより，実数区間 $[-1, 1]$ 上の積分点が円弧線上にマッピングされる．これにより，$G_{\mathrm{ARC}}^{(d)}$ 外部では 0 に減衰するフィルタ関数 $\hat{f}(x)$ が作成され，$\hat{S}_k$ は $G_{\mathrm{ARC}}^{(d)}$ 付近の固有ベクトル成分が多く含まれる．得られた $\hat{S}_k$ を用いて Rayleigh-Ritz 型 SS 法と同様の手順で近似固有対の抽出を行うことで，$G_{\mathrm{ARC}}^{(d)}$ 上の固有対が得られる．**図 4** に提案法のアルゴリズムを示す．

円環領域型のフィルタ関数 $\hat{f}(x)$ は円環領域 G_{ANN} 外部で減衰する関数となるのに対して，提案法のフィルタ関数は γ，ρ，$\theta_{\mathrm{a}}^{(d)}$ および $\theta_{\mathrm{b}}^{(d)}$ によって積分点 z_j が円弧線上に配置されるため，円弧線上から離れていくにつれて減衰する関数となる．SS 法で得られる固有対の精度は固有値のフィルタ関数値に依存する [15]．これは提案法でも同様である．そのため，β を大きく設定した場合，得られる固有対は円弧上から離れていくにつれて精度は悪くなる．本論文では円周上および円周にかなり近い固有対を求めることを想定しているため，β は半径 ρ に対して比較的小さい値を設定する．

提案法で作成する積分点 z_j と固有値が完全に一致した場合は数値破綻が起こる．また，z_j が固有値と限りなく近い場合，その固有値に対応する固有ベクトル成分が $\hat{S}_k$ に多く含まれるため，他の固有対の精度に影響を及ぼす．この問題に対しては，円弧の半径 ρ に微小な値を加えて z_j をずらすことで，円周上の z_j と固有値は一致しなくなる．ただし前述したように，z_j と求めたい固有値が大きく離れる場合，近似固有対の精度が悪くなる．また，領域 $G_{\mathrm{ARC}}^{(d)}$ の近くに固有値が密集している場合，$\hat{S}_k$ に領域外部の固有ベクトル成分が含まれるため，近似解の精度が悪くなる可能性がある．これに対して固有値が密集している区間を細かく分割することで，領域外部の固有ベクトル成分が小さくなり，近似解の精度が改善される．

非線形固有値問題 $T(\lambda)\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$ の場合において固有対を求める解法として，非線形固有値問題に対する SS 法 [9], [10] が提案されている．この方法は，一般化固有値問題に対する SS 法と同様に，求めたい固有値に対する固有ベクトル成分を多く含む行列 $\hat{S}_k$ を作成し，その行列から求めたい固有対を計算する方法である．$\hat{S}_k$ は任意の領域 G において行列値関数 $T(\lambda)$ が解析的であるという条件により，次の式から得られる [9], [10]．

$$\hat{S}_k = \sum_{j=1}^{N} w_j \zeta_j^k X_j, \qquad T(z_j)\, X_j = V.$$

ここで $\hat{S}_k$ はフィルタ関数 $\hat{f}_k(x)$ に固有ベクトル成分を掛けたものを足しあわせた形となる [10]．そのため一般化固有値問題に対する SS 法と同様に，フィルタ関数 $\hat{f}_k(x)$ を変化させることで $\hat{S}_k$ に含まれる固有ベクトル成分が変化する．提案法では，一般化固有値問題に対する SS 法のフィルタ関数を変化させ，円弧近傍の固有ベクトル成分が多く含まれる $\hat{S}_k$ を作成している．そのため，非線形固有値問題に対する SS 法で用いられる領域 G に $G_{\mathrm{ARC}}^{(d)}$ を用い，ζ_j，z_j および w_j の計算に式 (6) および (7) を用いてフィルタ関数を変化させることで，$\hat{S}_k$ には $G_{\mathrm{ARC}}^{(d)}$ 付近の固有ベクトル成分が多く含まれる．以上のことから，非線形固有値問題に対する SS 法に対しても提案法の拡張を行うことができる．

