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†

フィルタ対角化法を用いて，大規模な実対称定値一般固有値問題 $A\mathbf{v}=\lambda B\mathbf{v}$ の固有対のうちで，固有値が区間 $[a,b]$ にあるものだけを近似して求める．フィルタ対角化法はフィルタの出力ベクトルの組が張る部分空間に対して subspace 法を適用して近似固有対を求める．フィルタにはシフト量が複素数のレゾルベントの線形結合を用いる．フィルタの出力ベクトルの組は，数値的階数が多く落ちているのが普通なので，subspace 法に与える部分空間の基底の組として直接用いるには適切ではない．そのためこれまでの方法では，フィルタの出力ベクトルの組を B-計量で特異値分解し，閾値以下の特異値は切断して構成した B-正規直交基底の組に subspace 法を適用してきた．

今回の新しい方法では，フィルタ作用素の性質とフィルタからの出力ベクトルと入力ベクトル両方の情報を用いて，B-正規直交基底の組を固有値の区間 $[a,b]$ と対応する不変部分空間の近似基底となるように構成する．

係数行列が帯の場合の実対称定値一般固有値問題を解いた数値実験の例を幾つか示す．

Construction of the Approximate Invariant Subspace of a Symmetric Generalized Eigenproblem by the Filter Operator

Hiroshi Murakami†

By the filter diagonalization method, for a real symmetric definite generalized eigenproblem $A\mathbf{v}=\lambda B\mathbf{v}$ of large size, only those eigenpairs are solved whose eigenvalues are in the interval $[a,b]$. The filter diagonalization method applies the subspace method to the subspace spanned by the set of filter's output vectors to give approximations of eigenpairs. The filter we use is a linear combination of resolvents with complex shifts. Since the set of filter's output vectors usually has many rank deficiencies, the direct application of the subspace method to the set is not appropriate.

Therefore, previously the set of B-orthonormal basis for the subspace method has been constructed by the use of SVD of the filter's output vectors in B-metric with the cut-off of singular values below a threshold.

Our new method makes use the property of the filter operator and both information of input and output vectors of the filter, and constructs a set of B-orthonormal basis so that the set spans an approximation of the invariant subspace whose eigenvalues are in the interval $[a,b]$.

Some results of numerical of experiments are shown which solved real symmetric definite generalized eigenproblems for the cases both of coefficient matrices are banded.

1. はじめに

大規模な実対称定値一般固有値問題 $A\mathbf{v}=\lambda B\mathbf{v}$ の固有対の近似で，固有値が区間 $[a,b]$ にあるものだけをフィルタ対角化法[4)~9),12)] を用いて求める．フィルタとしてシフト量が複素数のレゾルベントの線形結合を用いる．フィルタ対角化法では，フィルタに十分多くのベクトルの組を入力として与え，フィルタの出力したベクトルの組で張られた部分空間の中から，近似固有対を subspace 法を用いて取り出す．フィルタの出力したベクトルの組は通常は数値的階数が多く落ちているので，subspace 法に与える部分空間の基底の組として直接用いるのは適切でない．

従来の方法では，フィルタの出力ベクトルの組に閾値による特異値の切断を行う B-計量の特異値分解を適用することで B-正規直交基底の組を構成してきた．しかし，閾値の設定には明確な原理がなかった．さらに特異値分解を用いて元の固有値問題を考慮せずに構成される B-正規直交基底の組は，元の問題の不変部分空間の良い近似基底とはならない．

今回の新しい方法では，出力ベクトルの組と入力ベクトルの組の両方の情報とフィルタ作用素とその伝達関数の性質を併せて用いることで，固有値の区間 $[a,b]$ に対応する不変部分空間の近似基底となるように B-正規直交基底の組を構成する．

† 首都大学東京 数理情報科学専攻
Department of Mathematics and Information Sciences, Tokyo Metropolitan University

2. フィルタとその伝達関数

大規模な N 次の実対称定値な一般固有値問題（GEVP）: $A\mathbf{v}=\lambda B\mathbf{v}$ の区間 $[a,b]$ 内に固有値がある固有対だけを求めるのには，フィルタ対角化法により通過帯域が $[a,b]$ のフィルタを利用する．フィルタ作用素 $\mathcal{F}$ は複素シフト量 τ のレゾルベント $\mathcal{R}(\tau)\equiv(A-\tau B)^{-1}B$ の線形結合：$\mathcal{F}=c_\infty I+\sum_{p=1}^{2n}\gamma_p\mathcal{R}(\tau_p)$ であるとする．そのとき，固有値が 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，$f(\lambda)=c_\infty+\sum_{p=1}^{2n}\gamma_p/(\lambda-\tau_p)$ は λ の有理関数であり，固有値が λ の固有ベクトルに対する伝達率を与えるので，伝達関数と呼ばれる．フィルタ $\mathcal{F}$ と伝達関数 $f(\lambda)$ に含まれるパラメタである次数 n，複素シフト量 τ_p，複素係数 γ_p，実係数 c_∞ は，伝達関数の特性に対して課された制約条件を満たすように決める．今回の実対称定値一般固有値問題では固有値と固有ベクトルは全て実数の範囲にとれるので，実ベクトルをフィルタに作用させた結果が実ベクトルとなるように，$\mathcal{F}$ は実演算子，$f(\lambda)$ も実の有理関数とする．

アナログ回路の設計法で典型的な 4 種類のフィルタ[2),3)] の Butterworth，Chebyshev，inverse Chebyshev，elliptic と伝達率特性が同じフィルタがレゾルベントの線形結合として構成できる[10),12)]．この分類では，レゾルベントのシフト量を複素平面内の円周上の等分点とする文献[5),6)] で用いられているフィルタは Butterworth 型である．

