情報処理学会研究報告
IPSJ SIG Technical Report
Vol.2012-ARC-202 No.22
Vol.2012-HPC-137 No.22
2012/12/14

フィルタ対角化法の振る舞いを模倣する簡易な方法

村上 弘[1,a)]

概要：フィルタ対角化法は行列の固有値問題の解法の一つで，固有値が指定された範囲にある固有対を近似してすべて求める．その計算の過程は：
(1) フィルタを，固有値が指定された範囲にある固有ベクトルだけを通過させてそれ以外を阻止するように構成する．
(2) 十分多くのランダムなベクトルの組を生成して，それを正規直交化する．
(3) そのランダムなベクトルの組にフィルタを適用して濾過されたベクトルの組を作る．
(4) 濾過されたベクトルの組から適切な線形結合で基底をうまく構成して，その基底の張る空間が指定された範囲にあるすべての固有値と対応する不変部分空間を近似するようにする．
(5) その基底にレイリーリッツ法を適用して得られるリッツ対を選別して，固有値問題の必要な近似固有対とする．
本論文で紹介する簡単な方法は，問題の行列の固有値だけを用いて上記の計算過程を模倣することで，フィルタ対角化法による近似固有対の誤差の大きさのサンプルを高速に計算する．

キーワード：フィルタ対角化法, 固有値問題, 誤差の推定

A Simple Method to Simulate the Behavior of the Filter Diagonalization Method

Hiroshi Murakami[1,a)]

Abstract: For a matrix eigenproblem, the filter diagonalization method solves approximately all eigenpairs whose values are in the specified region. The steps of calculations in the method are as follows:
(1) The filter is designed so that it passes only those eigenvectors whose eigenvalues belong to the specified region but stops the others.
(2) Sufficiently many random vectors are generated, then they are orthonormalized.
(3) To the random orthonormal vectors the filter is applied to give filtered vectors.
(4) A basis is constructed as a set of linear combinations of the filtered vectors, so that it spans an approximation of the invariant subspace which corresponds to all eigenvalues in the specified region.
(5) To the basis the Rayleigh-Ritz procedure is applied for the eigenproblem to obtain Ritz pairs. From the Ritz pairs, approximations of required eigenpairs of the eigenproblem are selected.
A simple method introduced in this paper simulates the above calculation steps only using eigenvalues of the matrix of the problem to calculate quickly samples of magnitudes of errors of approximated eigenpairs by the filter diagonalization method.

Keywords: filter diagonalization method, eigenproblem, error estimation

1. はじめに

フィルタ対角化法行列の固有値問題に対する解法の一つであり，指定された範囲に固有値がある固有対すべての近

[1] 首都大学東京・数理情報科学専攻
Department of Mathematics and Information Sciences, Tokyo Metropolitan University
[a)] mrkmhrsh@tmu.ac.jp

似を求めることができる．本論文では固有値問題として最も簡単な実対称標準固有値問題だけを扱う．

紹介する方法は，与えられた固有値問題の近似対を求めるためのものではなくて，例題を行列の固有値分布だけで与えたときに，直交変換により係数行列が対角に見える座標（基準座標）に於いてフィルタ対角化法の計算の過程を模倣する（シミュレーションを行う）ことで，フィルタ対角化法が与える近似対の誤差を少ない計算量で求める方法である．これにより，近似解の誤差の振る舞いを調べるため，設定の異なる多数の例について数値実験を行うことが容易となる（但し，模倣による数値丸め誤差の変化の影響は無視している）．

2. 方法の概略

今回の方法を適用する際にはまず先に，使用するフィルタ対角化法の計算処理の内容を明確に定める．フィルタ対角化法の計算処理の内容の概要は以下のようになる．

(1) フィルタはレゾルベントの線形結合の形式として，必要な固有値の固有ベクトルは通過させるがそれ以外は阻止する特性を持つようにフィルタの伝達関数となる有理関数を設計し，フィルタのパラメタを決める [1].

(2) 次に十分多くの個数のランダムなベクトルを生成し，それらを正規直交化しておく．

(3) そのランダムなベクトルの組にフィルタを作用させて，濾過されたベクトルの組を作る．

(4) 濾過されたベクトルの組の線形結合により，適切な正規直交基底を構成し，その基底の張る空間が必要な固有値の固有ベクトルにより張られた不変部分空間の近似となるようにする [2], [3].

(5) 構成した基底を用いて固有値問題に Rayleigh-Ritz 法を適用し，Ritz 対を得る．

(6) Ritz 対を選別して，固有値問題の近似対を得る．

例題は係数行列の固有値分布を任意に数値で与える（これにより数値実験により，固有値の分布状況とフィルタの伝達特性の組み合わせにより，得られる近似解の誤差が変化する様子を調べる）．

処理内容の詳細を決めたフィルタ対角化法を例題の固有値問題に適用するときに，その計算の過程は今回の方法を用いるならば少ない計算量で模倣できる．それにより，近似対の誤差（近似固有値の誤差，残差の 2-ノルム）のサンプルが得られる．ここでサンプルと呼ぶ理由は（模倣ではない場合にもサンプルである），得られる近似対の誤差は，フィルタ対角化法で利用したランダムなベクトルの組にも依存するからである．

計算過程の模倣で計算量が減らせる理由を簡単に述べれば以下のようになる．（以降では対称行列，対角行列，直交変換などは実である場合に限定し，実であることを省いて書くことにする）．

