対称一般固有値問題のフィルタ作用素を用いた不変部分空間の近似構成

村 上 弘[†]

A, B が大規模な実対称行列で B は正定値である一般固有値問題 $A\mathbf{v} = \lambda B\mathbf{v}$ の固有対で固有値 λ が区間 $[a, b]$ にあるものだけを求める近似解法として，フィルタ対角化法[1),2)] がある．

恒等作用素 I とレゾルベント $\mathcal{R}(\tau) = (A - \tau B)^{-1}B$ の線形結合 $\mathcal{F} \equiv c_\infty I + \sum_{p=1}^{2n} \gamma_p \mathcal{R}(\tau_p)$ をフィルタ作用素として用いることにする．このとき固有値 λ の固有ベクトル $\mathbf{v}$ に対して $\mathcal{F}\mathbf{v} = f(\lambda)\mathbf{v}$ が成立する．ここで $f(\lambda) \equiv c_\infty + \sum_{p=1}^{2n} \gamma_p/(\lambda - \tau_p)$ はフィルタ $\mathcal{F}$ による $\mathbf{v}$ の伝達率を表す．フィルタのシフト量 τ_p と線形結合の係数 γ_p は，指定された区間 $[a, b]$ に固有値がある固有ベクトルはよく伝達するがそれ以外の固有ベクトルは強く減衰するようにうまく調整する[5)~7)]（実対称定値一般固有値問題に用いるフィルタ $\mathcal{F}$ は実作用素に限定できて，シフト量も線形結合の係数もそれぞれ n 組の複素共役対になる）．

フィルタ対角化法では，まず乱数ベクトルの組から計量 B で正規直交化された十分多い個数のベクトルの組 X を作成する．そうしてフィルタ $\mathcal{F}$ を入力ベクトルの組 X の各ベクトルに作用させて得られた出力ベクトルの組を Y とする．

従来の方法では，このフィルタ出力の組 Y を計量 B で特異値分解して，特異値が閾値以上の特異ベクトルだけを集めた組を Z とする．そうして subspace 法を用いてベクトルを $\mathrm{span}(Z)$ 内に制限した元の固有値問題の近似固有対を求める，という手順を採用してきた．しかしこの方法の問題点として，特異値の閾値の設定に明確な基準が欠けていること，および subspace 法に与える空間 $\mathrm{span}(Z)$ は元の固有値問題の不変部分空間の近似にはならないので，一般的には得られた近似固有対の中に残差のノルムが非常に大きい偽の固有対が現れることを挙げることができる．

今回の改良された新しい方法は，$\mathcal{F}$ がレゾルベントの線形結合であることから，元の固有値問題の固有ベクトルはまた同時に作用素 $\mathcal{F}$ の固有値問題の固有ベクトルにもなることを最大限に利用する．作用素 $\mathcal{F}$ の空間 $\mathrm{span}(Y)$ 上に制限された固有値方程式 $\mathcal{F}\mathbf{v} = \rho\mathbf{v}$, 但し $\mathbf{v} = Y\mathbf{u}$ に対して，X と計量 B で内積をとって得られる次数の小さい対称一般固有値問題 $\alpha\mathbf{u} = \rho\beta\mathbf{u}$ の固有対 $(\rho, \mathbf{u})$ を解き，フィルタの通過帯域 $\lambda \in [a, b]$ での伝達関数 $f(\lambda)$ の値域に含まれる ρ を持つ近似固有対のベクトル $\mathbf{u}$ と対応する $\mathcal{F}$ の近似固有ベクトル $\mathbf{v} = Y\mathbf{u}$ を集めた組を作り，それを計量 B で正規直交化して基底の組 W とする．そうして subspace 法によりベクトルを $\mathrm{span}(W)$ 内に制限した元の固有値問題の近似固有対を求める．この方法ではフィルタの出力の組 Y 以外に入力の組 X の情報も利用し，さらにフィルタの伝達関数の形状の情報も用いることで，従来の方法における閾値の設定の曖昧さの問題が解消され，また $\mathrm{span}(W)$ が元の固有値問題の不変部分空間のよい近似を与えるという利点がある．

実対称行列 A, B が幅の狭い帯行列である場合の実験例を当日会場で紹介する．

† 首都大学東京 数理情報科学専攻

参 考 文 献

1) Toledo, S. and Rabani, E.: Very Large Electronic Structure Calculations Using an Out-of-Core Filter-Diagonalization Method, *J. Comput. Phys.*, Vol.180, No.1, pp.256–269 (2002).
2) Polizzi, E.: Density-matrix-based algorithm for solving eigenvalue problems, *Phys.Rev.B*, Vol.79, No.11, p.115112[6pages] (2009).
3) 村上 弘: 帯対称定値一般固有値問題のフィルタ対角化法の実験, 情報処理学会研究報告, 2007-HPC-110(6), pp.31–36 (2007).
4) 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.SIG2 (ACS21), pp.66–87 (2008).
5) 村上 弘: フィルタ対角化法の帯域通過フィルタの最適化, 情報処理学会研究報告, Vol.2010-HPC-124, No.3 (2010).
6) 村上 弘: 楕円フィルタによる実対称定値一般固有値問題のフィルタ対角化法の実験, 情報処理学会研究報告, Vol.2010-HPC-125, No.1 (2010).
7) 村上 弘: 固有値が指定された区間内にある固有対を解くための対称固有値問題用のフィルタの設計, 情報処理学会論文誌コンピューティングシステム (ACS31), Vol.3, No.3, pp.1–21 (2010).