2.1 フィルタの設計

いま $\lambda\in[a,b]$ から $t\in[-1,1]$ への線形変換によって λ の正規化座標 t を定義する．そのとき $|t|\leq 1$ は通過帯域（passband）に，$1<\mu\leq|t|$ は阻止帯域（stopbands）に，中間の $1<|t|<\mu$ は遷移帯域（transitionbands）にそれぞれ対応する．フィルタの種別は伝達関数 $f(\lambda)=g(t)$ の関数形の違いである．伝達関数 $g(t)$ の値に制約条件を課して，$g_{\min}$ を通過帯域での $g(t)$ の下限値，$g_{\max}$ を阻止帯域での $g(t)$ の上限値とする（**図 1** 参照）．簡単化のため $g_{\min}$ の条件は tight であるとする．

典型的な 4 種類のフィルタに対しては，制約条件の 3 組（μ，$g_{\min}$，$g_{\max}$）を指定すると，条件を満たせる次数 n の最小値が決まり，その値以上の n を設定すると $g(t)$ が完全に決まる（もしも，制約条件の 3 組を（μ，$g_{\min}$，n）で与える場合には，条件を満たせる最小の $g_{\max}$ の値が決まり，$g_{\max}$ をその値以上に設定すれば $g(t)$ が完全に決まる．またもしも，制約条件の 3 組を（$g_{\min}$，$g_{\max}$，n）で与える場合は，条件を満たせる最小の μ の値が決まり，μ をその値以上に設定すれば $g(t)$ が完全に決まる）．

関数 $g(t)$ が決まると，伝達関数 $f(\lambda)=g(t)$ の複素極の位置と極の係数から，通過帯域が $\lambda\in[a,b]$ であるフィルタ $\mathcal{F}$ のパラメタが完全に決まる．

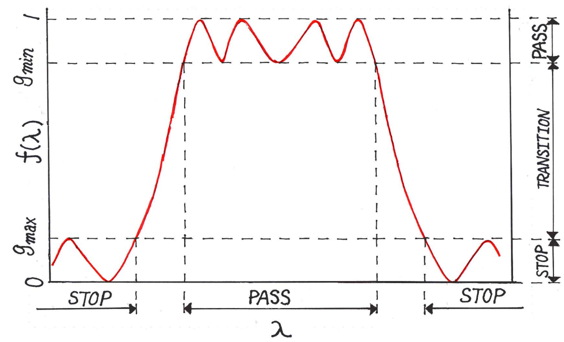

図 1 フィルタの伝達関数 $f(\lambda)$ の概念図．

フィルタの設計の詳細については既に資料[10)~12)] に記述したので省略する．

3. Subspace 法に与える基底の組の構成（従来の方法）

ランダムな N 次ベクトルを十分多く m 個集めて，計量 B で正規直交化することで線形独立性を高めた $N\times m$ 行列をベクトルの組 X とする．組 X をフィルタ $\mathcal{F}$ への入力として各ベクトルごとに独立に作用させて $N\times m$ 行列である出力ベクトルの組 Y を作る．Y の張る空間は固有値が区間 $[a,b]$ の近傍にある固有ベクトルで張られたものになる．そうして subspace 法により Y の張る部分空間内で元の GEVP の近似対を求める．

フィルタの性質から，一般に Y は数値的な階数が多数落ちた行列である．従来は数値的安定化のために，$N\times m$ 行列 Y を計量 B で特異値分解して，特異値が閾値よりも大きい特異ベクトル $r(\leq m)$ 個だけを集めた組 Z を作って，（Z は既に B-正規直交系であるから）小さい次数 r の対称行列 Z^TAZ を係数とする標準固有値問題に帰着させてきた．

特異ベクトルの組は，Y の張る空間を計量 B で良く説明する軸ではあるが，元の GEVP を参照せずに構成するので，各特異ベクトルは固有値が $[a,b]$ 近傍の固有ベクトルの線型結合になる．

切断の閾値を大きくとると，Z に含まれる基底の個数が減り部分空間が狭まるので一般に subspace 法の近似度は下がる．しかし閾値を過度に小さくとると，特異値の小さいベクトル（有効精度が落ちていて丸め誤差が占める割合が多い）も基底の組 Z に参加して，subspace 法で得られる近似対に残差の大きい「偽の固有対」が多く現れるようになる．

4. Subspace 法に与える基底の組の構成（今回の新しい方法）

フィルタ $\mathcal{F}$ がレゾルベントの線形結合の場合には，元の GEVP：$A\mathbf{v}=\lambda B\mathbf{v}$ の固有対 $(\lambda,\mathbf{v})$ のベクトル $\mathbf{v}$ は，また同時に $\mathcal{F}\mathbf{v}=f(\lambda)\mathbf{v}$ を満たす $\mathcal{F}$ の固有ベクトルにもなる，という性質を利用する．

まず，Y の張る部分空間内で作用素 $\mathcal{F}$ の近似固有対 $(\rho,\mathbf{v})$ を求める（方法は後述．またベクトル $\mathbf{v}$ は B-正規直交系になるようにとれる）．

得られた $\mathcal{F}$ の近似固有対 $(\rho,\mathbf{v})$ のうちで，ρ の値が区間 $[a,b]$（の近傍）に対する伝達関数 $f(\lambda)$ の値域に含まれるようなベクトル $\mathbf{v}$ を集めて組 Z を作る．

次に，この組 Z が張る部分空間内での元の GEVP：$A\mathbf{v}=\lambda B\mathbf{v}$ の近似固有対を subspace 法で求める．

4.1 $\mathcal{F}$ の近似固有対の解法

Ritz-Galerkin 法を用いて以下の手順で，組 Y の張る部分空間内での $\mathcal{F}$ の近似固有対 $(\rho,\mathbf{v})$ を求める．

