レゾルベントの線形結合によるフィルタ対角化法

村 上 弘[†1]

実対称定値一般固有値問題 $A\mathbf{v} = \lambda B\mathbf{v}$ の，指定された区間内に固有値を持つ全固有対を，Rayleigh-Rits 法に基づくフィルタ対角化法を解法に用いて求める．レゾルベントのスペクトル表示に基づいて，相異なる複素シフト量 ρ_i のレゾルベント $(A - \rho_i B)^{-1}$ の線形結合によるフィルタを，区間内の固有値を持つ固有ベクトルの成分はよく透過させるがそれ以外の成分を強く減衰させるように構成できる．固有値が区間内にある固有ベクトル全体が張る部分空間の近似を，フィルタを通した十分多くのベクトルを集めて構成し，その近似部分空間に対し Rayleigh-Ritz 法を適用すると，固有値が区間近傍にある固有対の良い近似を得る．本論文では帯行列の場合を対象として実験を行い，得られた近似固有対の改良には通常の逆反復法を用いた．

A Filter Diagonalization Method by the Linear Combination of Resolvents

Hiroshi Murakami[†1]

For a given real symmetric definite generalized eigenproblem $A\mathbf{v} = \lambda B\mathbf{v}$, we solve those eigenpairs whose associated eigenvalues are in the specified interval. The filter diagonalization method is used as the solution method which is based on the Rayleigh-Ritz method. From the spectral representation of the resolvent, a construction of the filter in the form of the linear combination of resolvents $(A - \rho_i B)^{-1}$ with different complex shifts ρ_i is derived, which passes those components of eigenvectors whose eigenvalues are in the interval well but strongly damps the other components. From the sufficiently many output vectors from the filter, an approximation of the subspace spanned by those eigenvectors whose eigenvalues are in the interval is constructed, then the Rayleigh-Ritz method is applied to obtain the good approximations of those eigenpairs whose eigenvalues are in the neighbor of the interval. In this paper, the experiments are made on the banded matrices, and the obtained eigenpairs are improved by the ordinal inverse iterations.

1. はじめに

1.1 本研究の問題の設定

本研究では，一般固有値方程式 $A\mathbf{v} = \lambda B\mathbf{v}$ に対し，固有値 λ が指定された実区間 $I = [\alpha, \beta]$ 内にある固有対 $(\lambda, \mathbf{v})$ をすべて求めることを問題にする．ここで行列 A，B は実対称で B は正定値とする．

1.2 FEM による固有値問題とその性質

理工学の多くの問題で現れる自己随伴型の線形微分作用素 $\mathcal{T}$ の固有値問題を，基底関数系 $\{\phi_i\}$ による解の線形展開を用いて有限要素法（FEM）で離散化すると，行列の一般固有値問題 $A\mathbf{v} = \lambda B\mathbf{v}$ に帰着する[22]．このため，行列の一般固有値問題は重要度が高い（典型的な例には弾性体の固有振動問題や量子多体問題の Hartree-Fock 近似/密度汎関数法で現れる（線形化された）SCF 方程式などがあげられる）．

$A_{i,j} \equiv (\phi_i, \mathcal{T}\phi_j)$ は $\mathcal{T}$ の自己随伴性から対称，$B_{i,j} \equiv (\phi_i, \phi_j)$ は基底関数系の質量行列で対称正定値，$\mathbf{v}$ は解の線形展開係数を並べたベクトルである．

FEM の展開基底に採用した関数の台が局所性を持つとき，行列の要素 $A_{i,j}$，$B_{i,j}$ は基底関数 ϕ_i と ϕ_j の台が重なりを持つ場合にだけ値が非零となるので，一般に A，B は疎行列となる．FEM の要素分割を細かくして係数行列 A，B が大次元化しても，行あたりの非零要素数は定数で抑えられる．そこで係数 A，B が疎行列であるという性質を有効に利用することが実用上きわめて重要になる．

また，FEM による離散化で生じた行列の一般固有値問題では，その全部の固有解ではなくて少数個の解だけが必要なことが多い．たとえば振動問題では，振動数の低い側から数個〜数十個程度などである．

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

2. 代表的な解法

2.1 標準固有値問題を経由する解法

問題の行列が密の場合には，B を Cholesky 法で LL^T と分解し，$H = L^{-1}AL^{-T}$ を（対称性を利用して演算量を節約し）具体的に構成し，問題をまず対称行列 H の標準固有値問題に帰着させることが通常よく用いられる．この方法を疎行列の問題に適用すると，たとえば A，B が帯行列であっても H は密行列となり，疎行列を扱う利点が失われる．

2.1.1 Crawford の算法

A，B が半帯幅 h の対称帯行列の場合に，同じ帯幅の対称行列 H の標準固有値問題へ帰着させる方法としては Crawford の算法[3),6)] があり，演算量は $O(N^2h)$ で，記憶量は帯行列の数本分を用いるだけで済む．帯幅 h が N に比べて小ならば記憶量的にはきわめて有利だが，変形の演算量は N の二乗に比例する．またもしも帯幅 h の対称行列 H を三重対角化するならば，その過程の演算量は帯 Householder 法かあるいは Lanczos 法を用いて $O(N^2h)$ であり，N の二乗に比例する．

2.1.2 Lanczos 法による算法

B を Cholesky 法でまず $B = LL^T$ と分解しておけば，行列 $H = L^{-1}AL^{-T}$ を任意のベクトルへ乗じる演算は H を具体的に構成しなくても実施できる．このことを利用して Lanczos 法で H の三重対角化を計算すると，Lanczos 法の内部の反復 1 回あたりの演算量は A，B が帯幅 h の対称行列であるとき $O(Nh)$ で，N 回反復を行って完全な三重対角化を行うための演算量は $O(N^2h)$ となる．

しかし Lanczos 法は数値誤差に弱く不安定性を持つので，三重対角化を完全に実行するのには向かない．他方で反復を N よりもはるかに少ない回数で打ち切って得られる三重対角行列の固有値は，真の固有値分布の両端の固有値に対しては比較的速く収束する性質を持つ（これは冪乗法などと同様である）．この性質を利用するためにスペクトル変形法[5),11)] が用いられる．

2.2 対称定値一般固有値問題の二分法による解法

対称定値一般固有値問題の区間 $[\alpha, \beta]$ 内の固有値の個数は，Sylvester の慣性律から $C(\mu) \equiv A - \mu B$ の修正 Cholesky 分解 LDL^T の D の符号数の $\mu = \alpha$，β での差から求まる．このことを利用して二分法で固有値の存在範囲を探索する方法があり，主に少数個の固有解を計算する用途に使われる[13)]．帯幅 h の行列に対し，修正 Cholesky 分解 1 回の演算量は $O(Nh^2)$ で，指定された区間に固有値が r 個含まれたとして，固有値の分離 1 個あたり平均 t 回の二分法が必要であるとすれば，LDL^T 分解を rt 回程度行い r 個の固有値を分離する演算量は $O(Nh^2rt)$ で N に比例する．固有ベクトルを得るには，固有値の存在範囲を二分法で十分に狭めた後に逆反復法を適用する．固有値がよく分離して分布している場合には固有対 1 個あたりの逆反復法 1 回の演算量は $O(Nh^2)$ である．

2.3 フィルタ対角化法（Chebyshev-Lanczos 法）

フィルタ対角化法[1),2),7)–9),16),20),21)] は，通常は標準固有値問題に対して用いられているようである．

元の問題 $A\mathbf{v} = \lambda\mathbf{v}$ の固有値が分布する範囲を $[\lambda_{\min}, \lambda_{\max}]$ とする．求めたい固有値の区間 $I = [\alpha, \beta]$ の付近でだけ相対的に大きな絶対値を持つ λ の関数をとり，その関数を Chebyshev などの直交多項式列で展開近似して多項式 $P(\lambda)$ を構成する．行列 A の多項式 $P(A)$ を任意のベクトル $\mathbf{x}$ に作用させると，$\mathbf{x}$ に含まれる固有ベクトル成分で固有値が区間 I の付近にあるものは相対的に強まり，それ以外の成分は相対的に減衰する選別作用を持つので，この $P(A)$ を「フィルタ作用素」として用いる．

区間 I に固有値が含まれる固有対の個数を r とすると，フィルタ適用後のベクトルは r 個の固有ベクトルの線形結合でよく近似できる．そのようなベクトルを多数集めて特異値分解を用いて分析すると，r 個の固有ベクトルで張られた空間の基底を近似する基底の組が作れる．その基底を用いて Rayleigh-Ritz 法（文献 14) の §15.10 RR Approximations）により固有値問題の固有対の近似を得る．求めたい固有値の区間 I が A の固有値分布の全範囲に比べて相対的に狭い場合には，多項式フィルタ $P(A)$ の次数を高くとる必要がある．

$P(A)$ をベクトル $\mathbf{x}$ へ作用させる計算には直交多項式の漸化関係式を用いることができる．A はその固有値の分布が範囲 $[-1, 1]$ に入るようにあらかじめ規格化されているとし，P の Chebyshev 多項式による展開を $\sum_{j=0}^{k} c_j T_j$ とする．$\mathbf{y}^{(j)} \equiv T_j(A)\mathbf{x}$ を定義すると，$\mathbf{y}^{(j)}$ は Chebyshev 多項式の漸化式 $T_0(\lambda)=1$，$T_1(\lambda)=\lambda$，$T_{n+1}(\lambda)=2\lambda T_n(\lambda)-T_{n-1}(\lambda)$ から，$\mathbf{y}^{(0)} = \mathbf{x}$，$\mathbf{y}^{(1)} = A\mathbf{x}$，$\mathbf{y}^{(j+1)} = 2A\mathbf{y}^{(j)} - \mathbf{y}^{(j-1)}$ となり，$j = 0$ から始めて j の昇順に $\mathbf{y}^{(j)}$ が計算することで，j の昇順に和をとって $P(A)\mathbf{x} = \sum_{j=0}^{k} c_j \mathbf{y}^{(j)}$ により値が求められることが分かる．

展開係数 c_j は高次側で微小になるので，逆向きに j の降順に和をとれば丸め誤差の減少が期待できる．それには「双対漸化式」[19)] の方法を利用する．いま

$\mathbf{z}^{(k+1)}=\mathbf{0}$，$\mathbf{z}^{(k)}=c_k\mathbf{x}$ から始めて，降順に $j=k-1, k-2,\ldots,0$ と漸化式 $\mathbf{z}^{(j)}=2A\mathbf{z}^{(j+1)}-\mathbf{z}^{(j+2)}+c_j\mathbf{x}$ を計算すると，$P(A)\mathbf{x}=\mathbf{z}^{(0)}$ により求められる．

N 次の疎行列 A の行あたりの非零要素数を平均 f とするとき，A の k 次多項式 $P(A)$ とベクトル $\mathbf{x}$ に対して，漸化式を用いて $P(A)\mathbf{x}$ を求めるための演算量は $O(Nfk)$ となる．

3. フィルタ対角化法の原理

いま，区間 I 内に固有値を持つ固有ベクトル全体が張る部分空間を $\mathcal{S}_I$ とする．そのような固有ベクトル（固有対）の個数 r は $\mathcal{S}_I$ の次元（自由度）に等しい．いま Rayleigh-Ritz 法を部分空間 $\mathcal{S}_I$ に適用すると，I 内に固有値を持つ固有対が全部得られるので，問題は $\mathcal{S}_I$ の具体的な構成に帰着する．

いま区間 I 内に固有値を持つ固有ベクトル成分は通過させるが，それ以外の成分は遮断する理想的なフィルタ特性を持つ線形作用素を $\widehat{\mathcal{F}}$ とする．任意のベクトルに $\widehat{\mathcal{F}}$ を作用させたものは $\mathcal{S}_I$ に入る（つまり作用素 $\widehat{\mathcal{F}}$ は $\mathcal{S}_I$ への射影演算子である）．