円環領域および提案法の計算コストについて考察する．提案法は円環領域 G_{ANN} を複数の円弧領域 $G_{\mathrm{ARC}}^{(d)}$ に分割する．それにより，$G_{\mathrm{ARC}}^{(d)}$ 上の固有値数 m は G_{ANN} よりも小さくなるため，G_{ANN} 上に多数の固有値が存在している場合であっても，L および M を大きく設定する必要がなくなる．また，提案法のフィルタ関数は円弧上から離れていくにつれて減衰する関数となることから，$\hat{S}_k$ に含まれる固有ベクトル成分が少なくなるため，比較的少ない L および M の値で精度の高い解が得られることが期待できる．それにより，SS 法の主要部分の計算コストが少なくなることも期待される．しかし提案法は D 個の領域を設定し，各領域で SS 法を行うため積分点数 N の総数は $N' = DN$ となる．円環領域型の積分点数の総数は $N' = 2N$ であるため，$D > 2$ のとき提案法の積分点数の総数が円環領域型よりも多くなることから，式 (2) の計算回数が多くなると予想される．この問題について，SS 法の並列計算を考える．

SS 法で現れる式 (2) は積分点 z_j ごとに独立な計算を行うことができる．そのため，SS 法を並列計算環境で実行する場合，各計算リソースに積分点を割り当て，式 (2) を計算する並列計算が考えられる．並列環境で SS 法を行うソフトウェアである “z-Pares” では，以上の並列性を利用した実装を行っている [6]．このとき十分な計算リソースが

ある場合，各計算リソースで扱う積分点数は 1 つとなるため，式 (2) の求解にかかる計算コストは，1 つの線形方程式を求解するコストと同程度となることが予想される．以上のことから，十分な計算リソースを用いて提案法の並列計算を行う場合には，N' が増えても計算リソースごとの計算コストは大きく増加しないと予想される．

4.　数値実験

本章ではいくつかの数値実験によって，提案法の有効性を検証する．数値実験は，MATLAB 8.3 を用いた．

4.1　実験 1：各解法のフィルタ関数

数値実験 1 では，提案法が円弧領域の固有ベクトル成分を透過し，領域外の固有ベクトル成分を遮断するフィルタ関数を作成していることを確認する．各固有値問題に対して領域を設定し，積分点数の総数を $N' = 16, 32, 64$ と変化させ，円領域型，円環領域型および提案法のフィルタ関数 $\hat{f}(x)$ の変化を調べた．各解法のパラメータを**表 1** に示す．

図 5，**図 6** および**図 7** に実数軸上での各解法のフィルタ関数を示す．横軸は実数軸，縦軸はフィルタ関数の絶対値 $|\hat{f}(x)|$ を表している．Circle，Annulus，Arc はそれぞれ，円領域型，円環領域型，提案法のフィルタ関数を示しており，点線は中心 0，半径 1 の区間を表している．円領域型は実数部 $[-1, 1]$ の区間で $|\hat{f}(x)| \approx 1$ となるフィルタ関数を作成しており，円環領域型は実数部 -1 および 1 でのみ $|\hat{f}(x)| \approx 1$ となるフィルタ関数を作成している．そして提案法では，実数部が -1 側の円弧上 $|\hat{f}(x)| \approx 1$ となるフィルタ関数が作成されている．すべての解法において，積分点数 N を増やすことにより，領域外では早く 0 に減衰していることが分かる．特に，提案法のフィルタ関数は -1 外部で円環領域型よりも早く減衰しており，領域外部の固有ベクトル成分を円環領域型より遮断していることが分かる．

図 8 および**図 9** に円環領域型および提案法の複素平面上でのフィルタ関数を示す．横軸は実数軸，縦軸は虚数軸を表しており，各複素平面上でのフィルタ関数の絶対値 $|\hat{f}(x)|$ を色で表している．Γ は中心 0，半径 1 の円を表している．フィルタ関数は，円環領域型では円周付近で $|\hat{f}(x)| \approx 1$ になっているのに対して，提案法では，指定した円弧上で $|\hat{f}(x)| \approx 1$ になり，外部では減衰していることが分かる．以上のことから，提案法のフィルタ関数は円弧領域付近の固有ベクトル成分のみを透過させていることが

表 1　数値実験 1 でのパラメータ

Table 1　Parameters in numerical experiment 1.