固有値方程式 $\mathcal{F}\mathbf{v}=\rho\mathbf{v}$ に対して $\mathbf{v}=Y\mathbf{u}$ とおき，両辺に左から X^TB を乗じると，小さい次数 m の GEVP：$\alpha\mathbf{u}=\rho\beta\mathbf{u}$ を得る．ここで $\alpha=X^TB\mathcal{F}Y$，$\beta=X^TBY$．$\mathcal{F}$ がレゾルベントの線形結合の形式であるという仮定から容易に導かれる関係 $B\mathcal{F}=\mathcal{F}^TB$ を用いると，$\alpha=Y^TBY$ がわかり，α は半正定値対称である．同様に $\beta=X^TB\mathcal{F}X=Y^TBX=\beta^T$ なので β も対称である．

典型的 4 種類のフィルタでは $f(\lambda)$ が非負の実関数であることから β は半正定値になる．(ただし，フィルタの係数 c_∞ は，次数 n が偶数でフィルタの種類が inverse Chebyshev あるいは elliptic の場合にだけ零でない正の値を持つが，その大きさが微小である場合に零とみなして省略する近似を行う場合には，β は微小な大きさの負の固有値を持ち得る）．

フィルタの性質から通常，Y の特異値には微小な値が多いので，係数 α，β はどちらも悪条件となるので，そのことを考慮して固有値方程式 $\alpha\mathbf{u}=\rho\beta\mathbf{u}$ は以下の特別な方法で解く．

4.2 固有値方程式 $\alpha\mathbf{u}=\rho\beta\mathbf{u}$ の解法

表式に Y が積の形で α には 2 回，β には 1 回，入っているので，行列 β は α よりも数値的条件が良い．そこで絶対値の小さな固有値，固有ベクトルに対しても計算精度が高い Rutishauser の Jacobi 法[1] を用いて β を固有値分解し，固有値を減少順に（負のものは後に）並べて $\beta=Q^TDQ$ とする

直交変換 $\mathbf{u}\equiv Q\mathbf{w}$ により $G\equiv Q\alpha Q^T$ とおくと，方程式は $G\mathbf{w}=\rho D\mathbf{w}$ となる．

極めて小さい閾値 ϵ（実験で用いた値は丸め誤差の単位の 100 倍）を決め，ϵ 未満の D の対角要素と対応する行と列を G，D，$\mathbf{w}$ から省いて，切断された固有値方程式 $\widehat{G}\widehat{\mathbf{w}}=\rho\widehat{D}\widehat{\mathbf{w}}$ を得る．さらに，変換 $\widehat{\mathbf{w}}\equiv\widehat{D}^{1/2}\mathbf{z}$ により $H\equiv\widehat{D}^{-1/2}\widehat{G}\widehat{D}^{-1/2}$ とおいて得られる標準 EVP：$H\mathbf{z}=\rho\mathbf{z}$ を Jacobi 法で解く．

その固有対 $(\rho,\mathbf{z})$ のベクトル $\mathbf{z}$ から逆変換により対応する $\widehat{\mathbf{w}}$ を得て，切断された行の自由度に零を補って $\mathbf{w}$ を得て，さらに $\mathbf{u}$ を得て，$\mathbf{v}=Y\mathbf{u}$ を得る．

（注：Jacobi 法で解いた $\mathbf{z}$ は正規直交系になり，$\mathbf{u}$ は β-正規直交系になる．そのとき $\mathbf{v}^{(i)}=(1/\sqrt{\rho^{(i)}})\cdot Y\mathbf{u}^{(i)}$ と規格化すると，$\mathbf{v}^{(i)}$ が B-正規直交になる．）

5. 数値実験例

計算機システム

実験に用いた計算機システムの仕様は以下のとおりである．CPU：intel Core i7-920（2.66GHz，8MB L3，4 コア，Hyperthread 機能オフ）；主記憶：24Gbytes（triple channel; 6×4GB DDR3 1333MHz PC3-10600 DIMM）；コンパイラ：intel Fortran/OpenMP v12.0 for intel64 （コンパイルオプション `-fast -openmp`）；使用した浮動小数点数は IEEE754 規格の 64-bit 倍精度；OS は Fedora14 for intel64．

近似固有対の精度の評価方法

近似固有対 $(\lambda,\mathbf{v})$ のベクトル $\mathbf{v}$ が B-正規化されていれば，残差ベクトル $\mathbf{r}\equiv(A-\lambda B)\mathbf{v}$ の B^{-1}-ノルムである $\Delta\equiv\sqrt{\mathbf{r}^TB^{-1}\mathbf{r}}$ は固有値の誤差上界を与え，λ から距離 Δ 以内に真の固有値が必ずある．これは標準固有値問題の Wilkinson の上界の簡単な拡張になっている．但し，固有ベクトルの近似が悪いと固有値の誤差上界としては過大評価で，固有値精度を推定するには逆反復による改良で得られる近似固有値の変動の大きさの方が良い．

以下の例題 1 から 3 に於いて，フィルタ出力の組 Y から subspace 法に与える基底の組 Z の構成法として，切断付き SVD を用いた従来の方法と提案の新しい方法とを比較実験する．

5.1 例題 1（次数 n=12 の elliptic フィルタ）

この例の係数行列 A，B はどちらも次数 $N=10^5$ の帯行列で，半帯幅は $h=100$ である．帯内 $(|p-q|\le h)$ の行列要素は，$A_{p,q}=\frac{pq}{\sqrt{p^2+q^2}}$，$B_{p,q}=\frac{1}{p+q-1}+\delta_{p,q}$ で与えた．但し，$p,q=1,2,\ldots,N$ で，$\delta_{p,q}$ は Kronecker 記号である．この固有値問題の固有対で固有値が区間 $[50,100]$ 内のものは 110 個である．

入力ベクトルの組 X は，乱数ベクトル m=150 個を B-正規直交化して作成した．使用したフィルタは次数 n=12 の elliptic で，μ=1.4，$g_{\min}$=0.5（tight），$g_{\max}=1.0\times10^{-15}$ である．フィルタの係数 c_∞ は 10^{-15} 程度と小さいから省いた．

従来の方法（例題 1）

B-SVD の特異値分布をグラフ（**図 2**）に示す．特異値の閾値を 10^{-9} とすると切断の結果 130 個の基底が得られた．その 130 個の基底の組に subspace 法を適