- 係数が対称行列である標準固有値問題は，それを対角行列に移す座標の直交変換が存在する（この直交変換を表す行列は各列が係数行列の固有ベクトルで，対角行列は対応する固有値を並べたものになる）．係数を対角化する直交座標を基準座標と呼ぶことにする．
- フィルタ対角化法は座標の直交変換で計算の過程と意味が変化しないという性質を持つことが示せる．このことから，標準固有値問題で係数が一般の対称行列である場合のフィルタ対角化法の計算の過程は，直交変換で基準座標に移って行うことにより，係数が対角である場合に対するものになる．
- フィルタ対角化法の計算量に関する主要部分は，通常はベクトルにフィルタを作用させる箇所で，その実現には固有値問題の係数行列のレゾルベントに対応する連立 1 次方程式を複数個解く計算を行う必要がある．もしも，固有値問題の係数行列を対角にできると，その計算量を少なくできる．
- よって，フィルタ対角化法の計算過程を基準座標に於いて模倣することにより，「近似対の固有値」や「近似対の残差の 2-ノルム」などの座標の直交変換での不変量は，少ない計算量で求められる．
- これにより，得られる近似解の誤差の振る舞いを調べるために，「フィルタの特性」，「固有値分布」，「生成するランダムなベクトルの組」を変えて，数値実験を行うことが容易になる．

3. フィルタを作用させる計算過程の模倣

固有値問題は $A\mathbf{v} = \lambda\mathbf{v}$ で，行列 A は対称であるとする．そのとき A に対して $D = U^T AU = D$ を対角行列とするような直交行列 U （$U^T U = I$）がとれる．ここで $D = \mathrm{diag}_j[\lambda_j]$ は A の固有値 λ_j を並べた対角行列であり，U の各列は A の固有ベクトルであって j 列目であればその固有値は λ_j になる．フィルタ対角化法の計算過程を模倣する計算では D は用いるが，U は計算には現われない量であって原理の説明のために必要なだけである．

シフトが τ の行列 A のレゾルベント $\mathcal{R}_A(\tau) \equiv (A-\tau I)^{-1}$ は $U(D-\tau I)^{-1}U^T = U\mathcal{R}_D(\tau)U^T$ となるので，A に対応するフィルタ作用素は $\mathcal{F}_A = c_\infty I + \sum_k c_k \mathcal{R}_A(\tau_k)$ であるが，A を D で置き換えたフィルタ作用素 $\mathcal{F}_D = c_\infty I + \sum_k c_k \mathcal{R}_D(\tau_k)$ との間には関係 $\mathcal{F}_A = U\mathcal{F}_D U^T$ があることが分かる．フィルタの伝達関数 $f(\lambda) = c_\infty + \sum_k c_k/(\lambda - \tau_k)$ を用いれば，D に対応するフィルタ作用素は各固有値 λ_j での伝達関数の値（伝達率）を並べた対角行列 $\mathcal{F}_D = \mathrm{diag}_j[f(\lambda_j)]$ に等しい．もし伝達関数 $f(\lambda)$ が λ での値を容易に計算できる形式（例えば多項式を多項式で割った形の式など）で与えられているならば，$\mathcal{F}_D$ の具体的な構成は $f(\lambda)$ の極の位置 τ_k や極の係数 c_k を知らなくてもできる．もちろん対角行列 $\mathcal{F}_D$ をベクトルに作用させるのは簡単で計算は極め

て高速にできる．

フィルタ $\mathcal{F}_A$ を用いてベクトル $\mathbf{x}$ を濾過して得たベクトルを $\mathbf{y}$ とすると，$\mathbf{y} = \mathcal{F}_A\mathbf{x} = U\mathcal{F}_D U^T\mathbf{x}$ であるから，$\mathbf{y}' = U^T\mathbf{y}$，$\mathbf{x}' = U^T\mathbf{x}$ とおくとき，$\mathbf{y}' = \mathcal{F}_D\mathbf{x}'$ である．

4. 直交変換で不変な分布を持つランダムなベクトル

ランダムなベクトルがある直交変換に関して不変な意味を持つように生成するには，その分布が任意の直交変換で不変になれば良い．

ランダムなベクトルの座標成分がそれぞれ正規分布 $\mathcal{N}(0,\sigma^2)$ に従う独立な乱数であれば，ベクトルの分布は原点からの距離だけに依存し，その方向にはよらないことがわかる．よってそのようなランダムなベクトルを任意の直交変換で移して作った新しいベクトルも再び同じ分布のランダムなベクトルになり，その座標成分もまたそれぞれ正規分布 $\mathcal{N}(0,\sigma^2)$ に従う独立な乱数となる．

逆に，原点からの距離だけに依存する分布を持つようなランダムなベクトルの座標成分が独立な乱数により実現できるのは，座標成分がすべて平均が 0 で分散が共通である正規分布に従う乱数の場合に限られる．

任意の直交変換で分布が不変なランダムなベクトルを，原点からの距離で割って長さ 1 に再規格化すると，原点を中心とする単位球面上で一様分布するベクトルが得られる（但し，各座標成分は独立な乱数ではなくなる）．

正規分布に従う乱数を生成するには，例えば Box-Muller 法などが知られている [6], [7]．

5. 双方の座標からみた計算の過程

5.1 ランダムなベクトルの組の生成

直交行列 U による座標変換を行う前後でランダムなベクトルの組を生成する過程を並べると，以下のようになる．

- <u>変換前の座標で</u>：m 個のランダムな N 次列ベクトル $\mathbf{x}^{(j)}$，$j{=}1,2,\ldots,m$ を生成して，それらを順番に並べた $N{\times}m$ 行列 X を作る．
- <u>変換後の座標で</u>：m 個のランダムな N 次列ベクトル $\mathbf{x}'^{(j)}$，$j{=}1,2,\ldots,m$ を生成して，それらを順番に並べた $N{\times}m$ 行列 X' を作る．

いまランダムなベクトル $\mathbf{x}$ の分布が任意の直交変換で不変ならば，ある直交行列 U でそれを直交変換したベクトル $\mathbf{x}' = U^T\mathbf{x}$ の分布は $\mathbf{x}$ と同じ分布になる．