円領域型 (γ, ρ)	円環領域型 (γ, ρ_1, ρ_2)	提案法 $(\gamma, \rho, [\theta_a^{(1)}, \theta_b^{(1)}])$
$(0, 1)$	$(0, 1.01, 0.99)$	$(0, 1, [\pi/2, 3\pi/2])$

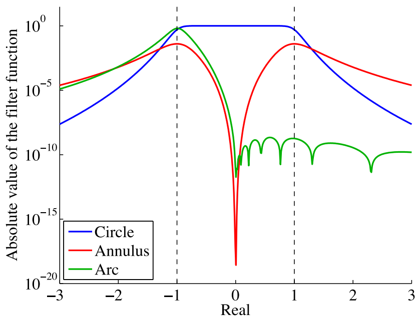

図 5　$N = 16$ での各解法のフィルタ関数

Fig. 5　Absolute values of filter function in each algorithm ($N = 16$).

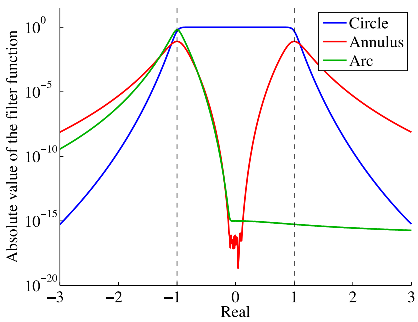

図 6　$N = 32$ での各解法のフィルタ関数

Fig. 6　Absolute values of filter function in each algorithm ($N = 32$).

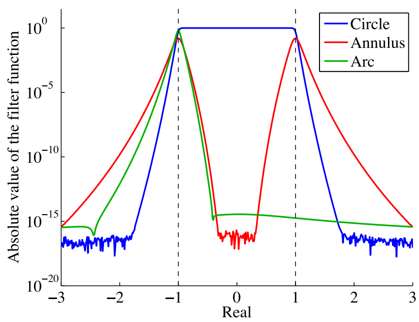

図 7　$N = 64$ での各解法のフィルタ関数

Fig. 7　Absolute values of filter function in each algorithm ($N = 64$).

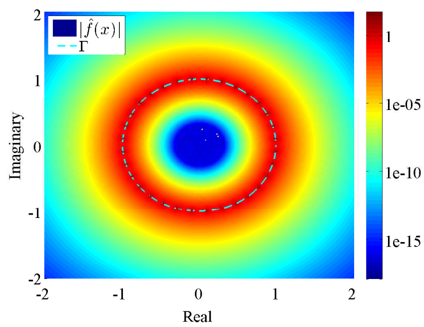

図 8　複素平面上での円環領域型のフィルタ関数（$N = 32$）

Fig. 8　Absolute values of filter function of annulus type on the complex plane ($N = 32$).

分かる．

4.2 実験 2：同計算量での各解法の解の精度の変化

数値実験 2 では，提案法が円環領域型よりも少ない計算コストで，高精度な解が得られることを確認する．右辺ベクトル数 L を変化させて，円環領域型および提案法のそれぞれを実行し，得られる固有対の精度がどのように変化するのかを調べた．**表 2** に実験で用いた固有値問題および本実験で求める固有値の数を示す．n は行列の次元数で m は本数値実験で求める固有値の数である．各行列について，Sample は複素平面上の中心 0，半径 1 の円周上に等間隔においた 30 点と，複素平面上の中心 0，半径 0.8 の円内の乱数 2970 点を要素に持つ対角行列である．OLM5000 は Matrix market [16] の行列 “OLM5000” である．SIGN2 は NLEVP [17] の行列 “SIGN2” である．**図 10** に各行列の複素平面上での固有値分布を示す．横軸が実数軸，縦軸が虚数軸を表しており，青点が固有値を示しており，赤丸が本数値実験で求める固有値を示している．OLM5000 の固有値の分布は MATLAB の関数である `eig` を用いて求め，SIGN2 の固有値の分布は MATLAB の関数である `polyeig` を用いて求めた．対象とする行列に対する円環領域型および提案法のパラメータを**表 3** に示す．領域は，各行列の円周近傍の固有値を含むように設定した．円環領域型および提案法の線形方程式の計算回数の総数 $N' \times L$ を同じにするため，本実験の提案法では 2 つの円弧領域を設定した．表 3 以外のパラメータは，$N = 32$，$M = 8$，$\delta = 10^{-12}$ とした．線形方程式の求解および $V \in \mathbb{C}^{n \times L}$ はそれぞれ MATLAB の関数である `mldivide` および `randn` を用いた．