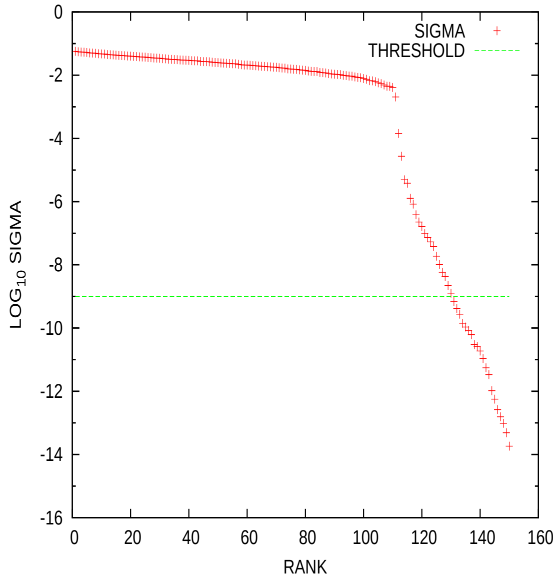

図 2 例題 1，従来の方法：特異値分布（m=150，閾値 10^{-9}）

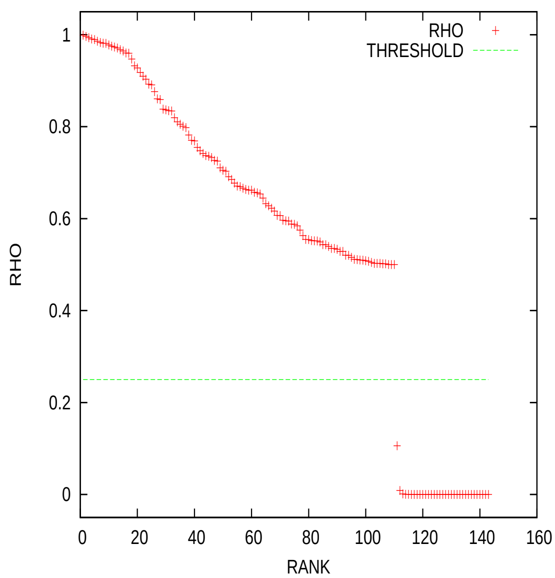

図 4 例題 1，新しい方法：ρ の値の分布（m=150，閾値 0.25）

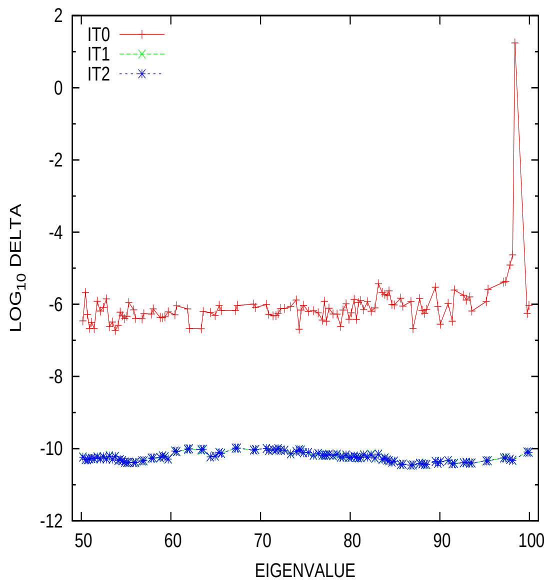

図 3 例題 1，従来の方法：近似固有対の残差のノルム（区間 [50, 100]，m=150）

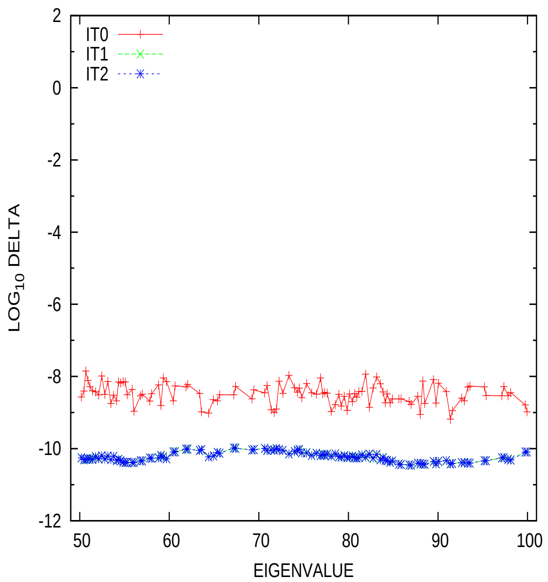

図 5 例題 1，新しい方法：近似固有対の残差のノルム（区間 [50, 100]，m=150）

用した．得られた近似固有対で固有値が区間 [50, 100] 内にあるものは 111 個であった．これらの 111 個の近似対だけについてグラフ（**図 3**）に，横軸に近似固有値，縦軸に残差のノルム Δ の値をプロットした．グラフ中の IT0 がフィルタ対角化法による残差のノルムである．この IT0 のグラフからフィルタ対角化法により得られた近似固有対の中に残差が非常に大きい偽の固有対で固有値が区間内のものが 1 個あること，その 1 個以外の 110 個の近似固有対の残差のノルムの大きさは 10^{-6} 程度で，近似固有値の相対精度は少なくとも 7〜8 桁程度あることが分かる．IT0 の下側にある IT1，IT2 はほとんど重なっているが，フィルタ対角化法で得られた近似固有対を Rayleigh 商逆反復によりそれぞれ 1 回，2 回改良を施したものである．IT0 で大きい残差を示している偽の固有対 1 個は逆反復で改良すると，固有値が変化して区間 [50,100] の外にはみ出たためグラフの IT1，IT2 のプロットに含まれていない．IT1，IT2 のプロットに含まれている逆反復で改良した近似固有対 110 個については，残差のノルムが 10^{-10} 程度であることから，固有値の相対精度は

少なくとも 12 桁程度はあることがわかる.