一般的なベクトル $\mathbf{x}^{(i)}$ をフィルタに通した結果の出力ベクトル $\mathbf{y}^{(i)}=\widehat{\mathcal{F}}\mathbf{x}^{(i)}$ を十分多く集めると，それらによって $\mathcal{S}_I$ は張られる．m 個のフィルタ出力 $\mathbf{y}^{(i)}$，$i=1,2,\ldots,m$ の階数が r に達して $\mathcal{S}_I$ を張るとき，それらの適切な線形結合として，$\mathcal{S}_I$ の r 個の基底 $w^{(j)}$，$j=1,2,\ldots,r$ が得られる．この基底により表現された $\mathcal{S}_I$ に対し Rayleigh-Ritz 法を適用すれば，必要な固有対がすべて得られる．

実際には数値誤差の存在により，ベクトルの組の階数や線形独立性の判定は曖昧となる．そこで行列 B による計量をベクトルの空間に導入し，閾値による切断を用いて算法を安定化する．

そのほか，実際に用いるフィルタの遮断特性は完全ではないため，不要な固有ベクトルの成分が弱く混入する．このことにより，$\mathbf{y}^{(i)}$，$i=1,2,\ldots,m$ から B-正規直交基底を特異値分解を用いて構成すると，得られる基底の個数 r' は本来の個数 r よりも多くなる．

理想的には構成した r' 個の基底で張られた部分空間 $\mathcal{S}'$ は部分空間 $\mathcal{S}$ を含んだ拡大された空間となるが，現実の数値計算では誤差の影響で 2 つの線形空間は並行性がずれて少し傾いた関係になる．フィルタの遮断特性が鋭利であるほど，不要な固有ベクトル成分が出力に混入しないので，r' が本来の r に比べて大きくなる程度が抑えられるほか，その後に続く丸め誤差や算法の閾値選択からくる影響を減らせて 2 つの空間の傾きの程度が減少することが期待できる．

無作為な初期ベクトル $\mathbf{x}^{(i)}$ の個数 m を増すと，部分空間 $\mathcal{S}_I$ の近似 $\mathcal{S}'$ の品質が平均的に向上すると期待できる．個数 m は固有対の個数 r 以上であることが必要だが，r よりもある程度大きくする（たとえば r の 1.5〜2 倍程度）．

4. レゾルベントを用いたフィルタ

4.1 フィルタ $\mathcal{F}$ の具体的構成法

いま μ 番目の固有対を $(\lambda_\mu,\mathbf{v}_\mu)$ とし，固有ベクトル $\mathbf{v}_\mu$ は B-正規直交とする．

線形作用素 $R(\rho)\equiv(A-\rho B)^{-1}B$ を定義すると，レゾルベント $(A-\rho B)^{-1}$ のスペクトル表示 $(A-\rho B)^{-1}=\sum_\mu \mathbf{v}_\mu\,\mathbf{v}_\mu^T/(\lambda_\mu-\rho)$ を用いれば $R(\rho)\mathbf{v}_\mu=\mathbf{v}_\mu/(\lambda_\mu-\rho)$ である．つまり $\mathbf{v}_\mu$ は作用素 $R(\rho)$ の固有ベクトルで，対応する固有値は $1/(\lambda_\mu-\rho)$ となる．

さらに k 個の相異なる（複素数の）シフト量 ρ_i，$i=1,\ldots,k$ と，対応する k 個の（複素数の）係数 ω_i，$i=1,\ldots,k$ を決めて線形作用素 $\mathcal{F}\equiv\sum_{i=1}^{k}\omega_i R(\rho_i)$ を作ると，$\mathcal{F}\mathbf{v}_\mu = G(\lambda_\mu)\mathbf{v}_\mu$ である．ただし，$G(\lambda)\equiv\sum_{i=1}^{k}\omega_i/(\lambda-\rho_i)$．よって $\mathbf{v}_\mu$ は作用素 $\mathcal{F}$ の固有ベクトルで，対応する固有値は $G(\lambda_\mu)$ となる．

$G(\lambda)$ は λ の有理関数で，多項式の商として $G(\lambda)=\psi(\lambda)/\varphi(\lambda)$ と表せば，分母の多項式 $\varphi(\lambda)$ はまさに k 次で，ある規格化定数 c_k を用いて $\varphi(\lambda)\equiv c_k\prod_{i=1}^{k}(\lambda-\rho_i)$ となる，分子の多項式 $\psi(\lambda)$ の次数は k より小さい．

4.2 $\mathcal{F}$ のフィルタ透過特性

線形作用素 $\mathcal{F}$ をフィルタとみるとき，$G(\lambda)$ はフィルタの透過率を表す関数で，元の一般固有値問題の固有対を $(\lambda_\mu,\mathbf{v}_\mu)$ とすると，フィルタ $\mathcal{F}$ による $\mathbf{v}_\mu$ 成分の透過率が $G(\lambda_\mu)$ で与えられる．

あるいは，ベクトル $\mathbf{x}$ に $\mathcal{F}$ を作用させた結果のベクトルを $\mathbf{y}$ とすると，固有ベクトルの組 $\{\mathbf{v}_\mu\}$ による $\mathbf{x}$ と $\mathbf{y}$ の展開を，$\mathbf{x}=\sum_\mu\alpha_\mu\mathbf{v}_\mu$，$\mathbf{y}=\sum_\mu\beta_\mu\mathbf{v}_\mu$ とすると，係数の間には関係 $\beta_\mu=G(\lambda_\mu)\alpha_\mu$ が成立する．

有理関数 $G(\lambda)$ はその構成から，分子の次数 k' は分母の次数 k よりもつねに小で，区間 I から離れた遠方 $\lambda\to\pm\infty$ で $G(\lambda)=O(\lambda^{-(k-k')})$ と，漸近的に $(k-k')$ 乗に反比例して減衰する．

区間 I から λ から遠方に行くとき，漸近的に透過率 $G(\lambda)$ が最も急に減衰するのは分子の多項式が定数の場合である．そこで分子を定数 1 に決めれば，$1/\varphi(z)=\sum_{i=1}^{k}\omega_i/(z-\rho_i)$ により，係数 ω_i は φ の ρ_i における微分値の逆数 $\omega_i=1/\varphi'(\rho_i)$ となる．そうして区間内 $\lambda\in I$ での $|\varphi(\lambda)|$ の最大値を M とおくと，$\lambda\in I$ のときには $|G(\lambda)|\geq 1/M$，$\lambda\notin I$ の

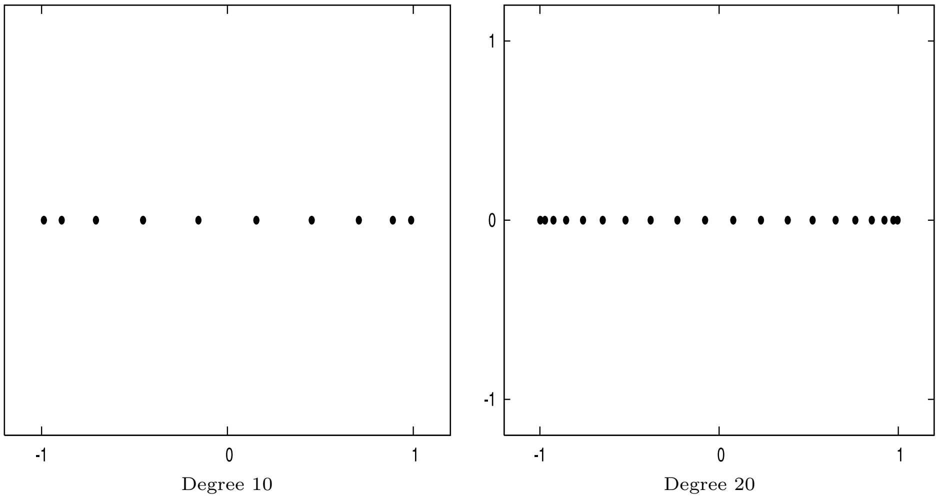


図 1　Chebyshev 多項式の零点分布の例（横軸は相対座標）
Fig. 1　Distribution of zeros of the Chebyshev polynomial (horizontal axis is in relative coordinate).

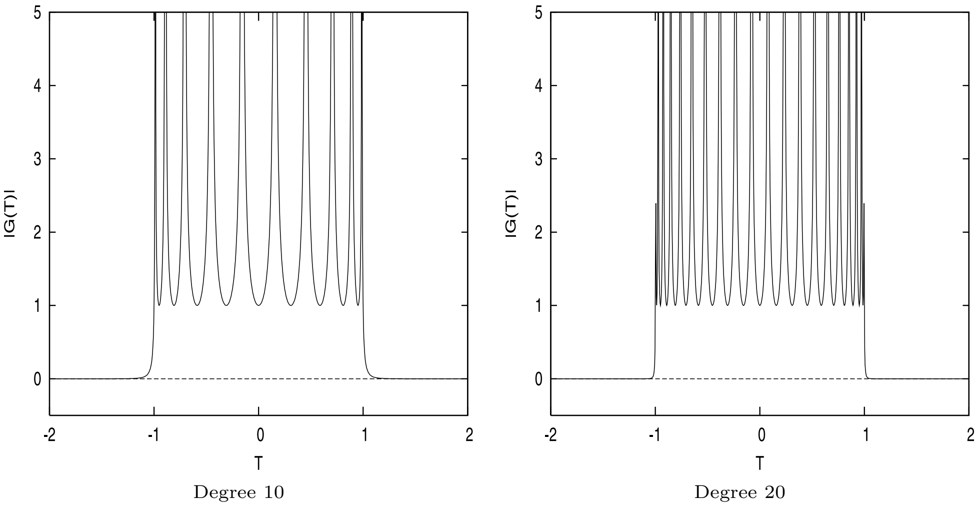


図 2　Chebyshev 多項式によるフィルタ特性 $|G(\lambda)|$（横軸は相対座標）
Fig. 2　Filter transmissivity $|G(\lambda)|$ by the Chebyshev polynomial (horizontal axis is in relative coordinate).

ときには $|t|\gg 1$ で $G(\lambda)=O(t^{-k})$ である．ただし $t=\{2\lambda-(\alpha+\beta)\}/(\beta-\alpha)$ は λ の区間 I に対する相対座標であり，区間の中心で 0，両端では ± 1 の値をとる．固有値が区間 I から離れた固有ベクトル成分は，漸近的に固有値 λ の相対座標 t の k 乗に反比例して減衰する．

分子を定数に制限する場合に比べて，定数に制限しない場合は区間から遠方の λ での漸近的な透過率の減衰の次数は減るが，区間からあまり遠くない領域での遮断性を改良できる可能性がある．演算精度一定の計算では次数の差 $(k-k')$ がある程度大きいと，λ が区間から十分離れた場所でのフィルタの透過率の値は実質的に 0 と見なせる．よって（k が大きくとれる場合は特に）$G(\lambda)$ の分子を定数に限定せずに，ρ_i，ω_i をうまく選び，フィルタの遮断領域における透過率の平均的な大きさを下げる最適化を施す方が，対角化用途としてはより良いフィルタが得られるように思われる．しかし以下の議論と考察では簡単化のため，透過率を表す有理関数の分子の多項式が定数 1 である場合に限定する．すなわち $G(\lambda)\equiv 1/\varphi(\lambda)$ とする．

区間外部に固有値を持つ固有ベクトル成分をフィルタでなるべく遮断したい．そのためには $|G(\lambda)|$ の値は区間内では小さくなく，外ではなるべく小さくなるようにする．いいかえると $|\varphi(\lambda)|$ の値は区間内では大

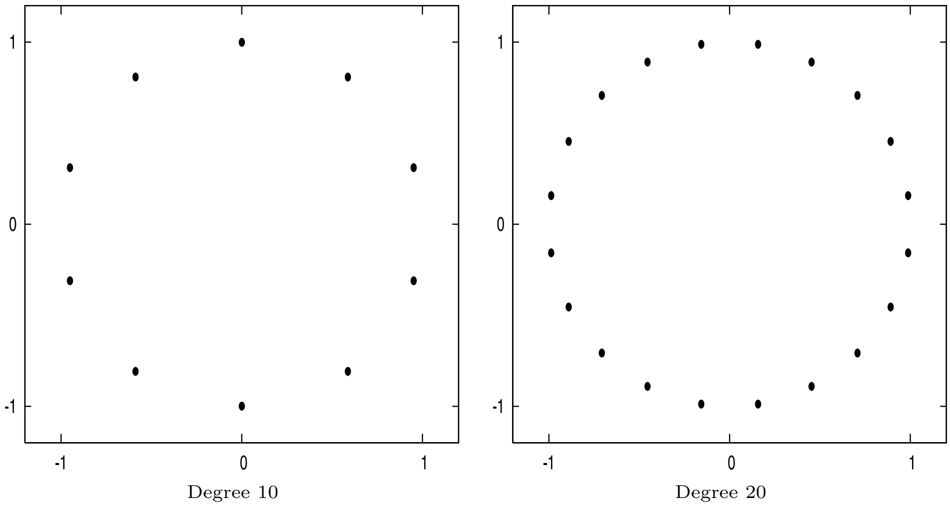


図 3 円周等分多項式の零点分布の例（横軸は相対座標）
Fig. 3 Distribution of zeros of the cyclotomic polynomial (horizontal axis is in relative coordinate).