実験結果を**表 4**，**表 5** および**表 6** に示す．$\tilde{m}$ は得られた領域内の固有値数を示しており，max(residual) は得られた解の残差 $\|T(\lambda_i)\boldsymbol{x}_i\|_2$ の最大値を示している．表 4 から，円環領域型は $L = 32$ 以下では得られる固有値数が実際の固有値数よりも少ないことが分かる．これは G_{ANN} 周辺の固有ベクトル成分が $\hat{S}_k$ に含まれたことにより，部分空間サイズ LM が不足してしまったためであると考えられる．どの L においても解の精度が円環領域型よりも提案

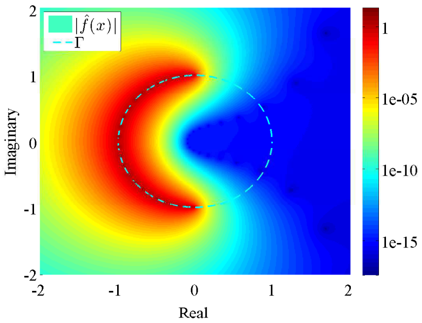

図 9　複素平面上での提案法のフィルタ関数（$N = 32$）
Fig. 9 Absolute values of filter function in the proposed method on the complex plane ($N = 32$).

表 2　数値実験で用いた固有値問題
Table 2 Eigenvalue problems used in numerical experiments.

	行列タイプ	固有値問題	n	m
Sample	複素対称	標準固有値問題	3000	30
OLM5000	実非対称	標準固有値問題	5000	26
SIGN2	エルミート	2 次多項式固有値問題	301	34

表 3　数値実験 2 でのパラメータ
Table 3 Parameters in numerical experiment 2.

	円環領域型 (γ, ρ_1, ρ_2)	提案法 $(\gamma, \rho, [\theta_{\mathrm{a}}^{(1)}, \theta_{\mathrm{b}}^{(1)}], [\theta_{\mathrm{a}}^{(2)}, \theta_{\mathrm{b}}^{(2)}], \beta)$
Sample	$(0, 1.01, 0.99)$	$(0, 1, [0, \pi], [\pi, 2\pi], 0.01)$
OLM500	$(-5, 6.7, 6.5)$	$(-5, 6.6, [0, \pi], [\pi, 2\pi], 0.1)$
SIGN2	$(0, 2, 1.9)$	$(0, 1.95, [0, \pi], [\pi, 2\pi], 0.1)$

表 4　固有対の精度の変化（Sample）
Table 4 Accuracy of eigenpairs by varying parameter L (Sample).

L	円環領域型 $\tilde{m}$	円環領域型 max(residual)	提案法 $\tilde{m}$	提案法 max(residual)
4	5	9.0×10^{-2}	30	1.9×10^{-2}
8	10	8.5×10^{-2}	30	5.5×10^{-3}
16	16	9.0×10^{-2}	30	1.7×10^{-3}
32	30	1.8×10^{-2}	30	2.3×10^{-4}
64	30	2.0×10^{-3}	30	4.2×10^{-6}
128	30	2.9×10^{-4}	30	2.0×10^{-9}

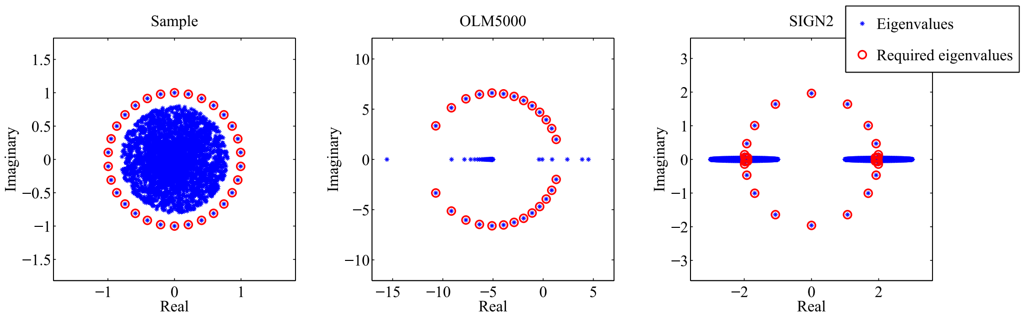

図 10　各固有値問題の固有値分布
Fig. 10 Distribution of eigenvalues of each eigenvalue problems.