例えばベクトルのすべての座標成分が正規分布 $\mathcal{N}(0,\sigma^2)$ に従う独立な乱数ならば，その分布は任意の直交変換で不変である．すると $\mathbf{x}$ のすべての座標成分が $\mathcal{N}(0,\sigma^2)$ に従う独立な乱数とすると，それをある U で直交変換したベクトル $\mathbf{x}' = U^T\mathbf{x}$ もすべての座標成分が $\mathcal{N}(0,\sigma^2)$ に従う独立な乱数になる．

このことから，ベクトル $\mathbf{x}$ をその確率分布に従って生成して，それから関係 $\mathbf{x}' = U^T\mathbf{x}$ を用いて $\mathbf{x}'$ を作るのではなくて，ベクトル $\mathbf{x}'$ を直接その確率分布に従って生成する．それであれば行列 U を知らなくても生成ができる．

5.2 QR 分解による，正規直交基底の構成

QR 分解を用いて正規直交基底を構成する過程を，直交行列 U による座標変換の前後で比較すると以下のようになる．

- <u>変換前の座標で</u>：ベクトルの組 X がフルランクのとき，X の QR 分解が $X = QR$ になったとなる．
- <u>変換後の座標で</u>：ベクトルの組 X' がフルランクのとき，X' の QR 分解が $X' = Q'R'$ になったとなる．

このとき $X' = U^T X$ であれば，(フルランクの行列に対する QR 分解の一意性により) 分解で得られた正規直交基底の列ベクトルを並べた組の間には $Q' = U^T Q$ の関係があり，右側の上三角因子は共通で $R'{=}R$ となる．

つまり座標の直交変換により，算法への入力であるベクトルの組が変換されるのと同じように算法から出力される正規直交基底の組も変換される．

5.3 列交換付き QR 分解による，正規直交基底の構成

列交換によるピボット操作を入れた QR 分解を用いて正規直交基底を構成する過程を，直交行列 U による座標変換の前後で比較すると，以下のようになる．

- <u>変換前の座標で</u>：ベクトルの組 X の列交換（ピボット選択）を伴う QR 分解が $XP = QR$ になったとする，ここで P は列交換の置換を表す行列である．
- <u>変換後の座標で</u>：ベクトルの組 X' の列交換を伴う QR 分解が $X'P' = Q'R'$ になったとする，ここで P' は列交換の置換を表す行列である．

このとき $X' = U^T X$ であれば，正規直交基底の列ベクトルを並べた組の間には $Q' = U^T Q$ の関係があり，置換の行列は共通で $P'{=}P$，さらに右側の上三角因子も共通で $R'{=}R$ となる．

つまり座標の直交変換により，算法への入力であるベクトルの組が変換されるのと同じように算法から出力される正規直交基底の組も変換される．

但し，列の交換操作は最初から最後まで双方で完全に一致する必要がある．そのためにはピボット列の選択基準にはベクトルの「2-ノルム」を用いるほか，2-ノルムが最大である列が複数ある場合には，その中からたとえば列の番号が最も小さいものを選択すると決めておく．（もちろん数値計算では誤差の影響により判定がずれて双方でピボット列の選択に相違が生じてしまう可能性がある．その場合にはつぎのように理解する：「ベクトルの組 X' の列交換を伴う QR 分解を計算して $X'P' = Q'R'$ になったとする．そのとき，$X' = U^T X$ を満たす X に対して，$Q' = U^T Q$ を満たす Q，$P{=}P'$，$R{=}R'$ を用いると　数値的には $XP = QR$

がなりたつ．つまり元の座標では分解がそのようになったとしても矛盾しない.」）

さらにベクトルの 2-ノルムは座標の直交変換で不変な量なので，閾値 ε_{QR} を導入してピボット列のベクトルの「2-ノルム」が閾値未満のところで切断を入れて構成する直交基底の階数を下げる場合にも，その切断の状況は双方の座標で共通になる．（もちろんこれも数値計算であれば誤差の影響により閾値による判定が異なれば双方の間で階数に違いが生じてしまうが，その場合には「数値誤差しだいでは他方の座標に於ける計算でも，同じ判定が選択されえるものである」と考える）.

5.4 特異値分解による，正規直交基底の構成

特異値分解を用いて正規直交基底を構成する過程を，直交行列 U による座標変換の前後で比較すると，以下のようになる.

- 変換前の座標で：ベクトルの組 X の特異値分解が $X = Q\Sigma W$ になったとする.
- 変換後の座標で：ベクトルの組 X' の特異値分解が $X' = Q'\Sigma' W'$ になったとする.

このとき，$X' = U^T X$ であれば，特異値行列は共通で $\Sigma' = \Sigma$，さらに正規直交基底の列ベクトルを並べた組は $Q' = U^T Q$ で且つ $W' = W$ である，「としてもよい」.

つまり座標の直交変換により，算法への入力であるベクトルの組が変換されるのと同じように算法から出力される正規直交基底の組も変換される，「としてもよい」.

特異値に縮退がないときは，特異値分解は一意に定まるから，$X' = U^T X$ であれば $Q' = U^T Q$，$\Sigma' = \Sigma$，$W' = W$ になる．もしも特異値に縮退があると，その場合にも特異値行列 Σ は一意であるが，それ以外の行列の因子 Q や W（あるいは Q' や W'）は一意ではなくなる．この場合にもつぎのように理解できる：「ベクトルの組 X' の特異値分解を計算して $X' = Q'\Sigma' W'$ になったとする．そのとき，$X' = U^T X$ を満たす X に対して，$Q' = U^T Q$ を満たす Q と，$\Sigma' = \Sigma$，$W' = W$ を用いれば $X = Q\Sigma W$ がなりたつ．つまり元の座標では特異値分解がそのようにできていたとしても矛盾しない.」

あるいは特異値分解が一意ではない場合には，縮退する特異値の自由度に対する回転行列を $\mathcal{R}$ とするとき，$\mathcal{R}$ は縮退した特異値の構造と対応するブロックを並べた対角行列で各ブロックは直交行列である．X' の特異値分解を $X' = Q'\Sigma W'$ とするとき，$\mathcal{R}^T\Sigma\mathcal{R} = \Sigma$ を満たす任意の回転行列 $\mathcal{R}$ による変換 $Q' \leftarrow Q'\mathcal{R}$，$W' \leftarrow \mathcal{R}^T W$ の自由度だけがある．すると特異値分解が一意にならない場合でも，正規直交基底である Q の列ベクトルが張る空間と正規直交基底である Q' の列ベクトルが張る空間はどちらも一意に定まり，Q' の列ベクトルの張る空間と $U^T Q$ の列ベクトルの張る空間は一致することがわかる.