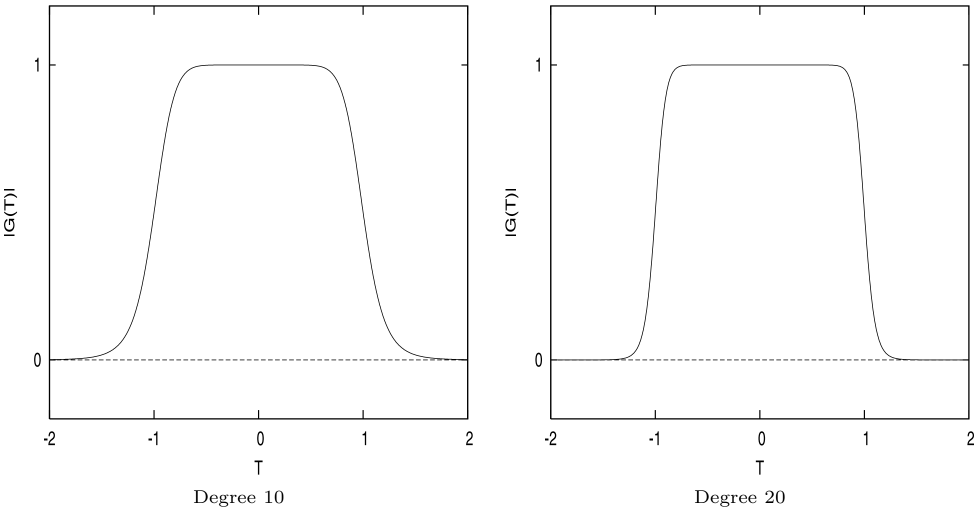


図 4 円周等分多項式によるフィルタ特性 $G(\lambda)$（横軸は相対座標）
Fig. 4 Filter transmissivity $G(\lambda)$ by the cyclotomic polynomial (horizontal axis is in relative coordinate).

きくなく，外ではなるべく大きくなるようにする．分母の多項式 $\varphi(\lambda)$ として,「絶対値が区間内でだけなるべく小さい」性質を持つものを採用すればよい．関数の最良近似理論などでよく知られている Chebyshev 多項式は，まさにその性質を持つものである．

4.3 Chebyshev 多項式

いま $\varphi(\lambda)$ を k 次の Chebyshev 多項式を $T_k(t)$ にとる．ただし t は区間 I に対する λ の相対座標 $(2\lambda-\alpha-\beta)/(\beta-\alpha)$ で，区間の中心では 0，両端では ±1 の値をとる．すると，$\lambda\in I$ のとき $|G(\lambda)|\geq 1$, $\lambda\notin I$ のときつまり $|t|\gg 1$ では $|G(\lambda)|\approx 2^{-(k-1)}|t|^{-k}$ である．

零点の相対座標は $t_\ell=\cos\theta_\ell$, $\ell=1,2,\ldots,k$ である．ただし $\theta_\ell=(2\ell-1)\pi/(2k)$（**図 1**）．同じ位置にフィルタの透過特性 $G(\lambda)=1/T_k(t)$ は極を持つ（**図 2**）．透過特性が示す区間外での遮断性は意図したとおり優れているが，対称固有値問題に対する固有値フィルタとして用いるときに，実軸上の極と固有値が一致あるいは極端に近接して「共鳴の困難」を起こす危険性を持つ点が良くない．

4.4 共鳴の困難とその回避

固有値と共鳴の関係にある（一致もしくは極端に近接した）零点を多項式 $\varphi(\lambda)$ が持つと，数値計算上の困難が生じる．共鳴の関係が存在すると，フィルタの

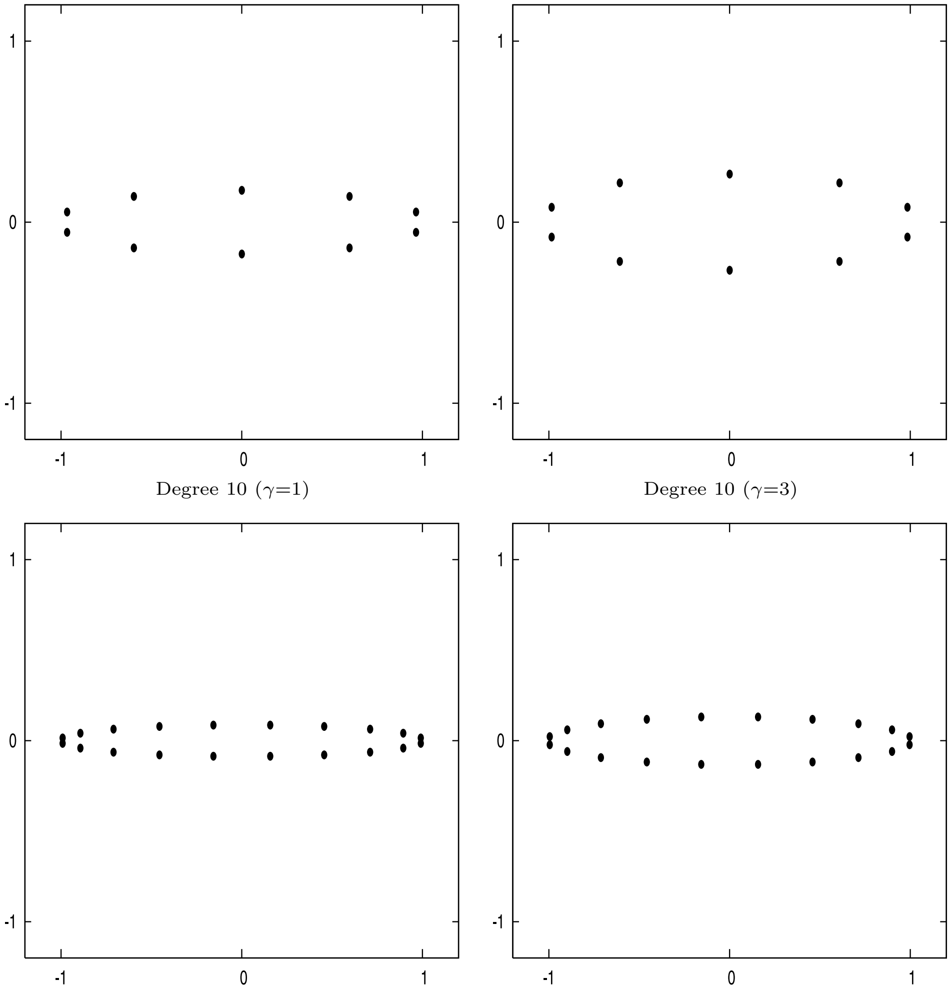


図 5 ずらし Chebyshev 多項式の複素平面上の零点（横軸は相対座標）
Fig. 5 Distribution of zeros of the value-shifted Chebyshev polynomial (horizontal axis is in relative coordinate).

出力ベクトルは共鳴する固有ベクトル成分を非常に強く含むが，それ以外の固有ベクトル成分は丸め誤差に覆われて情報が落ちる．そのため，出力ベクトルから分析で得られる非共鳴の固有ベクトルは精度が悪くなる．そこで $|G(\lambda)|$ の値は区間外で小さいだけでなく，区間内における最大最小の比（一種の条件数）の大きさも抑える必要があることが分かる．

実対称定値一般固有値問題の固有値はすべて実数だから，実数の零点を持たない多項式を $\varphi(\lambda)$ として選べば共鳴の困難は容易に回避できる．

4.4.1 円周等分多項式型のフィルタ

次数 k を偶数とすると，多項式 $\varphi(\lambda) = 1 + t^k$ は実数の零点を持たない．ただし t は λ の区間 I に対する相対座標である．この多項式の零点は複素円周上の等分点で，零点の相対座標を $t_\ell = x_\ell + \mathrm{i}y_\ell$ とすると，実部 $x_\ell = \cos\theta_\ell$，虚部 $y_\ell = \sin\theta_\ell$．ただし，$\theta_\ell = (2\ell - 1)\pi/k$，$\ell$=$1, 2, \ldots, k$．虚部が正の零点は ℓ=1，$2, \ldots, k/2$ に対応する（**図 3**）．$G(\lambda) = 1/\varphi(\lambda)$ の値は，区間中央では 1，区間両端では 1/2，区間外では漸近的に $|t| \gg 1$ のとき $G(\lambda) = O(t^{-k})$ となる（**図 4**）．

4.4.2 値をずらした Chebyshev 多項式によるフィルタ

次数 k を偶数，γ は正数とする．標準区間 $t \in [-1, 1]$ 上で k 次の Chebyshev 多項式 $T_k(t)$ の値をずらした多項式を $\varphi(\lambda) = (T_k(t) + 1 + 2\gamma)/(2\gamma)$ とすると，これは実数の零点を持たず，区間内での値の変動幅を小さく抑えたものになる．

この多項式 $\varphi(\lambda)$ のすべての零点は，区間 I の両端を焦点とする複素平面上の楕円の周上にあり，零点の

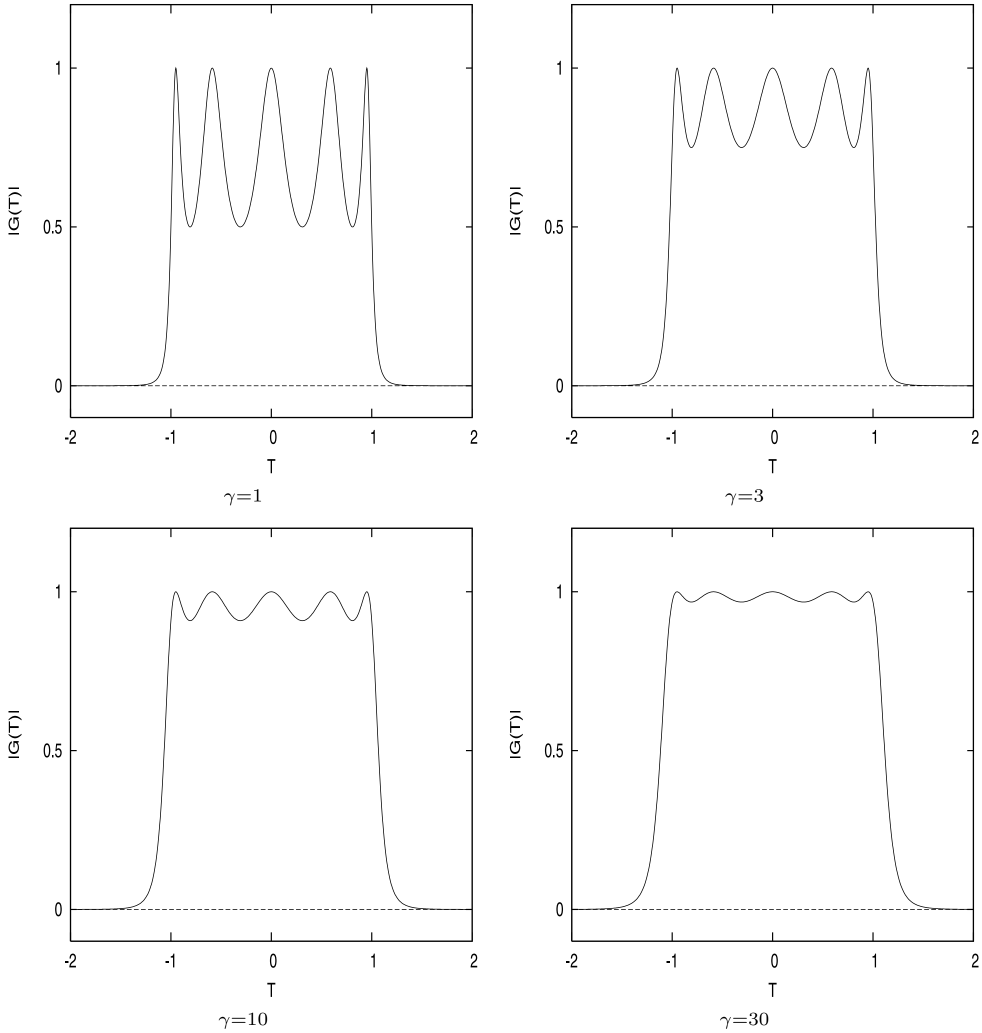


図 6 γ 依存性：10 次のずらし Chebyshev 多項式の $G(\lambda)$（横軸は相対座標）

Fig. 6 γ dependence: Transmissivity $G(\lambda)$ of 10th degree value-shifted Chebyshev polynomial (horizontal axis is in relative coordinate).