表 5　固有対の精度の変化（OLM5000）
Table 5　Accuracy of eigenpairs by varying parameter L (OLM5000).

L	円環領域型		提案法	
	$\tilde{m}$	max(residual)	$\tilde{m}$	max(residual)
4	22	2.6×10^{-1}	26	4.7×10^{-7}
8	26	1.3×10^{-5}	26	2.1×10^{-8}
16	26	4.4×10^{-9}	26	1.0×10^{-8}
32	26	4.4×10^{-9}	26	8.3×10^{-9}
64	26	4.2×10^{-9}	26	6.5×10^{-9}
128	26	3.9×10^{-9}	26	6.1×10^{-9}

表 6　固有対の精度の変化（SIGN2）
Table 6　Accuracy of eigenpairs by varying parameter L (SIGN2).

L	円環領域型		提案法	
	$\tilde{m}$	max(residual)	$\tilde{m}$	max(residual)
4	14	9.2×10^{-1}	39	3.1×10^{-1}
8	34	9.6×10^{-1}	33	4.6×10^{-1}
16	30	9.8×10^{-1}	34	1.6×10^{-3}
32	34	9.9×10^{-3}	34	1.3×10^{-5}
64	34	5.5×10^{-13}	34	7.9×10^{-13}
128	34	7.7×10^{-13}	34	1.2×10^{-12}

法のほうが高い．また，提案法の右辺ベクトル数が L のときの精度に対して，円環領域型が右辺ベクトル数が $2L$ のときの精度より高くなっている結果が存在する．これは数値実験 1 で示したように，提案法では分割した区間外部の固有ベクトル成分を円環領域型より遮断しているため，$\hat{S}_k$ に含まれる領域外部の固有ベクトル成分が小さくなり，精度が高くなったと考えられる．表 5 からも，どの L においても解の精度が円環領域型よりも提案法のほうが高いことが分かる．表 6 から，円環領域型，提案法ともに $L = 64$ 以上でないと十分な精度の解が得られていないことが分かる．これは，どちらの解法においても領域周辺の固有ベクトル成分に対して，LM が少ないためであると考えられる．また，$L = 4$ のとき提案法の固有値数が実際の数を上回っている．これは 2.1 節で示したように $\tilde{m}$ 個の中に実際には存在しない固有対が現れることが原因である．そのため提案法の固有値数が実際の数よりも上回ったと考えられる．以上のことから，提案法は円環領域型と比べて，同程度の計算量で円環領域型より高精度な解が得られていることが分かる．

4.3　実験 3：領域数の変化による部分空間サイズの変化

数値実験 3 では，提案法が円弧領域数 D を増やすことで，少ない部分空間サイズ LM で高精度な解が得られることを確認する．提案法の円弧領域数を多くした場合，十分な精度の解を得るために必要な LM がどのように変化するのか調べた．対象とする行列は前節と同じものを用いた．円弧領域数を $D = 2, 4, 6, 8, 10$ と変化させ，各円弧領域 $G^{(d)}_{\mathrm{ARC}}$，$d = 1, 2, \ldots, D$ で提案法を行い，得られた解の残差 $\|T(\lambda_i)\boldsymbol{x}_i\|_2$ がすべて指定した残差 α 以下になる最小の部分空間サイズを調べた．Sample，OLM5000 は $\alpha = 10^{-8}$，SIGN2 は $\alpha = 10^{-6}$ に設定した．各領域の中心 γ，半径 ρ は前節の表 3 と同じものを用いた．円周は等間隔に D 分割し，θ_{a}，θ_{b} は以下の式で与えた．

$$\theta^{(d)}_{\mathrm{a}} = \frac{2\pi(d-1)}{D},\ \theta^{(d)}_{\mathrm{b}} = \frac{2\pi d}{D},\quad d = 1, 2, \ldots, D.$$