さらに，閾値 ε_{SV} を導入して特異値が閾値未満のところで切断を入れて特異ベクトルの組の階数を低下させる場合でも，X と $U^T X$ のそれぞれの特異値分解の特異値行列 Σ，Σ' は（数学的には）常に一致するので，閾値との比較で決まる階数は双方の座標で共通となる．数値計算による誤差の影響で閾値との比較で相違が生じる可能性については，数値誤差しだいでは他方の座標に於いてもそのようにもなりうるものである，として受け入れることにする.

6. 双方の座標からみたフィルタ対角化法の計算の過程

フィルタ対角化法の計算の過程を，ステップ 1 からステップ 5 までを元の座標に於いてと係数行列を対角にする基準座標に於いて双方について並べて記述してみると，以下のようになる.

(1) ● 元の座標で：まず m 個のランダムなベクトル $\mathbf{x}^{(j)}$，j=1, 2, ..., m の組を 1 個生成し，次にそれらを正規直交化して得られた組を X とする.
● 基準座標で：まず m 個のランダムなベクトル $\mathbf{x}'^{(j)}$，j=1, 2, ..., m の組を 1 個生成し，次にそれらを正規直交化して得られた組を X' とする（このとき両者は $X' = U^T X$ の関係で結ばれていた，と思うことにする）.
実際は $\mathbf{x}^{(j)}$ をまったく参照せずに，$\mathbf{x}'^{(j)}$ を各座標成分を正規分布 $\mathcal{N}(0, \sigma^2)$ に従う独立な乱数のベクトルとして生成する（$\sigma = 1$ で良い）．行列 A の固有値の分布 D は（模倣を実施するために）情報として用いるが，U については（直交行列であること以外の）情報はないとする．そのため，ある決めた $\mathbf{x}'$ に対応する元の $\mathbf{x}$ を決めることはできないが，結果的にベクトル $\mathbf{x}$ がその各座標成分が $\mathcal{N}(0, \sigma^2)$ に従う独立な乱数であるベクトルのサンプルであることには矛盾しない（注：これは同一の確率分布を持つランダムなサンプルをとりだす操作は同等とみなす，という一種のトリックである）.

(2) ● 元の座標で：正規直交性を課したランダムベクトルの組 X（$X^T X = I$）にフィルタ $\mathcal{F}_A$ を作用させて，濾過されたベクトルの組 $Y = \mathcal{F}_A X$ を得たとする.
● 基準座標で：正規直交性を課したランダムベクトルの組 X'（$X'^T X' = I$）にフィルタ $\mathcal{F}_D$ を作用させて，濾過されたベクトルの組 $Y' = \mathcal{F}_D X'$ を得たとする（そのとき両者の間には $Y' = U^T Y$ の関係がある）.

(3) ● 元の座標で：フィルタ $\mathcal{F}_A$ からの m 個の出力ベクトルの組である Y から，r 個（$r \leq m$）の正規直交ベクトルの組を基底として作り，それらを並べた $N \times r$ 行列を Z とする.
Y から Z を作る方法には，閾値 ε_{QR} による切断正則化を加えた列交換を行う QR 分解，またはより良い結

果を与える閾値 ε_{SV} による切断正則化を加えた特異値分解などがある．

● 基準座標で：フィルタ $\mathcal{F}_D$ からの m 個の出力ベクトルの組である Y' から，r 個（$r \leq m$）の正規直交ベクトルの組を基底として作り，それらを並べた $N \times r$ 行列が Z' になる．

Y' から Z' を作る方法には，閾値 ε_{QR} による切断正則化を加えた列交換を行う QR 分解，またはより良い結果を与える閾値 ε_{SV} による切断正則化を加えた特異値分解などがある．（そのとき両者の間には $Z' = U^T Z$ の関係がある．）

(4) ● 元の座標で：Z を基底として，Rayleigh-Ritz 法を行列 A の標準固有値問題に適用して Ritz 対を得て，それから選別により近似固有対を得る（選別は固有値の範囲や残差の 2-ノルムなどに基づいて行う）．つまり，r 次の実対称行列 $\alpha = Z^T AZ$ の固有値問題を解いてその固有対を (θ, u) とするとき，Ritz 対は (θ, Zu) になる．

● 基準座標で：Z' を基底として，Rayleigh-Ritz 法を行列 D の標準固有値問題に適用して Ritz 対を得てそれから選別により近似固有対を得る（選別は固有値の範囲や残差の 2-ノルムなどに基づいて行う）．つまり，r 次の実対称行列 $\alpha' = Z'^T DZ' = Z^T UDU^T Z = Z^T AZ = \alpha$ となり，だから，r 次の小規模行列 $\alpha' (= \alpha)$ の固有値問題の固有対としてやはり (θ, u) がとれる（固有値 θ に縮退がなければ必ず一致するが，縮退があっても一致するように選べる）．そうしてそのとき Ritz 対は $(\theta, Z'u)$ になる（これは $(\theta, U^T Zu)$ に等しい）．