相対座標を $t_\ell = x_\ell + \mathrm{i}y_\ell$，$\ell=1,2,\ldots,k$ とすると，実部 $x_\ell = \cosh\tau\cdot\cos\theta_\ell$，虚部 $y_\ell = \sinh\tau\cdot\sin\theta_\ell$ と表せる．ただし，$\tau=(1/k)\cosh^{-1}(1+2\gamma)$，$\theta_\ell=(2\ell-1)\pi/k$．虚部が正の零点は $\ell=1,2,\ldots,k/2$ に対応する（**図 5**）．

区間 I 内の $|\varphi(\lambda)|$ の最大最小の比（一種の条件数）は $1+\gamma^{-1}$ で，$G(\lambda)$ の区間内の振幅の大きさは γ に反比例するが，区間外での漏れの強度は γ に比例する．フィルタ対角化法の用途には区間内での最大最小の比が適度に小さければ十分で，高度な平坦性は不必要である．むしろそれよりも区間外の漏れの強度を小さく抑えた方が良い．そこで γ の値は 1 の程度にとる．値をずらした Chebyshev 多項式に対応するフィルタの透過特性 $G(\lambda)$ を次数 $k=10$ の場合に，γ の値を 1，3，10，30 についてプロットしたグラフを**図 6** に示す．また，$\gamma=3$ の場合に，次数 k を 4，10，20，30 についてプロットしたグラフを**図 7** に示す．

フィルタの透過率のグラフ（**図 9**），および透過率を対数プロットしたグラフ（**図 10**）をみると，多項式 $\varphi(\lambda)$ の次数 k が同じ場合に，$\gamma=1$ の「値をずらした Chebyshev 多項式」を用いる場合の方が「複素円周上の等分点を零点とする多項式」を用いる場合よりも固有値が区間の外部にあるフィルタでカットすべき成分の透過率はグラフ上で小さくなっていて，より強く低減されることが分かる．透過率を対数プロットしたグラフ（図 10）をみると，$\gamma=1$ の「値をずらした Chebyshev 多項式」は「円周等分多項式型」の

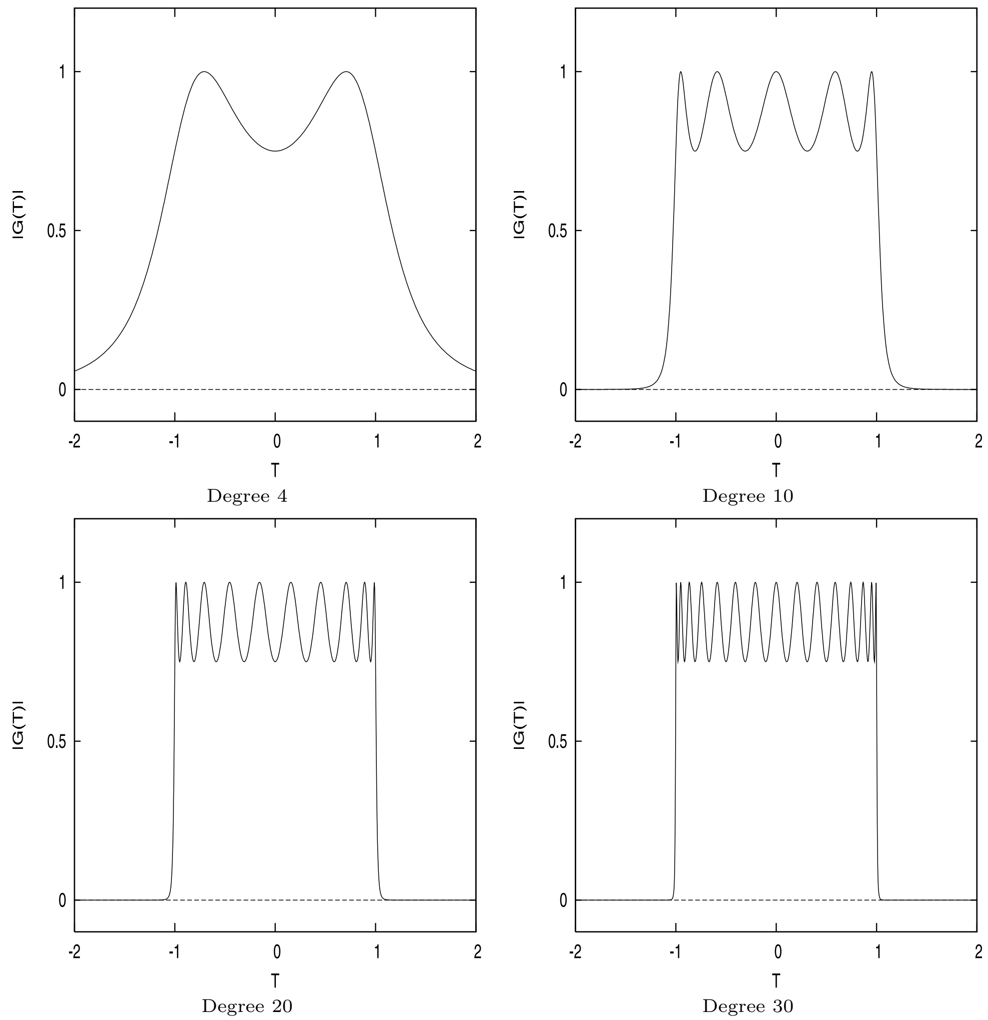


図 7　k 依存性：ずらし Chebyshev 多項式 (γ=3) の $G(\lambda)$（横軸は相対座標）

Fig. 7　k dependence: Transmissivity $G(\lambda)$ of value-shifted Chebyshev polynomial with γ=3 (horizontal axis is in relative coordinate).

ほぼ半分の次数で区間外の固有値を持つ成分を低減する能力に関して同等になる傾向が分かる．

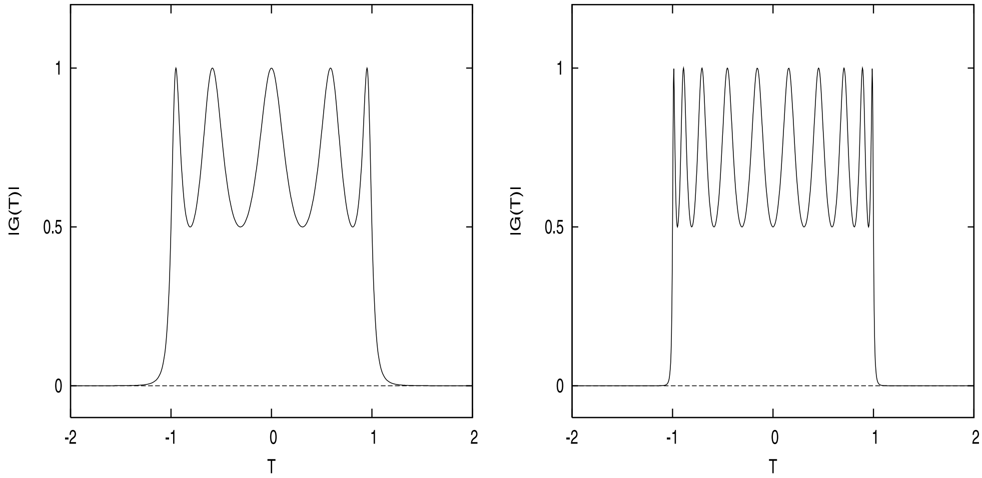
注意： LU-分解を用いた直接解法ではなく，反復解法を用いて係数 $(A-\rho_i B)$ の連立一次方程式を求める場合[18)]，反復解法の収束性は ρ_i の値と固有値分布に依存する．それゆえ，反復法を用いる場合にはフィルタの優劣を透過特性の比較だけで議論することは妥当ではない．

5. フィルタ対角化法の具体的手順

$\mathcal{S}_I$ を $\{\mathbf{v}_\mu \,|\, \lambda_\mu \in I\}$ で張られた階数 r の部分空間とする．フィルタ対角化法の理想上の手順は：

フィルタ対角化法の理想上の手順

1) $\{\mathbf{v}_\mu \,|\, \lambda_\mu \notin I\}$ の成分を除去するフィルタ $\mathcal{F}$ を用意．
2) m 個の無作為ベクトル $\mathbf{x}^{(i)}$, i=$1, 2, \ldots, m$ からフィルタを適用したベクトル $\mathbf{y}^{(i)} = \mathcal{F}\mathbf{x}^{(i)}$ を計算する．個数 m を十分大きくとれば，$\{\mathbf{y}^{(i)} \,|\, i$=$1, 2, \ldots, m\}$ の階数は r に達し，$\mathcal{S}_I$ を張る．
3) $\{\mathbf{y}^{(i)} \,|\, i$=$1, 2, \ldots, m\}$ から，$\mathcal{S}_I$ を張る B-正規直交な階数 r の $\mathcal{S}_I$ の基底ベクトル $\{\mathbf{w}^{(j)} \,|\, j$=$1, 2, \ldots, r\}$ を構成．
4) $\mathcal{S}_I$ に対して Rayleigh-Ritz 法を適用して，$\lambda \in I$ を満たす元の問題の固有対 $(\lambda, \mathbf{v})$ を得る．



Degree 10　　Degree 20

図 8　ずらし Chebyshev 多項式 (γ=1) の $G(\lambda)$（横軸は相対座標）
Fig. 8　Transmissivity $G(\lambda)$ of value-shifted Chebyshev polynomial with γ=1 (horizontal axis is in relative coordinate).