経過時間は，1 スレッド実行の場合はフィルタ対角化が 240.1 秒，逆反復 2 回が 378.2 秒で，4 スレッド並列実行の場合はフィルタ対角化が 70.4 秒，逆反復 2 回が 108.3 秒であった.

新しい方法（例題 1）

グラフ（**図 4**）に「縮小されたフィルタ作用素の固有値」ρ の分布を示す．$g_{\min}$=0.5 と 10^{-15} 程度である c_∞ を省くので，通過帯域での ρ の下限は約 0.5000000 である．ρ の閾値を 0.25 とすると，固有対の個数と等しい 110 個の基底の組を得た．その 110 個の基底の組に subspace 法を適用した．得られた近似固有対の固有値は全て区間 $[50, 100]$ 内にあった．得られた近似固有対についてグラフ（**図 5**）に，横軸に近似固有値を，縦軸には残差のノルム Δ の値をプロットした．グラフ中の IT0 がフィルタ対角化法による残差のノルムである．その下側にある IT1，IT2 はほとんど重なっているが，フィルタ対角化法で得られた近似固有対を Rayleigh 商逆反復によりそれぞれ 1 回，2 回改良を施したものである．この IT0 のグラフからフィルタ対角化法による近似固有対の残差のノルムの大きさは 10^{-9}～10^{-8} 程度で，固有値の相対精度は少なくとも 10 桁～11 桁程度あることがわかる．IT1，IT2 のグラフからは，逆反復で改良された近似固有対の固有値の相対精度は少なくとも 12 桁程度あることがわかる.

経過時間は，1 スレッド実行の場合はフィルタ対角化が 226.3 秒，逆反復 2 回が 320.2 秒であり，4 スレッド並列実行の場合はフィルタ対角化が 66.2 秒，逆反復 2 回が 92.6 秒であった.

5.2 例題 2（次数 n=16 の elliptic フィルタ）

この例の係数行列 A，B はどちらも次数 N=$5{\times}10^5$ の帯行列で，半帯幅は h=100 である．帯内（$|p-q| \le h$）の行列要素は $A_{p,q}$= $\max(p,q)-1$，$B_{p,q}$=$\frac{1}{p+q-1}+\delta_{p,q}$ とした．但し，p,q=$1,2,\ldots,N$ で，$\delta_{p,q}$ は Kronecker 記号である．この固有値問題の固有対で固有値が区間 $[100, 150]$ 内のものは 99 個である.

入力ベクトルの組 X は，乱数ベクトル m=150 個を B-正規直交化して作成した．フィルタは次数 n=16 の elliptic で，μ=1.1，$g_{\min}$=0.5（tight），$g_{\max}$=10^{-14} である．フィルタの係数 c_∞ は 10^{-14} 程度で小さいから省いた.

従来の方法（例題 2）

B-SVD の特異値分布をグラフ（**図 6**）に示す．特異値の閾値 10^{-9} を用いて切断すると 104 個の基底が得られた．その 104 個の基底の組に subspace 法を適用して得られた近似固有対のうちで固有値が区間 $[100, 150]$ 内にあるものはちょうど 99 個であった．グラフ（**図 7**）に，これら 99 個の近似対について，横軸に近似固有値，縦軸に残差のノルム Δ の値をプロットした．グラフ中の IT0 がフィルタ対角化法による残差のノルムである．その下側にある IT1，IT2 はほとんど重なっているが，フィルタ対角化法で得られた近似固有対を Rayleigh 商逆反復によりそれぞれ 1 回，2 回改良を施したものである．これら 99 個の近似固有対の残差のノルムの大きさは IT0 のグラフでは 10^{-8} ～10^{-6} 程度で，フィルタ対角化法による近似固有値の相対精度は少なくとも 8 桁程度あること，また IT1，IT2 のグラフでは 10^{-9} 程度なので，改良後の相対精度は少なくとも 11 桁程度あることが分かる.

経過時間は，1 スレッド実行の場合はフィルタ対角化が 1530 秒，逆反復 2 回が 1515 秒であり，4 スレッド並列実行の場合はフィルタ対角化が 448 秒，逆反復 2 回が 428 秒であった.

新しい方法（例題 2）

β の固有値分解を $2.2{\times}10^{-14}$ を閾値として切断すると，次元は 106 となった.「縮小されたフィルタ作用素の固有値」ρ の分布をグラフ（**図 8**）に示す．$g_{\min}$=0.5 から，通過帯域での ρ の下限は約 0.5000000 である．ρ の閾値を 0.25 とすると，ちょうど固有対の個数に等しい 99 個の基底の組を得た．その 99 個の基底の組に subspace 法を適用して得られた近似固有対の固有値は，全て区間 $[100, 150]$ 内にあった．グラフ（**図 9**）には得られた近似固有対について，横軸に近似固有値を，縦軸には残差のノルム Δ の値をプロットした．グラフ中の IT0 がフィルタ対角化法による残差のノルムである．その下側にある IT1，IT2 はほとんど重なっているが，フィルタ対角化法で得られた近似固有対を Rayleigh 商逆反復によりそれぞれ 1 回，2 回改良を施したものである．この IT0 のグラフから，フィルタ対角化法による近似固有対の残差のノルムの大きさは $3{\times}10^{-9}$ 以下で，フィルタ対角化法による近似固有値の相対精度は少なくとも 10 桁程度あることがわかる.

経過時間は，1 スレッド実行の場合はフィルタ対角化が 1478 秒，逆反復 2 回が 1443 秒であり，4 スレッド並列実行の場合はフィルタ対角化が 429 秒，逆反復 2 回が 414 秒であった.