つまり，双方の間で近似対の固有値の組は一致する．また，元の座標での近似対のベクトルを $\mathbf{v}$ とするとき，変換された座標から眺めたときの近似対のベクトル $\mathbf{v}'$ は，$\mathbf{v}' = U^T \mathbf{v}$ となるようにとれる．（近似固有値に縮退がなければ）対応する近似固有ベクトルの間には，$\mathbf{v}' = U^T \mathbf{v}$ の関係が成り立つ．もしも真の固有値に縮退がなければ，必要な真の固有値 λ_j をもつ真の固有ベクトルは U の第 j 列目であり，それに対応する $\mathbf{v}'$ は（符号を除けば）基本単位ベクトル $\mathbf{e}'_j$ となる．基本単位ベクトルからのずれは，近似固有ベクトルの中に別の真の固有ベクトルが混入している状況を表す．

(5) ● 元の座標で：ある得られた近似固有対を $(\theta, \mathbf{v})$ とするとき，その近似固有値 θ の誤差は，θ とある真の固有値との間の距離である．近似対の残差ベクトルは $\mathbf{r} = (A - \theta I)\mathbf{v}$ で，その残差の 2-ノルムは $||\mathbf{r}||_2 = \sqrt{\mathbf{r}^T \mathbf{r}}$ である．

● 基準座標で：ある得られた近似固有対を $(\lambda', \mathbf{v}')$ とするとき，その近似固有値 λ' の誤差は，λ' とある真の固有値との間の距離である．近似対の残差ベクトルは $\mathbf{r}' = (D - \theta I)\mathbf{v}'$ で，その残差の 2-ノルムは $||\mathbf{r}'||_2 = \sqrt{\mathbf{r}'^T \mathbf{r}'}$ である．

そのとき両者で残差ベクトルの間には $\mathbf{r}' = U^T \mathbf{r}$ の関係があるから，$||\mathbf{r}'||_2 = ||\mathbf{r}||_2$ となり両者の残差の 2-ノルムは一致する．

7. 基準座標でのフィルタ対角化法の計算手順のまとめ

以上をまとめると，フィルタ対角化法による近似解の誤差をその計算の過程を基準座標に於いて模倣して求める手順は以下のようになる．

(1) m 個のランダムな N 次ベクトル $\mathbf{x}'^{(j)}$，j=1, 2, ..., m を発生させる．そうしてその後に，それらを正規直交化したベクトルの組 X' を作る．

(2) ベクトルの組 X' をフィルタ $\mathcal{F}_D$ を用いて濾過して，$Y' = \mathcal{F}_D X'$ をつくる．このフィルタ $\mathcal{F}_D$ は対角行列なので，ベクトルに作用させるのは簡単である．（固有値を並べた対角行列が $D = \mathrm{diag}_i[\lambda_i]$ であるとき，$\mathcal{F}_D = \mathrm{diag}_i[f(\lambda_i)]$ である．ここで $f(\lambda)$ はフィルタ $\mathcal{F}$ の伝達関数．）

(3) 組 Y' から線形結合により r 個（$r \leq m$）の正規直交ベクトルを基底として作り出し，それらを並べた $N \times r$ 行列を Z' とする．

組 Y' から正規直交基底 Z' を作る方法には，

(a) 列交換を行う QR 分解でベクトルの 2-ノルムの閾値による切断を入れた方法,

(b) （より良い）特異値分解で特異値の閾値による切断を入れた方法,

(c) （最も優れた）フィルタ作用素の近似固有対を求めて，その固有値の大きさをフィルタの伝達特性から決まる閾値により切断して固有ベクトルを集めて基底とする方法 [2], [3]（この方法の直交変換 U による算法の変換性の考察は省略),

がある．

(4) Z' を基底として対角行列 D の標準固有値問題に Rayleigh-Ritz 法を（あえて）適用し，得られた Ritz 対を選別して D の近似固有対とする．つまり，小規模な r 次の実対称行列 $\alpha' = Z'^T DZ'$ を作り，α' の固有対として (θ', u') を得たら，それに対応する Ritz 対は $(\theta', \mathbf{v}')$ になる，但し $\mathbf{v}' = Z'u'$ である．

Ritz 対から近似固有対を選別するのには，その固有値の範囲や残差の 2-ノルムなどに基づいて行う．

(5) この近似固有値 θ' は θ と等しい．（但し，θ は元の座標に於いて行列 A の固有値問題に対してフィルタ対角化法を m 個のランダムなベクトル $\mathbf{x}^{(j)}$，j=1, 2, ..., m を与えた場合に得られる近似対の固有値である．但し $\mathbf{x}'^{(j)} = U^T \mathbf{x}^{(j)}$ とする．）

また近似対 $(\theta', \mathbf{v}')$ の残差ベクトルを $\mathbf{r}' = (D - \theta' I)\mathbf{v}'$ とすると，残差ベクトルの 2-ノルム $||\mathbf{r}'||_2$ は $||\mathbf{r}||_2$ に

等しい（$\mathbf{r}$ は元の座標で計算した場合に対応する近似対の残差ベクトルである）．

θ や $||\mathbf{r}||_2$ のような直交変換で不変な量は，基準座標に於いて模倣された計算から（U の情報を使わないで）求めることができる．

これは，通常のフィルタ対角化法を対角行列 D に直接適用したのと同じ形をしている．但し D に対するフィルタの作用の実現には，対角行列 D のレゾルベントの線形結合を用いるかわりに，各固有値に対する伝達関数の値（伝達率）を並べた対角行列を乗じることで効率をさらに上げている．この計算の中では行列 A の固有値分布である D は用いているが，直交変換を決める行列 U は用いていない．

8. 実験例

8.1 例 1（N=10,000 でフィルタの次数は 16 次）

標準固有値問題 $A\mathbf{v}=\lambda\mathbf{v}$ で，対称行列 A の次数を N=10,000（一万）とする．

係数行列 A の区間 $[-1,1]$ にある求めたい固有値は全部で 10 個とし，それらの値を $\cos(1/j)$，j=1, 2, …, 10 により与えて，残りの $(N-10)$ 個の固有値は区間 $[-1,1]$ の外側になるように $\lambda_j=1+0.1\times(j-10)$，$j$=11, 12, …, N と設定した．