その他のパラメータについて，$M = 1$，$\delta = 10^{-12}$ とし，$N = 16, 32, 64$ のそれぞれで実験を行った．

実験結果を**図 11**，**図 12** および**図 13** に示す．横軸は円弧領域数 D を示しており，縦軸は精度 α の近似固有対を得るために必要な LM を示している．実行結果から積

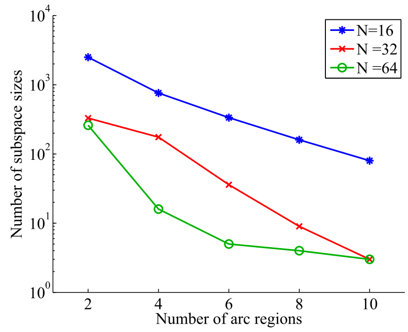

図 11　D の変化による部分空間サイズ LM の変化（Sample）
Fig. 11　Subspace sizes by varying parameter D (Sample).

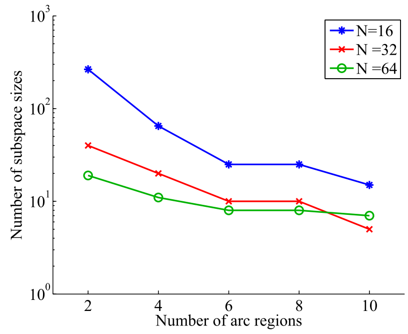

図 12　D の変化による部分空間サイズ LM の変化（OLM5000）
Fig. 12　Subspace sizes by varying parameter D (OLM5000).

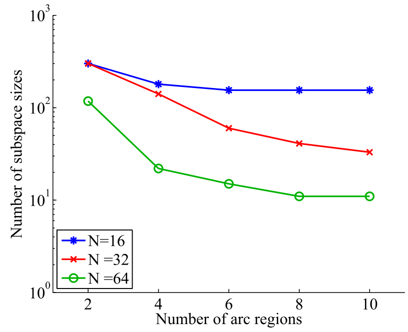

図 13　D の変化による部分空間サイズ LM の変化（SIGN2）
Fig. 13　Subspace sizes by varying parameter D (SIGN2).

分点数 N および円弧領域数 D を増やすことで，精度 α の近似固有対を得るために必要な LM が小さくなっていることが分かる．D を増やすことにより，積分点数 N の総数 $N' = DN$ は増えるため，線形方程式の計算回数は増える．しかし，十分な計算リソースがある状況で提案法の並列計算を行った場合，各計算リソースで扱う積分点数は 1 つとなるため，D を増やしても計算リソースごとの計算コストの増加は抑えることができる．以上のことから，提案法は円弧領域数を増やすことで，必要な LM を少なくすることができる．

5. まとめ

本論文では円弧領域に対する SS 法の拡張法を提案した．提案法は円周領域を複数の円弧領域に分割することで円周付近に固有値が多数存在している場合でも，高精度な解が得られることを示した．また，計算コストの面でも提案法が有効であることを示した．数値実験から，提案法が円弧領域の固有ベクトル成分を取り出すフィルタ関数となっていること，円環領域型と同計算量でより高精度な解が得られること，円弧領域数を増やすことで少ない部分空間サイズで高精度な解が得られることを確認した．

今後の課題として，積分点と固有値が限りなく近い場合に発生する解の精度の悪化の問題の改善や，提案法の並列計算での実装とその性能評価などがあげられる．

謝辞　本研究は MEXT 科研費（25104701，25286097），JSPS 科研費（26374）および CREST（ポストペタスケール高性能計算に資するシステムソフトウェア技術の創出）の助成を受けた．

参考文献

[1] Hwang, F.-N., Wei, Z.-H., Huang, T.-M. and Wang, W.: A Parallel Additive Schwarz Preconditioned Jacobi-Davidson Algorithm for Polynomial Eigenvalue Problems in Quantum Dot Simulation, *J. Comput. Phy.*, Vol.229, No.8, pp.2932–2947 (2010).

[2] Jarlebring, E., Meerbergen, K. and Michiels, W.: An Arnoldi method with structured starting vectors for the delay eigenvalue problem, *9th IFAC Workshop on Time Delay Systems*, Czech Republic, International Federation of Automatic Control, pp.57–62 (2010).