5.3 例題 3（低次 n=4 の Chebyshev フィルタ）

この例の係数行列 A，B はどちらも次数 N=$5{\times}10^5$ の帯行列で，半帯幅は h=100 である．帯内（$|p-q| \le h$）の行列要素は，$A_{p,q}$= $\max(p,q)-1$，$B_{p,q}$=$\frac{1}{p+q-1}+\delta_{p,q}$ で与えた．但し，p,q=$1,2,\ldots,N$ で，$\delta_{p,q}$ は Kronecker 記号である．この固有値問題の固有対で固有値が区間 $[150, 200]$ 内のものは 85 個ある.

入力ベクトルの組 X は，乱数ベクトル m=200 個を B-正規直交化して作成した．フィルタは次数 n=4 の Chebyshev で，μ=2，$g_{\min}$=0.5（tight），$g_{\max}$=$1.1{\times}10^{-4}$ とした．係数 c_∞ は Chebyshev フィルタでは常に零である.

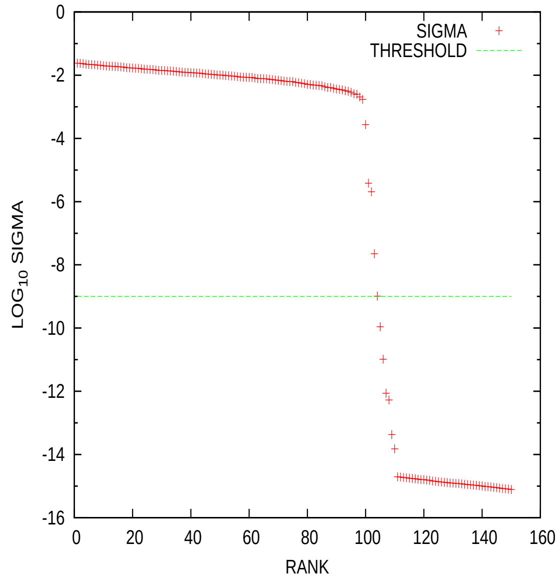

図 6 例題 2，従来の方法：特異値分布（m=150，閾値 10^{-9}）

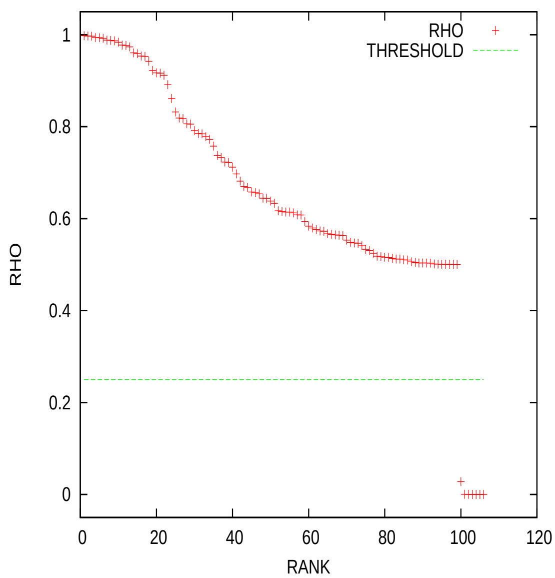

図 8 例題 2，新しい方法：ρ の値の分布（m=150，閾値 0.25）

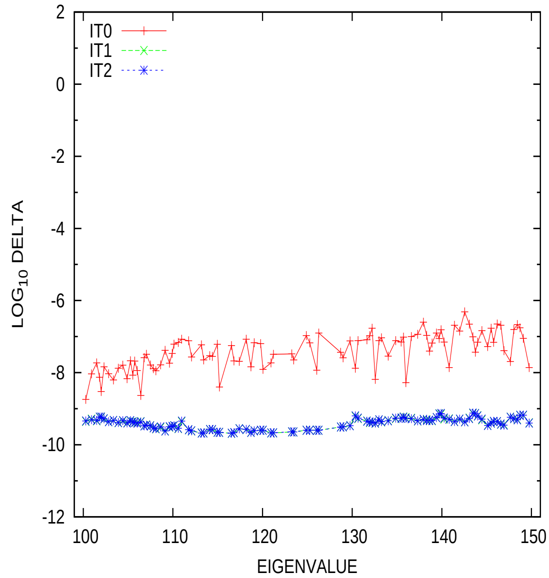

図 7 例題 2，従来の方法：近似固有対の残差のノルム（区間 [100, 150]，m=150）

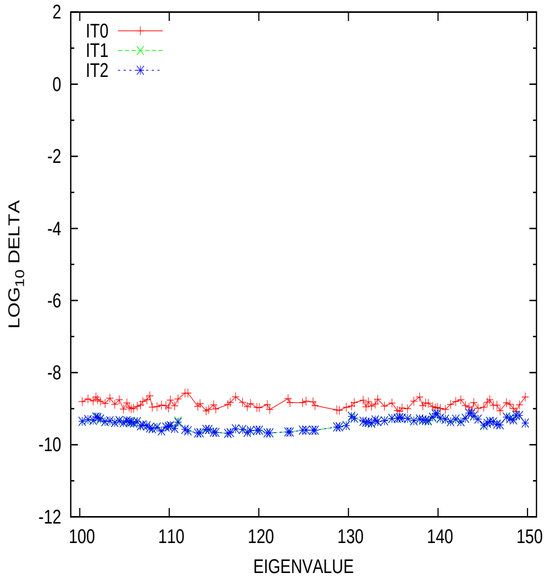

図 9 例題 2，新しい方法：近似固有対の残差のノルム（区間 [100, 150]，m=150）

従来の方法（例題 3）

B-SVD の特異値分布をグラフ（**図 10**）に示す．特異値の閾値を 10^{-3} とすると切断の結果 96 個の基底が得られた（この閾値が与える結果は比較的良好であった）．その 96 個の基底の組に subspace 法を適用した．得られた近似固有対 96 個のうちで固有値が区間 $[150, 200]$ 内にあるものは 86 個であった．これは固有対の正しい個数よりも 1 個多いが，近似固有対に逆反復を 1 回適用すると，区間の上端に非常に近い固有値 199.98426 を持つ対 1 個が改良されて固有値が少し変化して 200.03413 と区間外に出たので，区間内に固有値を持つ近似固有対は 85 個となった．グラフ（**図 11**）に，これら 86(85) 個の近似固有対について，横軸に近似固有値，縦軸に残差のノルム Δ の値をプロットした．グラフ中の IT0 がフィルタ対角化法による近似固有対 86 個の残差のノルムで，IT0 の下側の IT1，IT2 はそれぞれフィルタ対角化法で得られた 86 個の近似固有対を Rayleigh 商逆反復により 1 回，2 回改良を施して得られた近似固有対のうちで固有値が区間 [150,200] 内の 85 個分のプロットである．IT0 で示さ

