

実数シフトのレゾルベントを組み合わせたフィルタによる 実対称定値一般固有値問題の下端側固有値を持つ固有対の解法

村上 弘 (首都大学東京)

はじめに 実対称定値一般固有値問題 $A\mathbf{v} = \lambda B\mathbf{v}$ (係数 A, B が実対称で B は正定値) の固有対で固有値が固有値分布の下端の (狭い) 区間にあるものだけを解くことにする。これは振動モードの FEM による解析などエネルギー変分原理から導かれる固有値問題では頻出の設定である。

フィルタにはレゾルベントの線形結合を用いる。シフト τ のレゾルベントの定義は $\mathcal{R}(\tau) \equiv (A - \tau B)^{-1}B$ とする。固有値が固有値分布の下端付近にある固有対だけを求める場合は、レゾルベントのシフトをすべて実数にすることが可能である。但しシフトが固有値と一致または近接しないように、実数 a を最小固有値のある下界 (最小固有値以下の値) として、シフトを a よりも小さい実数に制限する。この場合には各レゾルベントの作用を実現する連立 1 次方程式の係数行列は実対称正定値になる。

レゾルベントの線形結合をフィルタに用いた対角化法 実対称定値一般固有値問題に対するレゾルベントの線形結合 $\mathcal{F} = c_\infty I + \sum_p \gamma_p \mathcal{R}(\tau_p)$ をフィルタに用いる対角化法の概要は以下になる。まず固有値が $[a, b]$ から離れた固有ベクトルは強く減衰させるように構成したフィルタを用意する。次に乱数で作った縦ベクトル m 個の組を B -正規直交化した組を $X = \{X^{(1)}, X^{(2)}, \dots, X^{(m)}\}$ ($X^T B X = I$) とする。フィルタ \mathcal{F} をベクトルの組 X に作用してベクトルの組 $Y = \mathcal{F}X$ を作る。そうして X, Y の情報とフィルタ \mathcal{F} の伝達特性の形状を考慮して、「固有値が $[a, b]$ の近傍にある不変部分空間 S 」の $\text{span}(Y)$ 内での近似空間 S' の B -正規直交基底 Z を構成する。得られた不変部分空間の近似基底 Z に Rayleigh-Ritz 法を適用して近似固有対を得る。

フィルタとその伝達関数 実対称定値一般固有値問題 $A\mathbf{v} = \lambda B\mathbf{v}$ に対して、レゾルベントの線形結合のフィルタを $\mathcal{F} = c_\infty I + \sum_p \gamma_p \mathcal{R}(\tau_p)$ とする。そのとき固有値 λ の固有ベクトル \mathbf{v} に対しては $\mathcal{F}\mathbf{v} = f(\lambda) \cdot \mathbf{v}$, $f(\lambda) = c_\infty + \sum_p \frac{\gamma_p}{\lambda - \tau_p}$ が成立する。有理関数 $f(\lambda)$ は固有値が λ の固有ベクトルのフィルタ \mathcal{F} による伝達率を与える伝達関数である。逆に伝達関数 $f(\lambda)$ を上記形の式で与えれば、レゾルベントの線形結合でフィルタ \mathcal{F} を実現できる。レゾルベントの個数、実係数 c_∞ 、複素数の係数 γ_p とシフト量 τ_p は、与えられた $f(\lambda)$ の形状制約を満たすように決める。

下端側固有値へのフィルタの設計 フィルタ \mathcal{F} が有界な作用素ならば、伝達関数 $f(\lambda)$ は固有値と一致する極を持たない。今の固有値問題の固有値は実数なので、たとえば $f(\lambda)$ のすべての極が虚数ならば固有値分布と関係なく \mathcal{F} の有界性は保証される。しかし実数の極があってもそれが固有値と一致 (あるいは極端に接近) しなければ問題は生じない。とくにすべての極が実数であっても、それらが最小固有値の下界 a よりも小さければ \mathcal{F} の有界性が保証される。

そこで実数 a を最小固有値の「ある下界」として、固有値分布の下端付近の指定区間 $[a, b]$ を通過帯域にもつフィルタを構成する。いま $\lambda \in [a, b]$ を $t \in [0, 1]$ に 1 次変換 $\lambda = \mathcal{L}(t) = a + (b-a)t$ で対応させて $g(t) = f(\lambda)$ とおく。 $f(\lambda)$ のすべての極が a より小さい実数であれば、 $g(t)$ のすべての極は負の実数 $-a_p$, $p=1, 2, \dots, n$ で、 $g(t) = c_\infty + \sum_{p=1}^n \frac{c_p}{t+a_p}$ となる。これが $f(\lambda) = c_\infty + \sum_{k=1}^p \frac{\gamma_p}{\lambda - \tau_p}$ に等しいとおくと、 $\gamma_p/c_p = \mathcal{L}' = (b-a)$, $\tau_p = \mathcal{L}(-a_p) = a - (b-a)a_p$ である。そうして対応するフィルタは $\mathcal{F} = c_\infty I + \sum_{p=1}^n \gamma_p \mathcal{R}(\tau_p)$ となる。

極が負の実数のみの伝達関数の構成 上記の対応関係を利用すると、通過帯域が $t \in [0, 1]$ である伝達関数 $g(t)$ を構成すればよい。そこで、実有理関数 $g(t)$ をすべての極は単純で負の実数として、1 より少し大きい μ に対して $t \geq \mu$ では 0 を近似し、 $t \in [0, 1]$ では 1 を近似するように構成する。

簡単のために定数項 c_∞ は無いとして、 $g(t) = \sum_{p=1}^n \frac{c_p}{t+a_p}$ とする。 n 個の負の実数 (シフト量) $-a_p$ と実の係数 c_p , $p=1, 2, \dots, n$ をうまく調節して、通過帯域 $t \in [0, 1]$ では $g(t)$ の値は 1 付近で、 (固有対の計算精度を維持するために) 上限下限の比をなるべく小さく抑える。また阻止帯域 $t \geq \mu$ では $|g(t)|$ の上限を非常に小さくする。シフト量 $-a_p$ の組が与えられたときの最適な係数 c_p は連立 1 次方程式を解けば求められるが、シフト量の良い組の決定は多変数の非線形最小化問題を解く必要がある。今回の研究では、 n 個のシフト量が与えられた場合の最適な係数 c_p を求めた。実際に構成されたフィルタの伝達特性の形状は (シフトに虚数を用いた場合と比べて) あまり良いものにはできないようである。しかしそれでも伝達関数 $f(\lambda)$ の形状の情報を用いて不変部分空間 S の近似 S' の基底 Z を構成する方法が極めて有効に働く。

数値実験 大規模固有値問題の例題に対して、上記で構成されたフィルタによる対角化で近似固有対を求める数値実験を行った。詳しくは当日のポスターで説明する。