[3] Luisier, M., Schenk, A., Fichtner, W. and Klimeck, G.: Atomistic simulation of nanowires in the sp3d5s* tight-binding formalism: From boundary conditions to strain calculations, *Phys. Rev. B*, Vol.74, 205323 (2006).

[4] Saad, Y.: *Numerical Methods for Large Eigenvalue Problems, 2nd edition*, SIAM (2011).

[5] Sakurai, T. and Sugiura, H.: A projection method for generalized eigenvalue problems using numerical integration, *J. Comput. Appl. Math.*, Vol.159, pp.119–128 (2003).

[6] Futamura, Y. and Sakurai, T.: z-Pares: Parallel Eigenvalue Solver, University of Tsukuba (online), available from ⟨http://zpares.cs.tsukuba.ac.jp/⟩ (accessed 2015-03-01).

[7] Ikegami, T., Sakurai, T. and Nagashima, U.: A filter diagonalization for generalized eigenvalue problems based on the Sakurai-Sugiura projection method, *J. Comput, Appl. Math.*, Vol.233, pp.1927–1936 (2010).

[8] Ikegami, T. and Sakurai, T.: Contour integral eigensolver for non-Hermitian systems: A Rayleigh-Ritz-type approach, *Taiwanese J. Math.*, Vol.14, pp.825–836 (2010).

[9] Asakura, J., Sakurai, T., Tadano, H., Ikegami, T. and Kimura, K.: A numerical method for polynomial eigenvalue problems using contour integral, *Japan J. Indust. Appl. Math.*, Vol.27, pp.73–90 (2010).

[10] Yokota, S. and Sakurai, T.: A projection method for nonlinear eigenvalue problems using contour integrals, *JSIAM Letters*, Vol.5, pp.41–44 (2013).

[11] 宮田考史，杜　磊，曽我部知広，山本有作，張　紹良：多重連結領域の固有値問題に対する Sakurai-Sugiura 法の拡張，日本応用数理学会論文誌，Vol.19, No.4, pp.537–550 (2009).

[12] 村上　弘：レゾルベントの線形結合によるフィルタ対角化法，情報処理学会論文誌コンピューティングシステム，Vol.49, No.SIG 2(ACS 21), pp.66–87 (2008).

[13] Sakurai, T., Futamura, Y. and Sugiura, H.: Efficient parameter estimation and implementation of a contour integral-based eigensolver, *J. Algo. Comput. Tech.*, Vol.7, pp.249–269 (2013).

[14] Austin, A.P. and Trefethen, L.N.: Computing Eigenvalues of Real Symmetric Matrices with Rational Filters in Real Arithmetic, Preprint (2014), available from ⟨http://people.maths.ox.ac.uk/austin/⟩.

[15] Imakura, A., Du, L. and Sakurai, T.: Error bounds of Rayleigh-Ritz type contour integral-based eigensolver for solving generalized eigenvalue problems, *Numerical Algorithms*, (online), DOI: 10.1007/s11075-015-9987-4 (2015).

[16] NIST: Matrix Market, National Institute of Standards and Technology (online), available from ⟨http://math.nist.gov/MatrixMarket/⟩ (accessed 2015-03-01).

[17] MIMS: NLEVP: A Collection of Nonlinear Eigenvalue Problems, Manchester Institute for Mathematical Sciences (online), available from ⟨http://www.maths.manchester.ac.uk/our-research/research-groups/numerical-analysis-and-scientific-computing/numerical-analysis/software/nlevp/⟩ (accessed 2015-03-01).

前田 恭行

1988 年生．2013 年筑波大学大学院システム情報工学研究科博士前期課程修了．現在，同博士後期課程および日本学術振興会特別研究員（DC2）．日本応用数理学会学生会員．

櫻井 鉄也

1986 年名古屋大学大学院工学研究科博士前期課程修了．博士（工学）．現在，筑波大学システム情報系教授．大規模固有値問題の並列解法，方程式の反復解法，数理ソフトウェアの利用支援の研究に従事．2008 年情報処理学会 HPCS 最優秀論文賞受賞．1996 年，2007 年，2008 年日本応用数理学会論文賞受賞．日本応用数理学会，日本数学会，SIAM 各会員．