現実には演算が有限精度であることとフィルタ特性の不完全性から，フィルタ出力が張る空間 $\mathcal{S}'$ の階数 r' は $r' \geq r$ で，$\mathcal{S}'$ は近似的には $\mathcal{S}_I \subseteq \mathcal{S}'$ を満たすが，ずれがある．

本論文中で構成法を記述したフィルタ（たとえば値をずらした Chebyshev 型の）を用いた実際の計算手順は以下のようになる：

部分空間 $\mathcal{S}'$ の構成手順

1) 区間 I を与え，フィルタ $\mathcal{F}$ の次数 k と γ（>0）の値を選ぶ．
2) m を，固有値が区間 I 内にある固有対の個数 r より大にとる．m 個のランダム初期ベクトル $\mathbf{x}^{(i)}$，i=$1,2,\ldots,m$ を生成し，それらを B-正規直交化する．
3) $\mathcal{F}\,\mathbf{x}^{(i)}$，$i$=$1,2,\ldots,m$ を計算し，それらを B-正規化したベクトルを $\mathbf{y}^{(i)}$，i=$1,2,\ldots,m$ とする．
4) $\mathbf{y}^{(j)}$，j=$1,2,\ldots,m$ の B-SVD を計算し，特異値が閾値以上である特異ベクトルを残して，r'（$\leq m$）個の B-正規直交な基底 $\mathbf{w}^{(j)}$，j=$1,2,\ldots,r'$ を得る．

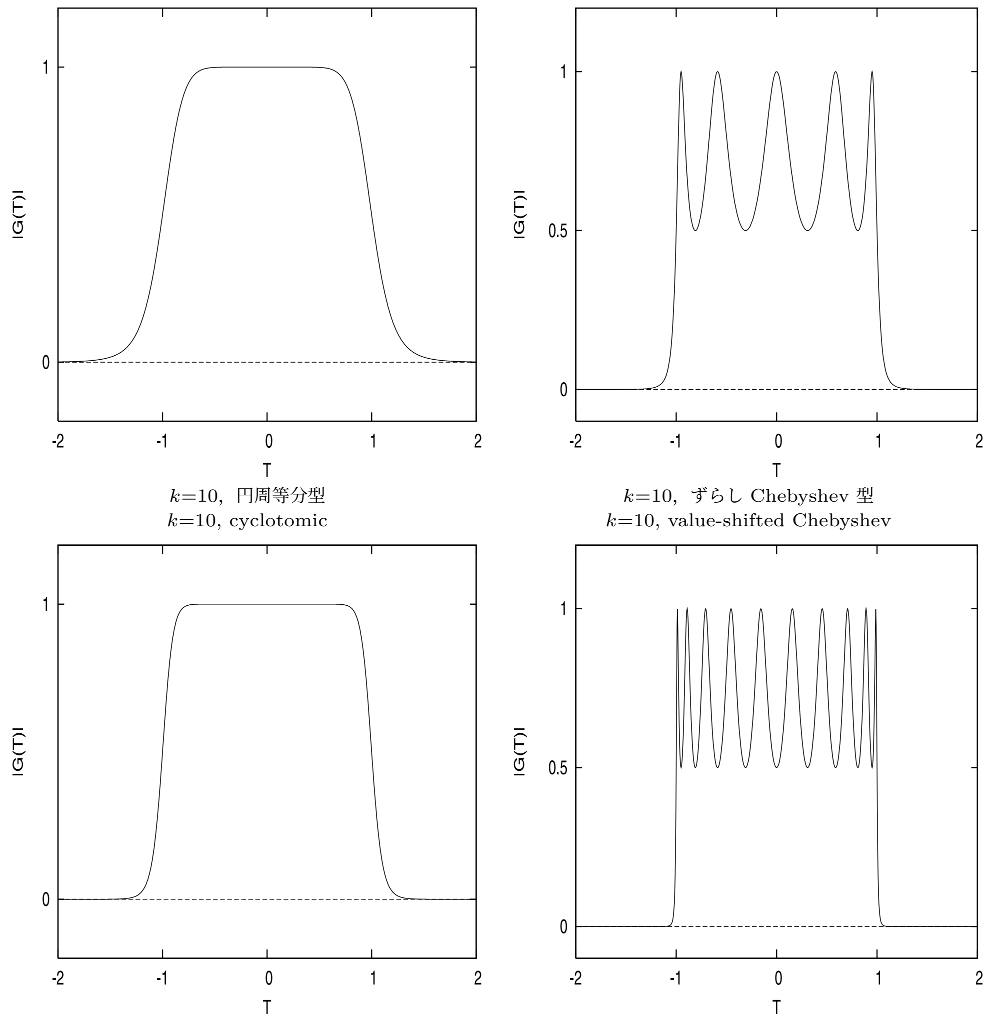
以下は上記のステップ 4) の手順の見本である：

Y から B-正規直交基底 W を構成する手順

1) 行列 Y は j-番目の列が $\mathbf{y}^{(j)}$, j=$1,2,\ldots,m$ とする．
2) 対称な m 次行列 $\widetilde{S}$=Y^TBY を作る．
3) 直交行列 $\widetilde{P}$ による $\widetilde{S}$ の固有分解（対角化）を $\widetilde{S}$=$\widetilde{P}\widetilde{D}\widetilde{P}^T$ とする．
4) Z=$Y\widetilde{P}$ の列ベクトルは B-直交である．($Z^T\,B\,Z$=$\widetilde{D}$)．
Z を Y に入れ直して，上記ステップ 1，2，3 を 1 回ないし 2 回反復する．
5) $\widetilde{P}$ と Z の列と $\widetilde{D}$ の対角要素を並べ替えて，対角要素 d_j の値を降順にする．
6) 閾値未満の d_j に対応する Z の列を取り除いた結果，Z に r' 個の列が残ったとする．
7) B-正規直交な基底 W は $\mathbf{w}^{(j)}$=$\sqrt{\frac{1}{d_j}}\,\mathbf{z}^{(j)}$, j=$1,2,\ldots,r'$ により得られる．

上記 3) の小規模な m 次行列 $\widetilde{S}$ の固有分解において，$\widetilde{P}$ の直交精度をつねに保証するには Jacobi 法を用いる（文献 4)，15)）．

部分空間 $\mathcal{S}'$ は，r' 個の B-正規直交な基底 $\mathbf{w}^{(j)}$，j=$1,2,\ldots,r'$ で張られ，$\mathcal{S}_I$ を近似的に内含する．$\mathcal{S}'$ 内の固有対は Rayleigh-Ritz 法を用いて以下の手順で求める．



k=10, 円周等分型
k=10, cyclotomic

k=10, ずらし Chebyshev 型
k=10, value-shifted Chebyshev

k=20, 円周等分型
k=20, cyclotomic

k=20, ずらし Chebyshev 型
k=20, value-shifted Chebyshev

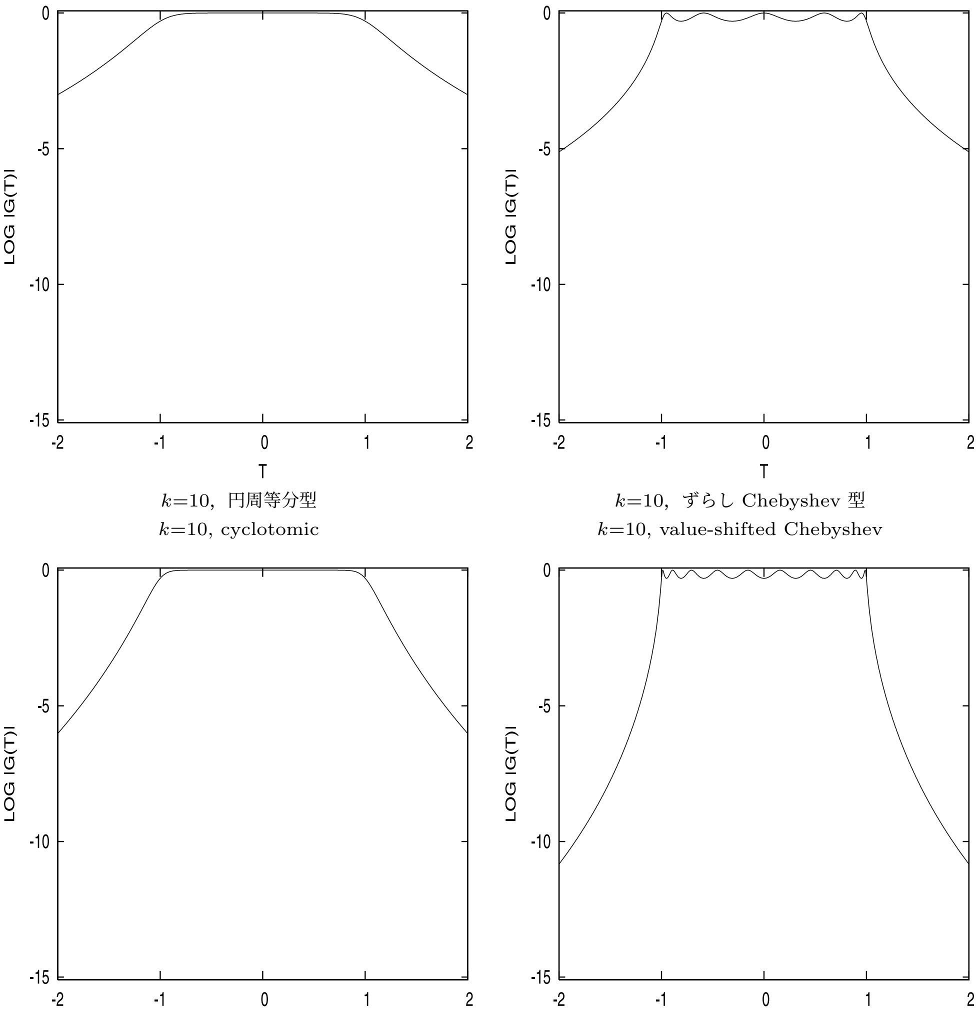
図 9 フィルタの透過特性の比較：円周等分多項式型と値をずらした Chebyshev 型（$\gamma = 1$）
Fig. 9 Comparisons of filter transmissivity: cyclotomic polynomial v.s. value-shifted Chebyshev polynomial with γ=1.

部分空間 $\mathcal{S}'$ 内での近似固有対の解法手順

1) 行列 W の第 j-列目を $\mathbf{w}^{(j)}$, j=$1, 2, \ldots, r'$ とする．
2) $\widehat{S}$ を次数 r' の行列 $\widehat{S}$=$W^T AW$ とする．
3) $\widehat{S}$ の固有分解（対角化）を $\widehat{S}$=$\widehat{P}\widehat{D}\widehat{P}^T$ とする．
4) U=$W\widehat{P}$とすると, $U^T AU$=$\widehat{D}$, $U^T BU$=$\widehat{E}$ (単位行列)．
5) $\widehat{D}$ の k-番目の対角成分 d_k と，U の k-番目の列ベクトル $\mathbf{u}^{(k)}$ からなる対 (d_k, $\mathbf{u}^{(k)}$) は，元の固有値問題を $\mathbf{w}^{(j)}$，j=$1, 2, \ldots, r'$ で張られた部分空間内に射影した問題の固有対．

部分空間 $\mathcal{S}'$ に Rayleigh-Ritz 法を適用し，得られた固有対 (d_k, $\mathbf{u}^{(k)}$) の固有値 d_k が I の近傍にあれば，元の問題 $A\mathbf{v}$=$\lambda B\mathbf{v}$ の近似固有対（の候補）になる．上記 3) において，$\widehat{P}$ の直交性の精度をつねに保証するには，小規模な対称行列 $\widehat{S}$ の固有分解法には Jacobi 法を用いる（文献 4)，15)）．

付記：上記の「部分空間 $\mathcal{S}'$ の構成手順」において，ステップ 3) の中の B-正規化を省略し，ステップ 4) での切断の基準を変更し，「特異値の絶対値が閾値以上」から「特異値の最大のものからの相対値が閾値以上」とする方が結果が良くなる傾向のあることが本論文受理後の実験の過程で分かった（これは特異値分解の適用前に「ノルムが相対的に小さいフィルタ出力ベクトル」を正規化により拡大すれば丸め誤差の影響が増し，



k=10, 円周等分型
k=10, cyclotomic

k=10, ずらし Chebyshev 型
k=10, value-shifted Chebyshev

k=20, 円周等分型
k=20, cyclotomic

k=20, ずらし Chebyshev 型
k=20, value-shifted Chebyshev

図 10 フィルタの透過特性の比較（対数プロット）：円周等分多項式型と値をずらした Chebyshev 型（$\gamma = 1$）
Fig. 10 Comparisons of logarithms of filter transmissivity: cyclotomic polynomial v.s. value-shifted Chebyshev polynomial with γ=1.