ランダムなベクトルの個数は m=30 とし，各ベクトルの座標成分を分布 $\mathcal{N}(0,1)$ に従う独立な標準正規乱数で生成して，生成された m 個のベクトルを正規直交化した後にフィルタで濾過した．

使用したフィルタの伝達関数 $f(x)$ は Chebyshev 型で $n=8$ とし，標準区間が $[-1,1]$ の n 次 Chebyshev 多項式 $T_n(x)$ を用いて $f(x)=2/(1+T_n^2(x))$ とした（**図 1**）．これは有理関数としては 16 次であり，実軸上では正値で，区間 $[-1,1]$ に於いて 1 以上の値を常にまたそのときに限ってとる．

フィルタで濾過されたベクトルからは特異値分解により正規直交基底を作った．特異値の閾値による切断は起こらず，基底の階数は 30 となった．最大および最小の特異値の値は 1.6×10^{1}，5.2×10^{-12} であった．

フィルタ対角化法を模倣して得られた近似対（Ritz 対）の固有値，その真の固有値からの誤差，残差の 2-ノルムの値を表にして示す（**表 1**）．表中で 10 番目のところで横線を引いてある．近似対の順位は Rayleigh-Ritz 法で得た順のままにしてあり，特異値の順に正規直交基底が並んでいた傾向をよく残すものになる．計算はすべて倍精度演算で行っている．

8.2 例 2（N=10,000 でフィルタの次数は 32 次）

この例の固有値問題の次数は $N=10,000$（一万）で係数行列の固有値分布は例 1 の場合と同じ設定にしている．

ランダムなベクトルの個数も例 1 と同じ m=30 にして，

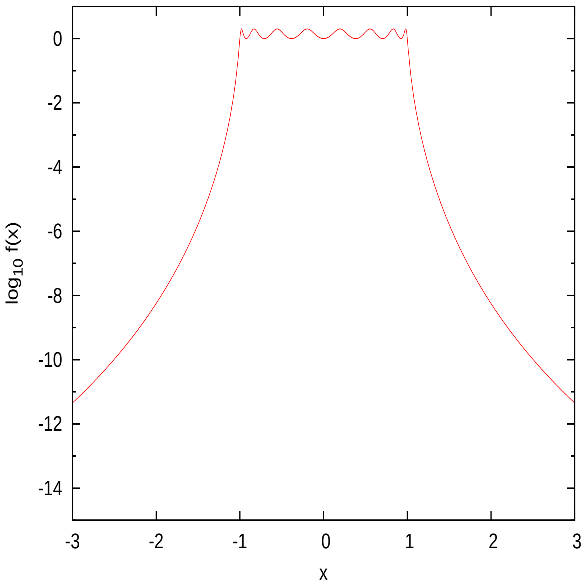

図 1 Chebyshev 型の 16 次有理関数の伝達関数 $f(x)$

表 1 例 1：近似対（次数 N=10,000 でフィルタは 16 次）

順位	近似対の固有値	固有値の誤差	残差の 2 ノルム
1	0.540302305868140	-1.1E-16	1.5E-11
2	0.992197667229329	1.1E-16	1.0E-11
3	0.877582561890373	-1.1E-16	1.1E-12
4	0.995004165278026	-1.1E-16	1.4E-11
5	0.980066577841242	1.1E-16	4.1E-12
6	0.986143231562925	1.1E-16	7.0E-12
7	0.989813260446615	-2.2E-16	1.5E-11
8	0.993833508538892	0.0E+00	6.6E-12
9	0.968912421710645	2.2E-16	3.9E-12
10	0.944956946314738	1.1E-16	1.0E-11
11	1.100000000000000	2.2E-16	1.8E-09
12	1.200000000000001	6.7E-16	2.3E-08
13	1.300000000000006	6.2E-15	1.0E-07
14	1.400000000000047	4.8E-14	2.7E-07
15	1.500000000026651	2.7E-11	6.3E-06
16	1.600000000266493	2.7E-10	1.9E-05
17	1.700000000937598	9.4E-10	3.6E-05
18	1.800000001873654	1.9E-09	5.0E-05
19	1.900000270503881	2.7E-07	5.4E-04
20	2.000002633521937	2.6E-06	1.6E-03
21	2.100000756615423	7.6E-07	8.3E-04
22	2.200005248160661	5.2E-06	2.1E-03
23	2.300033431938047	3.3E-05	4.8E-03
24	2.400023224091900	2.3E-05	4.2E-03
25	2.500043828353203	4.4E-05	5.0E-03
26	2.603212572631922	3.2E-03	3.3E-02
27	2.723680735113654	2.4E-02	8.2E-02
28	2.946298081510580	4.6E-02	8.5E-02
29	3.032569702219901	3.3E-02	7.7E-02
30	2.812352680630199	1.2E-02	7.1E-02

各ベクトルの座標成分を分布 $\mathcal{N}(0,1)$ に従う独立な標準正規乱数で生成し，生成された m 個のベクトルを正規直交化した後にフィルタで濾過した．実際にはこの例 2 では例 1 で用いたのとまったく同じ（擬似）乱数ベクトルの組が使われている．

この例 2 で使用したフィルタの伝達関数 $f(x)$ は Chebyshev 型で $n=16$ とし，標準区間が $[-1,1]$ の n 次 Chebyshev

多項式 $T_n(x)$ を用いて $f(x) = 2/(1+T_n^2(x))$ とした (**図 2**).これは有理関数としては 32 次であり，実軸上では正値で，区間 $[-1, 1]$ に於いて 1 以上の値を常にまたそのときに限ってとる．