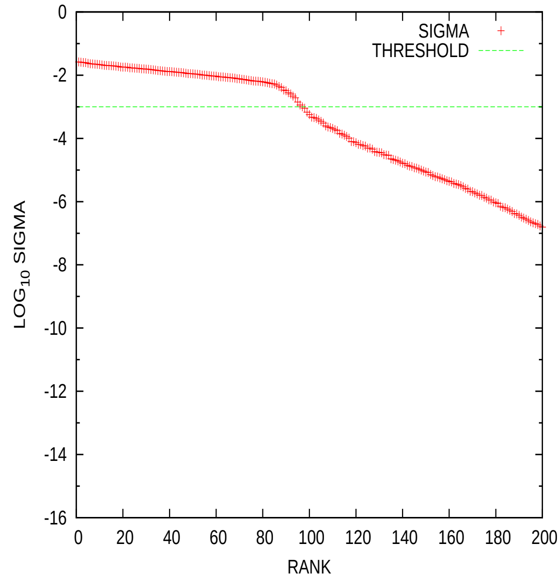

図 10　例題 3，従来の方法：特異値分布（m=200），閾値 10^{-3}

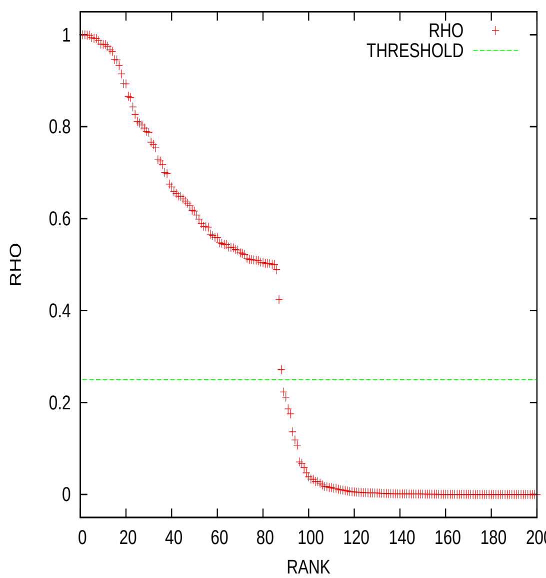

図 12　例題 3，新しい方法：ρ の値の分布（m=200，閾値 0.25）

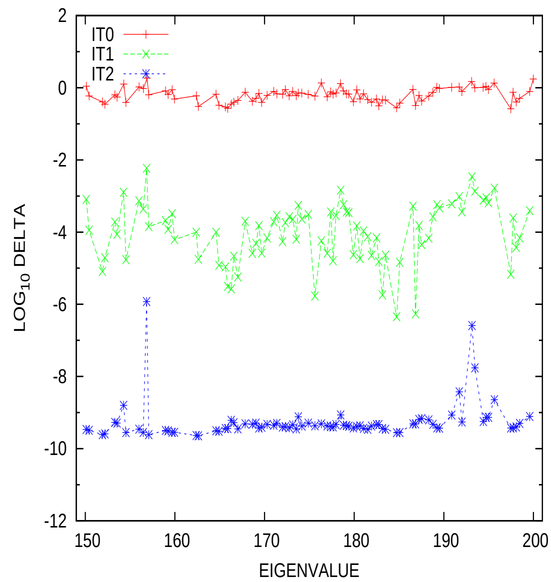

図 11　例題 3，従来の方法：近似固有対の残差のノルム（区間 [150, 200]，m=200）

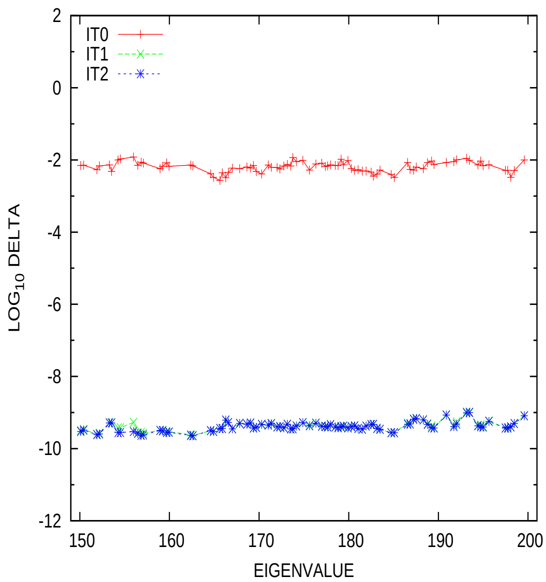

図 13　例題 3，新しい方法：近似固有対の残差のノルム（区間 [150, 200]，m=200）

れたフィルタ対角化法で得られた 86 個の近似固有対の残差のノルムの大きさが 10^{-0} 程度で，近似固有値の相対精度は少なくとも 2 桁程度あることが分かる．

経過時間は，1 スレッド実行の場合はフィルタ対角化が 618 秒，逆反復 2 回が 1400 秒であり，4 スレッド並列実行の場合はフィルタ対角化が 195 秒，逆反復 2 回が 396 秒であった．