結果の品質を下げるからであろう）．ただし，本論文中の数値実験結果はどれもこの変更を施していない．

6. 演算量（浮動小数演算回数）

行列 A，B が帯対称 N 次で半帯幅 h，区間 I に固有値を持つ固有対は r 個とする．

対称な（一般定値）固有値問題では，修正 Cholesky 分解（LDL^T 分解）を区間の両端に対応して 2 度行うと Sylvester の慣性律に基づいて区間内の固有値の個数 r が得られ，普通はこれを二分法として用いている[13)]．修正 Cholesky 分解の手間は行列の非零パターンに大きく依存するが，対称行列 A，B が半帯幅 h の帯行列の場合には演算量は $O(Nh^2)$ なので，採用を検討する価値がある．非零パターンが一般的な状況で，分解に要する記憶量と演算量が多くて実施が困難な場合には個数 r は推測で決めるか，あるいは m を変えて求めた部分空間 $\mathcal{S}'$ の階数 r' から r の上限を推定する．

初期ベクトルの個数 m は最低でも r 以上にとる必要がある．初期ベクトルに乱数を用いた場合の倍精度計算による実験での経験からは，r が大のときには m を r の 1.5〜3 倍程度にすると良さそうである．フィ

表 1 帯問題での各段階の演算量
Table 1 Arithmetic counts for banded problem.

部分空間 S' の構築	:	$O(Nh^2k)+O(Nhmk)$ $+O(Nm^2)$.
Rayleigh-Ritz 法の適用	:	$O(Nhr)+O(Nr^2)$.
逆反復過程	:	$O(Nh^2r\ell)$.

ルタの次数 k は 10〜50 程度である．各処理の演算量を見積もると：

- 次数 N で半帯幅 h の（片側枢軸選択を含めた）帯行列 $(A-\rho_iB)$ の LU-分解を 1 回行う演算量は $O(Nh^2)$．k 次のフィルタの構成にはシフト量が異なる $k/2$ 回の帯 LU-分解が必要なので，演算量は全部で $O(Nh^2k)$.
- 帯行列の LU-分解が構成された後では，右辺が異なる m 個の連立一次方程式を解く演算量は $O(Nhm)$ なので，与えられた m 個のベクトルに k 次のフィルタを作用させる演算量は全部で $O(Nhmk)$.
- N 次のベクトル m 個からなる行列の直交化あるいは特異値分解の演算量は $O(Nm^2)$.
- 階数（次元）r の部分空間への行列 A の射影を作る演算量は $O(Nhr)+O(Nr^2)$．射影された r 次の固有値問題を解く演算量は $O(r^3)$ で通常は無視できる．r 次の固有値問題を完全に解いた後に，部分空間内の r 個の固有ベクトルを構成する演算量は $O(Nr^2)$.
- r 個の各固有対について逆反復を（途中の B-再直交化なしで）平均 ℓ 回行うと，演算量は全部で $O(Nh^2r\ell)$.

まとめると演算量のオーダは**表 1** のようになる.（いずれも N について一次である.）

個数 m を増大させると，まず記憶容量の面で困難となりうるし，B-正規直交化や B-特異値分解の演算量が m の二乗に比例して支配的となる．よって，区間 I 内に固有値がある固有対の個数 r が大きく，m もそれに合わせて大きくしなければならないような場合には，むしろ区間を細分して分割された各部分区間ごとの固有対を求める方が良いであろう．そのため実用的な m の値は数十〜数百程度であろう．

半帯幅 h が大きいと，フィルタ作用の計算に用いる LU-分解が支配的となり，演算量は $O(Nkh^2)$．もしも h が m に比べてあまり大きくなければ $O(Nkhm, Nm^2)$ である．

7. 数 値 実 験

実対称行列 A, B を幅の狭い帯行列にとって，数値実験をいくつか実施した．N 次行列 A, B の半帯幅を h（行列の (i,j) 要素が $|i-j|\le h$ 以外はすべて零）として，行列 A の帯内の非零要素を $a_{i,j}\equiv\max(i,j)-1$, 行列 B の帯内の非零要素を $b_{i,j}\equiv 1/(i+j-1)+\delta_{i,j}$ にとった（$\delta_{i,j}$ は Kronecker 記号）.

フィルタの作用の実現には，片側枢軸選択つきの複素帯行列の LU-分解[10] を利用し，帯行列 $(A-\rho_iB)$ を係数とする線形方程式を解いた．使用した例題の固有値には縮重や極端な近接がなかったため，高い次数のフィルタを用いて得られた（すでに相当良質の）近似固有対の改良には，普通の逆反復法[12),13] を用いた.

計算で得られた近似固有対 $(\lambda,\mathbf{v})$ の精度の見積りには，$\mathbf{v}$ がすでに B-正規化されているとき，固有値の誤差の限界すなわち区間 $[\lambda-\Delta,\lambda+\Delta]$ が真の固有値を含むような距離 Δ の値が残差ベクトル $\mathbf{r}\equiv(A-\lambda B)\mathbf{v}$ のノルムにより $\Delta\equiv\sqrt{\mathbf{r}^TB^{-1}\mathbf{r}}$ で与えられることを利用した（これは実対称な標準固有値問題で Wilkinson 限界として知られている残差の 2-ノルム $||\mathbf{r}||_2$ を，実対称定値一般固有値問題へ簡単に拡張したものである）．そのほか逆反復法による改良による変動の大きさが参考となる.

実験用プログラム：Fortran90 で約 1,800 行，計算機システムは，CPU：AMD Opteron 1.4 GHz（1CPU），主記憶：8 GBytes（PC-3200），OS：Fedora Core 5 for x86_64，コンパイラ：intel Fortran v9.1 EM64T，オプションフラグ "-axP -O3" を用いた.

7.1 実験の各グラフの説明

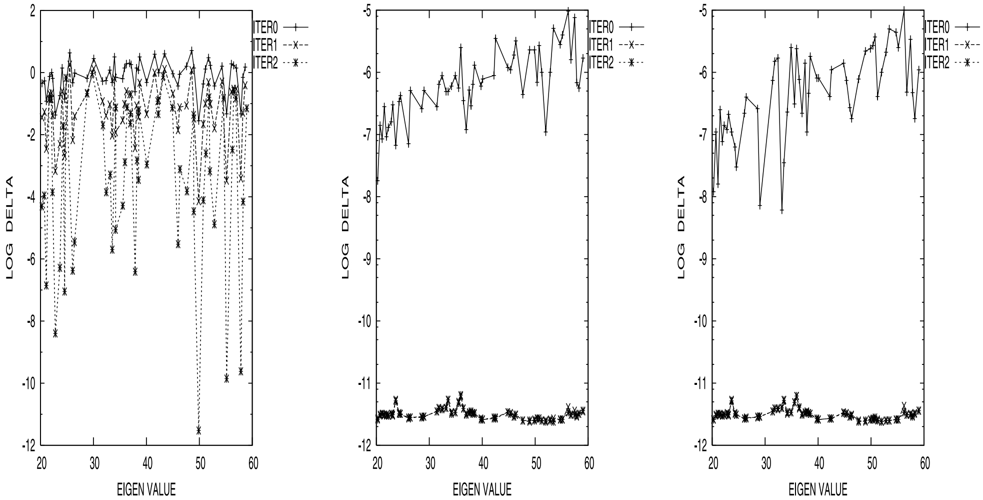
例題の固有値はよく分離していたので，フィルタ対角化法で得た近似固有対は素朴な固有対ごとの逆反復法で改良した．フィルタ対角化法で得られた近似固有対は，すでに良い精度を持っていた.

各近似固有対について，固有値を横軸，残差のノルムの対数を縦軸にとり，以下の各段階ごとに，グラフ中に折れ線でプロットした．ITER0 はフィルタ対角化法の計算結果であり，ITER1 はフィルタ対角化法の後に逆反復を 1 回適用し近似解を改良した結果，ITER2 はフィルタ対角化法の後に逆反復を 2 回適用し近似解を改良した結果である.

主なグラフでは，フィルタ対角化法の中で使用している Rayleigh-Ritz 法で得た近似固有対のうち，固有値が区間 $I=[\alpha,\beta]$ 内のものだけをプロットしている．経過時間は [(フィルタ対角化法) + (逆反復 2 回)] の形で示している.

例題 1

行列次数 $N=10^4$，半帯幅 $h=30$，区間 $I=[20,60]$ で，固有対の個数は $r=55$ 個の問題を，フィルタを $k=100$



m=54 (r'=54)
m が不足
case m is insufficient

m=55 (r'=55)
m が最小
case m is minimal

m=60 (r'=55)
m が十分
case m is sufficient
[50.9 sec + 10.7 sec]

図 11 例題 1：初期ベクトルの個数 m と固有対の品質 N=10^4，h=30，I=$[20, 60]$（r=55 個の固有対）; k=100 次
Fig. 11 Example 1: Number of initial vectors m and quality of approximated eigenpairs N=10^4, h=30, I=$[20, 60]$ (r=55 true eigenpairs); degree k=100.

次ときわめて高次のものを用いて，ランダムな初期ベクトルの個数 m が 54，55，60 について計算した（フィルタ対角化法は Rayleigh-Ritz 法を用いるため，初期ベクトルの個数 m は最低でも固有対の個数 r=55 以上にとる必要がある）．

フィルタ後の部分空間 $\mathcal{S}'$ の階数 r' は，m=54 の場合には r'=54，m=55 と m=60 の場合には r'=55 となった．

Rayleigh-Ritz 法を部分空間 $\mathcal{S}'$ に適用して得られた近似固有対のうち，固有値が I 内にある近似固有対の個数は，m=54 の場合には 54，m=55 と m=60 の場合には 55 となった．

m のそれぞれの場合について，固有値が区間 I 内にある近似固有対について，固有値を横軸に，Δ の値を対数目盛で縦軸にとり，上側からそれぞれフィルタ対角化法（ITER0），逆反復適用 1 回（ITER1），逆反復適用 2 回（ITER2）の結果をプロットした折線グラフを示す（**図 11**）．

初期ベクトルの個数が不足している m=54 の場合には，必要な固有対の個数は当然ながら正しく出ない．フィルタ対角化法の結果はグラフでみても Δ の値が 1〜10 の程度で，無意味な結果になっている．それでも逆反復が結果を改良しようとする傾向がみえる．

初期ベクトルの個数 m を最低必要な個数 55 に一致させた場合でも十分に良い結果が得られているのはフィルタの次数 k が 100 と相当に高いので遮断特性がほぼ理想的で余計な固有ベクトル成分が部分空間 $\mathcal{S}'$ に混入しなかったためであろう．初期ベクトルの個数を増やした m=60 でも，フィルタの出力の張る部分空間の階数 r' は r=55 と一致している．

m の値が 55 の場合と 60 の場合はどちらも逆反復は 1 回で十分に収束したため，ITER1 と ITER2 の折線はほとんど重なっている．Δ の値は ITER0 では 10^{-5} 以下，ITER1 では 10^{-11} 以下となっていて，区間が $[20, 60]$ であることを考慮すると，フィルタ対角化法で得られた固有値の相対精度は 6 桁程度，逆反復を加えて得られた固有値の相対精度は 12 桁程度であることが分かる．

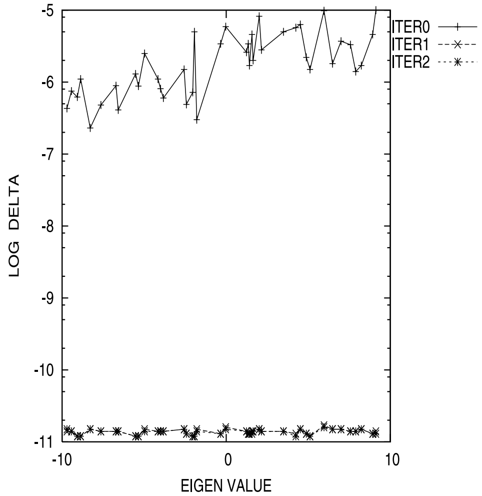
例題 2

行列次数 N=10^5，半帯幅 h=10，区間 I=$[-10, 10]$ で，固有対の個数 r=41 の問題をフィルタの次数 k=40 を用いてランダムな初期ベクトルの個数 m が 50 と 100 の場合について計算した例である．