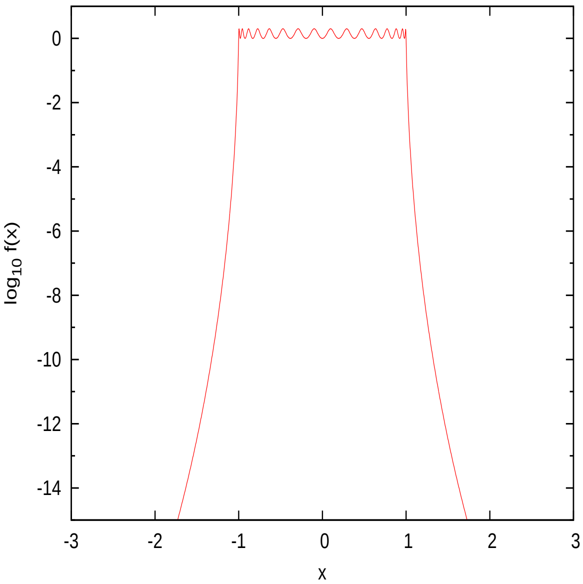

図 2　Chebyshev 型の 32 次有理関数の伝達関数 $f(x)$

フィルタで濾過されたベクトルからは特異値分解により正規直交基底を作った．特異値の閾値による切断により基底の階数は 15 になった．最大および最小の特異値の値は $1.4{\times}10^1$，$1.5{\times}10^{-12}$ であった．

フィルタ対角化法を模倣して得られた近似対（Ritz 対）の固有値，その真の固有値からの誤差，残差の 2-ノルムの値を表にして示す（**表 2**）．表中で 10 番目のところで横線を引いてある．近似対の順位は Rayleigh-Ritz 法で得た順のままにしてあり，特異値の順に正規直交基底が並んでいた傾向をよく残すものになる．計算はすべて倍精度演算で行っている．この 1 回分の計算の経過時間は，intel Core2 Quad Q6600 (2.4GHz) の 1 コアだけを用いて 0.045 秒程度であった．

ランダムベクトルの組を生成する乱数の初期値を変更して，それ以外はまったく同じ設定で計算した例を（**表 3**）に掲げる．但し，比較を容易にするために，近似対を固有値が同じ順で現れるように順番を並べ替えている．

8.3　例 3（N=1000, 000 でフィルタの次数は 32 次）

標準固有値問題 $A\mathbf{v}=\lambda\mathbf{v}$ で，対称行列 A の次数を N=1000, 000（百万）とする．

係数行列 A の区間 $[-1, 1]$ にある求めたい固有値は全部で 10 個とし，それらの値を $\cos(1/j)$，j=1, 2, . . ., 10 により与えて，残りの $(N-10)$ 個の固有値は区間 $[-1, 1]$ の外側になるように λ_j=$1+0.1\times(j-10)$，j=11, 12, . . ., N と設定した．

表 2　例 2：近似対（次数 N=10, 000 でフィルタは 32 次）

順位	近似対の固有値	固有値の誤差	残差の 2 ノルム
1	0.995004165278026	0.0E+00	1.8E-15
2	0.989813260446615	-3.3E-16	3.7E-15
3	0.992197667229329	1.1E-16	1.4E-15
4	0.540302305868140	-1.1E-16	4.6E-15
5	0.877582561890373	0.0E+00	2.3E-15
6	0.993833508538892	0.0E+00	5.7E-16
7	0.944956946314738	1.1E-16	1.4E-15
8	0.986143231562925	1.1E-16	3.2E-15
9	0.980066577841242	2.2E-16	6.8E-16
10	0.968912421710645	0.0E+00	9.3E-16
11	1.100000000000000	-2.2E-16	6.9E-10
12	1.200000000000031	3.1E-14	1.1E-07
13	1.300000000074623	7.5E-11	4.8E-06
14	1.400000105285343	1.1E-07	1.5E-04
15	1.500015142189131	1.5E-05	1.2E-03

表 3　例 2 その 2：近似対（次数 N=10, 000 でフィルタは 32 次）

順位	近似対の固有値	固有値の誤差	残差の 2 ノルム
4	0.995004165278026	1.1E-16	3.5E-16
10	0.989813260446615	0.0E+00	4.0E-15
1	0.992197667229329	0.0E+00	1.4E-15
9	0.540302305868140	0.0E+00	3.5E-15
5	0.877582561890373	-1.1E-16	6.4E-15
3	0.993833508538892	0.0E+00	1.2E-15
8	0.944956946314738	1.1E-16	1.6E-15
6	0.986143231562925	-3.3E-16	4.2E-15
2	0.980066577841242	0.0E+00	3.1E-15
7	0.968912421710645	-2.2E-16	5.3E-15
11	1.100000000000000	-2.2E-16	3.0E-10
12	1.200000000000070	7.0E-14	1.7E-07
13	1.300000000052550	5.3E-11	4.1E-06
14	1.400000133548252	1.3E-07	1.6E-04
15	1.500063838100164	6.4E-05	2.5E-03

ランダムなベクトルの個数を同じく m=30 として，各ベクトルの座標成分を分布 $\mathcal{N}(0, 1)$ に従う独立な標準正規乱数で生成し，生成された m 個のベクトルを正規直交化した後にフィルタで濾過した．

この例 3 で使用したフィルタの伝達関数 $f(x)$ は例 2 で使用したものと完全に同一である．

フィルタで濾過されたベクトルからは特異値分解により正規直交基底を作った．特異値の閾値による切断により基底の階数はこれも 15 になった．最大および最小の特異値の値は $1.4{\times}10^1$，$1.4{\times}10^{-12}$ であった．

フィルタ対角化法を模倣して得られた近似対（Ritz 対）の固有値，その真の固有値からの誤差，残差の 2-ノルムの値を表にして示す（**表 4**）．表中で 10 番目のところで横線を引いてある．近似対の順位は Rayleigh-Ritz 法で得た順のままにしてあり，特異値の順に正規直交基底が並んでいた傾向をよく残すものになる．計算はすべて倍精度演算で行っている．この 1 回分の計算の経過時間は，intel Core2 Quad Q6600 (2.4GHz) の 1 コアだけを用いて 4.00 秒程度であった．