新しい方法（例題 3）

β の最小固有値は 1.1×10^{-9} で，β の固有値の切断は閾値 2.2×10^{-14} では生じなかった．「縮小されたフィルタ作用素の固有値」ρ の分布を減少順にグラフ（**図 12**）に示す．$g_{\min}$=0.5，c_∞=0 から，通過帯域での ρ の下限の値は 0.5 である．$\rho(85)$=0.5000367，$\rho(86)$=0.4891279，$\rho(87)$=0.4238465，$\rho(88)$=0.2716056，$\rho(89)$=0.2230796 なので，ρ の 85 番目までが通過帯域に対応している．単純に ρ の閾値を 0.25 に設定すると，真の固有対の個数よりも 3 個多い 88 個の基底の組を得た．その 88 個の基底の組に subspace 法を適用して得られた近似固有対のうちで固有値が区間 [150, 200] の内にあるものはちょうど 85 個で，残り 3

個は外部であった．得られた近似固有対のうち固有値が区間 $[150, 200]$ 内のものについてグラフ（**図 13**）に横軸に近似固有値，縦軸に残差のノルム Δ の値をプロットした．グラフ中の IT0 はフィルタ対角化法による残差のノルムである．IT0 の下側にある IT1，IT2 はほとんど重なっているが，フィルタ対角化法で得られた近似固有対を Rayleigh 商逆反復によりそれぞれ 1 回，2 回改良を施したものである．この IT0 のグラフからフィルタ対角化法による近似固有対の残差のノルムの大きさは 10^{-2} 程度で，固有値の相対精度は少なくとも 4 桁程度はあることがわかる．また IT1，IT2 のグラフから逆反復で改良した近似固有対の固有値の相対精度が少なくとも 11 桁程度あることもわかる．

経過時間は，1 スレッド実行の場合はフィルタ対角化が 525 秒，逆反復 2 回が 1285 秒であり，4 スレッド並列実行の場合はフィルタ対角化が 206 秒，逆反復 2 回が 361 秒であった．

6. まとめ

フィルタ対角化法では，通過帯域 $[a, b]$ のフィルタ $\mathcal{F}$ を用意し，乱数から生成された十分に多くの m 個の B-正規直交ベクトルの組 X を作る．そうして $\mathcal{F}$ で X を濾過した出力ベクトルの組 Y を作る．部分空間の基底の組 Z を Y の適切な線形結合により構成して，subspace 法に Z を与えて近似固有対を求める．

従来の方法では，計量 B での Y の特異値分解を特異値の閾値で切断して得られる B-正規直交基底の組として Z を構成してきた．フィルタの性能が良ければ通常は満足に働くが，切断の閾値の合理的な決定法は見い出しにくい．切断付きの SVD では，subspace 法に与える基底の組 Z を元の GEVP の係数 A とは無関係に，出力ベクトルの組 Y と計量 B だけから構成するから，一般には Z の張る空間は不変部分空間の良い近似にはならず，Z に subspace 法を適用して得られる近似固有対には残差の大きい偽の固有対が混ざる．偽の固有対の固有値は通常は区間外にあるが，区間内に現われることもある．

今回の新しい方法では，Y の張る空間内で固有値の区間 $[a, b]$ と対応する不変部分空間を近似して，組 Z がその B-正規直交基底となるように構成する．そのようにして得られた不変部分空間の近似を張る基底の組 Z に subspace 法を適用することで元の GEVP の近似固有対を求める．

レゾルベントの線形結合を通過帯域 $[a, b]$ のフィルタ $\mathcal{F}$ として採用した場合には，GEVP の固有対 $(\lambda, \mathbf{v})$ に対応して，作用素 $\mathcal{F}$ は固有対 $(\rho, \mathbf{v})$ を持つ．但し，$\rho = f(\lambda)$ はベクトル $\mathbf{v}$ のフィルタによる伝達率で，f は伝達関数である．この性質を利用することで，subspace 法に与えるための（固有値が $[a, b]$ の）不変部分空間を近似する空間の基底の組 Z が構成できる．

フィルタ作用素 $\mathcal{F}$ の固有値方程式 $\mathcal{F}\mathbf{v} = \rho\mathbf{v}$ を Y の張る空間内に $\mathbf{v}$ を制限して解いた近似固有対 $(\rho, \mathbf{v})$ のうちで，ρ の値が（通過帯域 $\lambda \in [a, b]$ に対する $f(\lambda)$ の値域である）区間 $[g_{\min}, 1]$ の近傍にあるベクトル $\mathbf{v}$ を集めて（計量 B で正規化して）基底の組 Z とする．

数値実験の結果からは，新しい方法は従来の方法よりもかなり優れている．特にフィルタの弁別性能が低くて，遷移帯域に固有値が多く分布する場合でも，入力ベクトルの個数を対応してそれだけ多くとれば，透過帯域内の固有値に対応する不変部分空間の近似基底の組を適切に構成できる．

参 考 文 献

1) Rutishauser, H.: The Jacobi method for real symmetric matrices, *Numerische Mathematik*, Vol.9, pp.1–10 (1966).
2) Daniels, R.W.: *Approximation Methods for Electronic Filter Design*, McGraw-Hill, 1974.
3) Lutovac, M.D., Tošić, D.Y. and Evans, B.L.: *Filter Design for Signal Processing*, §12.8, Prentice Hall, 2001.
4) 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).
5) Sakurai, T. and Sugiura, H: A projection method for generalized eigenvalue problems using numerical integration, *J. Comp. Appl. Math.*, Vol.159, pp.119–128 (2003).
6) Polizzi, E.: Density-matrix-based algorithm for solving eigenvalue problems, *Phys.Rev.B*, Vol.79, No.11, p.115112[6pages] (2009).
7) 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).
8) 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).
9) Ikegami, T., Tadano, H., Umeda, H. and Sakurai, T.: Hierarchical parallel algorithm to solve large generalized eigenproblems, *HPCS2010* 論文集, pp.107–114 (2010).
10) 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).
11) 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).
12) 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).