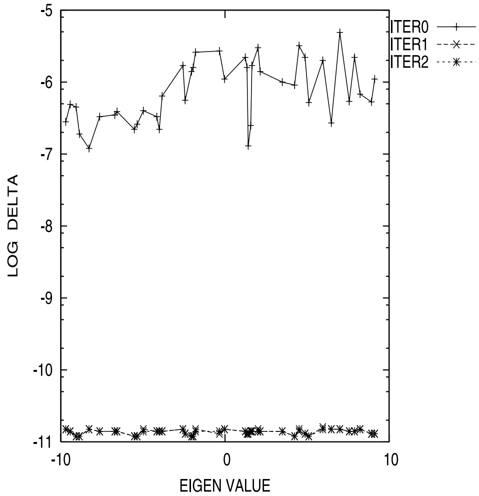
フィルタ後の部分空間 $\mathcal{S}'$ の階数 r' は，両方の場合に r'=43 となった．Rayleigh-Ritz 法を部分空間 $\mathcal{S}'$ に適用して得られた固有対のうち，固有値が I 内にある近似固有対の個数は，いずれの場合も r=41 と一致した．

「フィルタ対角化法」と「逆反復 2 回」の計算時間は m=50 の場合にはそれぞれ 71.4 秒と 26.9 秒，m=100 の場合はそれぞれ 146.2 秒と 27.6 秒であった．

m のそれぞれの場合について，固有値が区間 I 内



m=50 (r'=43)
[71.4 sec + 26.9 sec]



m=100 (r'=43)
[146.2 sec + 27.6 sec]

図 12 例題 2：初期ベクトルの個数 m と固有対の品質 N=10^5，h=10，I=$[-10,10]$（r=41 個の固有対）; k=40 次

Fig. 12 Example 2: Number of initial vectors m and quality of approximated eigenpairs N=10^5, h=10, I=$[-10,10]$ (r=41 true eigenpairs); degree k=40.

にある近似固有対について，近似固有値を横軸に，近似固有対に対応する Δ の値を対数目盛で縦軸にとり，上側からそれぞれフィルタ対角化法（ITER0），逆反復適用 1 回（ITER1），逆反復適用 2 回（ITER2）の結果をプロットした折線グラフを示す（**図 12**）．逆反復は 1 回で十分に収束したため，左右のグラフは両方とも ITER1 と ITER2 の折線がほとんど重なっている．

区間内の近似固有対について，m=50 の場合には ITER0 では Δ の値は 10^{-5} 程度以下，ITER1 では Δ の値は 10^{-11} 程度となっていて，区間が $[-10,10]$ であることを考慮すると，フィルタ対角化法で得られた近似固有値の相対精度は 6 桁程度で，逆反復を加えて得られた固有値の相対精度は 12 桁程度あること，m=100 の場合もほぼ同様であることがグラフから分かる．

例題 3

行列次数 N=10^4，半帯幅 h=30，区間 I=$[20,60]$ で，固有対の個数 r=55 の問題をフィルタの次数 k=20 を用いて，ランダムな初期ベクトルの個数 m=100 の場合について計算した．

「フィルタ対角化法」と「逆反復 2 回」の計算時間は，それぞれ 19.5 秒と 12.8 秒であった．

左側のグラフは Rayleigh-Ritz 法をフィルタ後の階数 r'=66 の部分空間 $\mathcal{S}'$ に適用して得られた近似固有対すべてについて，右側のグラフは同じ近似固有対のうちで固有値が区間 I 内のものだけを選び，それぞれ近似固有値を横軸に，固有対の Δ の値を対数目盛で縦軸にとり，上側からそれぞれフィルタ対角化法（ITER0），逆反復適用 1 回（ITER1）の結果をプロットした（**図 13**）．

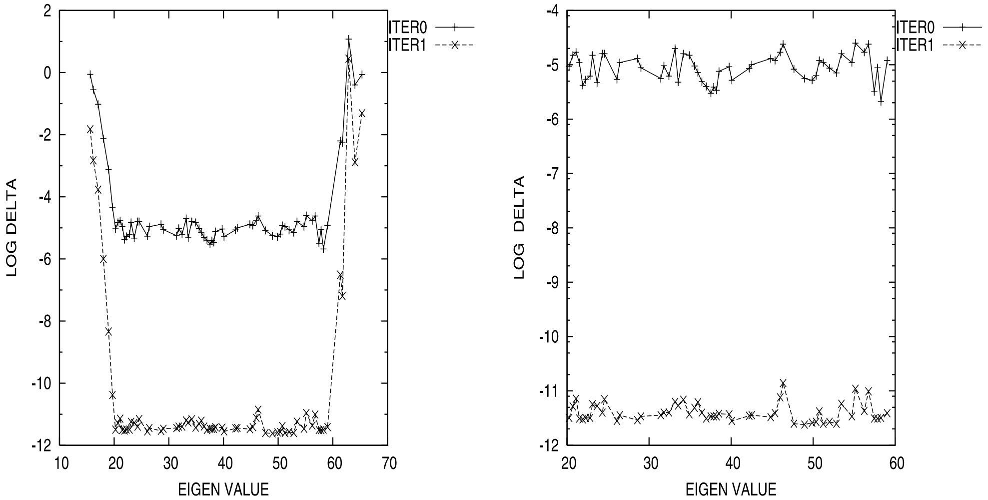
固有値が区間 I の外部にある近似解については誤差上限 Δ の値が区間から離れると急激に増大する傾向，固有値が区間 I のうちにある近似解については誤差上限 Δ の値がほぼ一様となっている傾向がグラフから分かる．区間内の近似固有対について，ITER0 では Δ の値は 10^{-5} 程度，ITER1 では Δ の値は 10^{-11} 程度となっていて，区間が $[20,60]$ であることを考慮すると，フィルタ対角化法で得られた固有値の相対精度は 6 桁程度，逆反復を加えて得られた固有値の相対精度は 12 桁程度であることが分かる．

例題 4

行列次数 N=10^4，半帯幅 h=30，区間 I=$[100,200]$ で，固有対の個数 r=106 の問題を，次数 k=20 のフィルタを用いて，ランダムな初期ベクトルの個数 m=200 の場合について計算した．

「フィルタ対角化法」と「逆反復 2 回」の計算時間は，それぞれ 56.9 秒と 26.4 秒であった．

左側のグラフは Rayleigh-Ritz 法をフィルタ後の階数 r'=136 の部分空間 $\mathcal{S}'$ に適用して得られた近似固有対すべてについて，右側のグラフは Rayleigh-Ritz 法で得た近似固有対のうちで固有値が区間 I 内のものだけを，それぞれ近似固有値を横軸に，近似固有対に対応する Δ の値を対数目盛で縦軸にとり，上側か



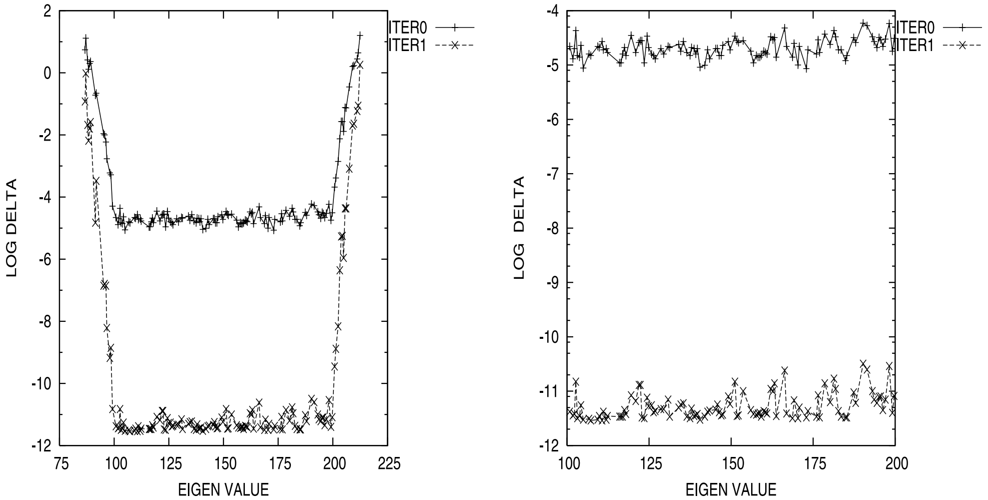
部分空間内の全近似固有対　　固有値が I 内の近似固有対

All approximated eigenpairs in subspace　　Approximated eigenpairs whose eigenvalues are in I

[19.5 sec + 12.8 sec]

図 13　例題 3：N=10^4，h=30，I=[20, 60]（r=55 個の固有対）k=20 次，m=100，r'=66

Fig. 13　Example 3: N=10^4, h=30, I=[20, 60] (r=55 true eigenpairs) degree k=20, m=100, r'=66.



部分空間内の全近似固有対　　固有値が I 内の近似固有対

All approximated eigenpairs in subspace　　Approximated eigenpairs whose eigenvalues are in I

[56.9 sec + 26.4 sec]

図 14　例題 4：N=10^4，h=30，I=[100, 200]（r=106 個の固有対）k=20 次，m=200，r'=136

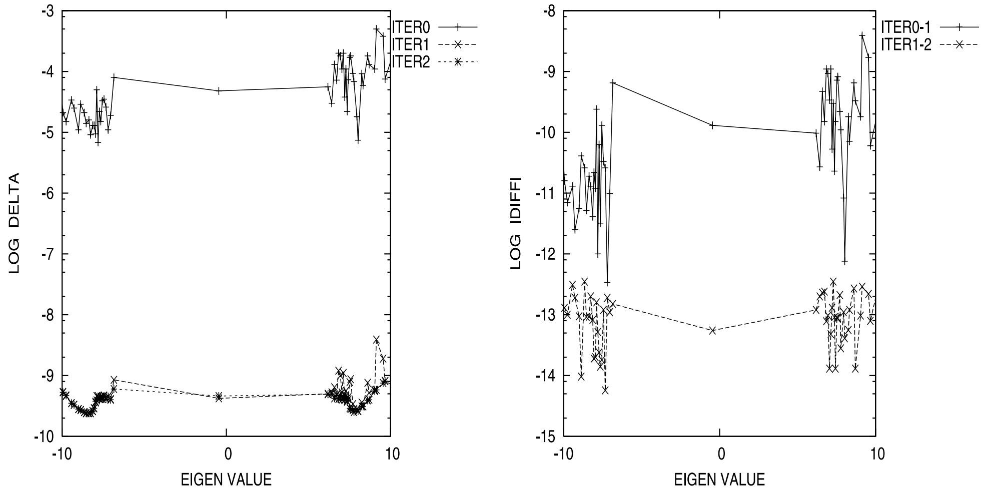
Fig. 14　Example 4: N=10^4, h=30, I=[100, 200] (r=106 true eigenpairs) degree k=20, m=200, r'=136.

らそれぞれフィルタ対角化法の結果（ITER0），逆反復適用 1 回の結果（ITER1）をプロットした折線グラフである（**図 14**）．

固有値が区間 I の外にある近似解については誤差上限 Δ の値が区間から離れるに従って急に増大する傾向，固有値が区間 I のうちにある近似解については誤差上限 Δ の値がほぼ一様となっている傾向がグラフから分かる．区間内の近似固有対について，ITER0 では Δ の値は 10^{-5}〜10^{-4} 程度，ITER1 では Δ の値は 10^{-10} 以下となっていて，区間が [100, 200] であることを考慮すると，フィルタ対角化法で得られた固有値の相対精度は 5〜6 桁程度，逆反復を加えて得られた固有値の相対精度は 12 桁程度以上であることが分かる．

例題 5

行列次数 N=10^6，半帯幅 h=50，区間 I=[−10, 10]



残差の 2 ノルム Δ の値 / 逆反復による変動（≈ 誤差）

2-norm of residual Δ / Eigenvalue changes by inverse iterations (≈error)

[4431.1 sec + 2838.1 sec]

図 15 例題 5：N=10^6，h=50，I=$[-10, 10]$（r=50 個の固有対）k=16 次，m=100，r'=65

Fig. 15 Example 5: N=10^6, h=50, I=$[-10, 10]$ (r=50 true eigenpairs) degree k=16, m=100, r'=65.