9.　議論

フィルタ対角化法で得られる近似解の数値結果は，最初

表 4 例 3：近似対（次数 N=1000,000 でフィルタは 32 次）

順位	近似対の固有値	固有値の誤差	残差の 2 ノルム
1	0.995004165278026	0.0E+00	1.2E-15
2	0.540302305868140	-1.1E-16	9.9E-15
3	0.993833508538892	-1.1E-16	4.6E-16
4	0.877582561890373	2.2E-16	2.5E-15
5	0.968912421710645	-1.1E-16	3.7E-15
6	0.992197667229329	-2.2E-16	2.6E-15
7	0.989813260446615	-1.1E-16	5.1E-16
8	0.986143231562925	-1.1E-16	3.7E-15
9	0.944956946314737	-2.2E-16	3.8E-15
10	0.980066577841241	-2.2E-16	2.9E-15
11	1.100000000000000	-2.2E-16	5.4E-11
12	1.200000000000041	4.2E-14	1.3E-07
13	1.300000000105001	1.1E-10	5.6E-06
14	1.400000008567420	8.6E-09	4.6E-05
15	1.500040992416029	4.1E-05	2.0E-03

に与えるランダムなベクトルの組を変更するとそれに伴って値も変化するが，ランダムなベクトルの組のとり方が十分に一般性を持つならば，殆どすべての場合には結果に大きな相違が出ない性質を持つはずである．もしもそうでなければ算法は実用性に乏しいと言える．このことについて，統計的な理論と実験により分析を進めることが望ましい．例えば，ランダムに発生させた m 個のベクトルを正規直交化して得たベクトルの組が，もしもある特定の固有ベクトルを非常に僅かな割合でしか含んでいないという不運な状況が起きたならば，そのときは（演算に用いている数値の精度やフィルタの特性，採用している各種の閾値などにも関係するが）フィルタ対角化法が与える近似解にはその固有ベクトルの固有対は出てこないことになる．ベクトルの個数 m がある程度大きければそのような不運な状況は殆ど発生しないはずであるが，このようなリスクをあらかじめ統計的に解析して評価することが望ましい．もちろんランダムな現象はモンテカルロ法で実験することもできる．カイ 2 乗分布の知識を用いると，正規直交化を行う前であれば各座標成分が $\mathcal{N}(0,1)$ の分布を持つ独立な乱数である N 次ランダムベクトルの m 個の組に対して，ベクトルの（任意の）第 k 座標成分の m 個の平方和の平方根が「非常に小さいある値 p」以下となる確率は $O(p^{m-1})$ で，m がある程度大きいと非常に小さい値になる（つまりある特定の固有ベクトルが m 個のランダムなベクトルのどれにも極めて少しの割合しか含まれていない状況はほとんど起きない）．

今回の方法の中では理論的な観点から，ランダムなベクトルはその座標成分を正規分布 $\mathcal{N}(0,\sigma^2)$ に従う独立な乱数にすると，その分布が座標の直交変換で不変になる，という性質を利用している（しかし正規乱数の生成は一様乱数の場合に比べて手間がかかるので，例えばランダムなベクトルの組を 1 例だけ計算するときには，これまではベクトルの各成分には区間 $[-1,1]$ 上の一様乱数を採用してきた．）

直交変換で移りあう 2 つの座標の双方に於いて，ランダムなベクトルの組を直交変換で不変な分布となるようにそれぞれ生成してフィルタ対角化法を行うときには，その計算で得られる直交変換で不変な量の統計量は双方で一致するはずである．例えば固有値問題の係数行列の真の固有値分布を与えておいて，その問題に対して得られる近似対の固有値の誤差や残差の 2-ノルムの平均値や分散などを多数回の試行による一種のモンテカルロ法で統計的に求めるられるであろう．このような用途であれば計算量を模倣により減らせることは特に役に立つ．

但し，今回の直交変換に関する算法の不変性の議論は，数値丸め誤差の影響を完全に無視しているものであるから，例えばフィルタの作用を計算する際の数値誤差の振る舞いは係数が対角ではない一般の場合と対角の場合とでは同じにはならないはずで，近似対の固有値の誤差や残差の 2-ノルムの値などは模倣を用いた場合とそうでない場合とでは傾向が違っている可能性はある．

10. おわりに

今回紹介した方法は，フィルタ対角化法で任意に与えた固有値問題の近似固有対を求めるためのものではなくて，フィルタ対角化法で固有値分布を既知に設定した固有値問題の例題を解いたときに得られる近似固有対の誤差を少ない計算量で求めるためのものである．フィルタ対角化法で得られる近似対の「固有値」,「残差の 2-ノルム」のサンプルが少ない計算量で得られるので，近似解の誤差の振る舞いを調べるために「フィルタの伝達特性」,「固有値分布」,「ランダムなベクトルの組」を変えた多数の例について計算をすることが容易になる．

参考文献

[1] 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 (2010), pp.1–21.

[2] 村上 弘: フィルタで濾過されたベクトルの組から不変部分空間の直交基底の組を近似構成するフィルタ対角化法, **情報処理学会研究報告**, Vol.2011-HPC-129, No.1 (2011), pp.1–8.

[3] 村上 弘: 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, **先進的計算基盤システムシンポジウム** *SACSIS2011* **論文集** (電子版), (2011), pp.332–339.

[4] 村上 弘: 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, **情報処理学会論文誌：コンピューティングシステム** (ACS35), Vol.4, No.4 (2011), pp.1–14.

[5] 村上 弘:フィルタ対角化法と共鳴の困難について, **情報処理学会研究報告**, Vol.2012-HPC-136, No.16(2012),pp.1–9.

[6] 伏見 正則:「乱数」, (第 2 章:各種の分布に従う乱数の生成), 東京大学出版会,1989.

[7] 四辻 哲勝: 「計算機シミュレーションのための 確率分布乱数生成法」, (第 3.1 節:正規分布に従う乱数), プレアデス出版,2010.