で，固有対の個数 r=50 の問題を次数 k=16 のフィルタを用いて，ランダムな初期ベクトルの個数 m=100 の場合について計算した．

フィルタ後の部分空間の階数は r'=65 であった．「フィルタ対角化法」と「逆反復 2 回」の計算時間はそれぞれ 4431.1 秒と 2838.1 秒であった．

Rayleigh-Ritz 法を部分空間 $\mathcal{S}'$ に適用して得られた固有対のうち，固有値が I 内にある近似固有対の個数は r=50 に一致した．**図 15** の左側のグラフは Δ の値を固有値が区間 I 内にある近似固有対だけをとりプロットしたものである．図 15 の右側のグラフは，フィルタ対角化法適用で得られた近似固有値と逆反復を 1 回適用した近似固有値の差の大きさ（ITER0-1），逆反復 1 回適用後の近似固有値と逆反復 2 回適用後の近似固有値の差の大きさ（ITER1-2）をそれぞれ対数でプロットしたものである．

近似対から決まる Δ の値は固有値の誤差の範囲の上限を与えるが，その評価は近似固有ベクトルの品質にも影響される．Δ による固有値の誤差評価は過大になる傾向がうかがえる．

例題 6

行列次数 N=10^4，半帯幅 h=100，区間 I=$[-10, 10]$ で，固有対の個数 r=45 の問題を，ランダムな初期ベクトルの個数 m=100 を用いてフィルタの次数 k が 10，20，30 の場合について計算した．

フィルタ後の部分空間の階数 r' は，フィルタ次数 k が 10 の場合は r'=50，k が 20 と 30 の場合は r'=46 であった．Rayleigh-Ritz 法を部分空間 $\mathcal{S}'$ に適用して得られた固有対のうち，固有値が I 内にある近似固有対の個数は，いずれの場合も r=45 と一致した．

「フィルタ対角化法」と「逆反復 2 回分」の計算時間は k=10 の場合にはそれぞれ 40.9 秒と 91.2 秒，k=20 の場合はそれぞれ 73.8 秒と 83.8 秒，k=30 の場合はそれぞれ 106.8 秒と 83.9 秒であった．

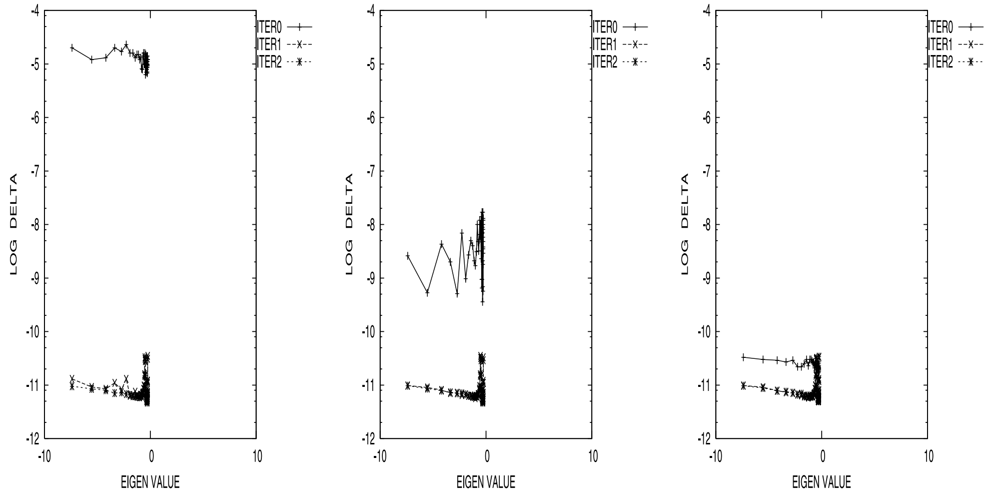
k のそれぞれの場合について，固有値が区間 I 内にある近似固有対について，近似固有値を横軸に，近似固有対に対応する Δ の値を対数目盛で縦軸にとり，上側からそれぞれフィルタ対角化法（ITER0），逆反復適用 1 回（ITER1），逆反復適用 2 回（ITER2）の結果をプロットした折線グラフを示す（**図 16**）．

フィルタ対角化法により得られた各近似固有対の固有値の誤差の上限を与える Δ の値はどれも一様で，フィルタの次数を 10，20，30 と増すと，10^{-4} 以下，10^{-8} 程度以下，10^{-10} 以下と減少した．逆反復は 1 回で十分に収束したため，左右のグラフはどちらも ITER1 と ITER2 の折線はほとんど重なっている．

例題 7

行列次数 N=10^5，半帯幅 h=30，区間 I=$[-10, 10]$ で，固有対の個数 r=35 の問題を，ランダムな初期ベクトルの個数 m=50 を用いてフィルタの次数 k が 10，20，30 の場合について計算した．

フィルタ後の部分空間の階数 r' は，フィルタが 10 次の場合は r'=50，20 次の場合は r'=48，30 次の場合は r'=42 となった．

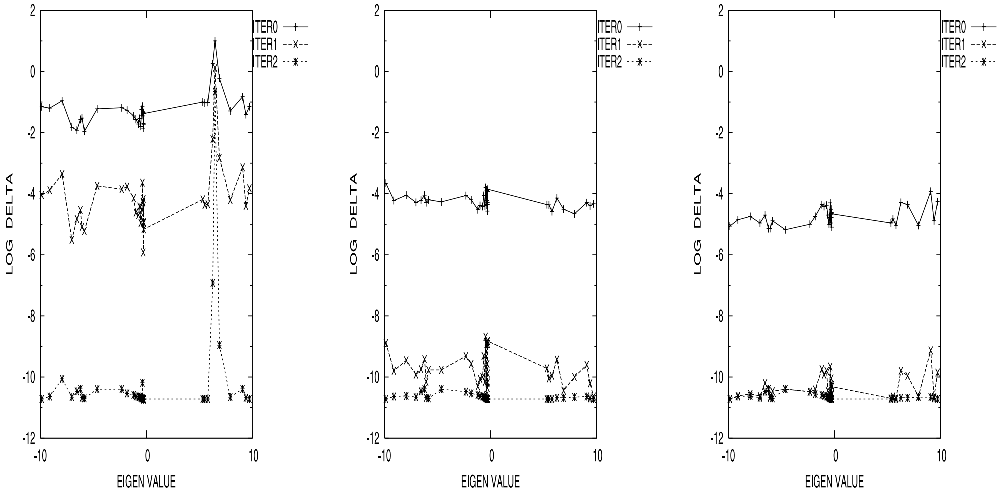


Degree 10 (r'=50) [40.9 sec + 91.2 sec]

Degree 20 (r'=46) [73.8 sec + 83.8 sec]

Degree 30 (r'=46) [106.8 sec + 83.9 sec]

図 16 例題 6：N=10^4, h=100, I=[−10, 10]（r=45 個の固有対）フィルタの次数 k と近似固有対の品質（m=100）
Fig. 16 Example 6: N=10^4, h=100, I=[−10, 10] (r=45 true eigenpairs)
Filter degree k and quality of approximated eigenpairs (m=100).



Degree 10 (r'=50) 偽の解 1 個 One false solution included [63.1 sec + 97.5 sec]

Degree 20 (r'=48) [102.8 sec + 93.4 sec]

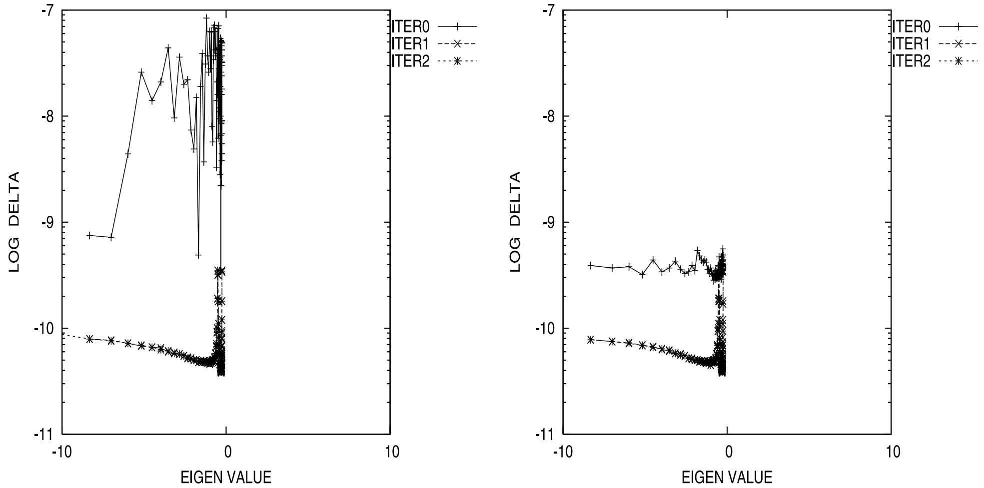
Degree 30 (r'=42) [141.9 sec + 81.9 sec]

図 17 例題 7：N=10^5, h=30, I=[−10, 10]（r=35 個の固有対）フィルタの次数 k と近似固有対の品質（m=50）
Fig. 17 Example 7: N=10^5, h=30, I=[−10, 10] (r=35 true eigenpairs)
Filter degree k and quality of approximated eigenpairs (m=50).

「フィルタ対角化法」と「逆反復 2 回分」の計算時間は k=10 の場合にはそれぞれ 63.1 秒と 97.5 秒，k=20 の場合はそれぞれ 102.8 秒と 93.4 秒，k=30 の場合はそれぞれ 141.9 秒と 81.9 秒であった．

Rayleigh-Ritz 法を部分空間 $\mathcal{S}'$ に適用して得られた固有対のうち，固有値が I 内にある近似固有対の個数は，フィルタの次数が 10 の場合には偽の解が 1 個混入して 36 となったが，次数が 20 と 30 では r=35 と一致した．

k のそれぞれの場合に，固有値が区間 I 内にある近似固有対について近似固有値を横軸に，近似固有対に対応する Δ の値を対数目盛で縦軸にとり，上側から



Degree 30 (r'=89)
[1192.7 sec + 1690.0 sec]

Degree 40 (r'=89)
[1569.4 sec +1700.3 sec]

図 18 例題 8：N=10^5，h=100，I=$[-10, 10]$（r=88 個の固有対）フィルタの次数 k と近似固有対の品質（m=100）
Fig. 18 Example 8: N=10^5, h=100, I=$[-10, 10]$ (r=88 true eigenpairs)
Filter degree k and quality of approximated eigenpairs (m=100).

それぞれフィルタ対角化法（ITER0），逆反復適用 1 回（ITER1），逆反復適用 2 回（ITER2）の結果をプロットした折線グラフを示す（**図 17**）．

フィルタの次数が最も低い k=10 のグラフ中で現れた，偽の解 1 個に対する Δ の値は 10 程度で大きく，逆反復を適用しても Δ の値は減らない．

例題 8

行列次数 N=10^5，半帯幅 h=100，区間 I=$[-10, 10]$ で，固有対の個数 r=88 の問題を，ランダムな初期ベクトルの個数 m=100 を用いてフィルタの次数 k が 30 と 40 の場合について計算した．

フィルタ後の部分空間の階数は両方とも r'=89 となった．Rayleigh-Ritz 法を部分空間 $\mathcal{S}'$ に適用して得られた固有対のうち，固有値が I 内にある近似固有対の個数は，フィルタ次数 k が 30 と 40 のいずれの場合も r=88 に一致した．

「フィルタ対角化法」と「逆反復 2 回分」の計算時間はフィルタの次数 k が 30 の場合にはそれぞれ 1192.7 秒と 1690.0 秒，次数が 40 の場合はそれぞれ 1569.4 秒と 1700.3 秒であった．

次数 k のそれぞれの場合に，固有値が区間 I 内にある近似固有対について，近似固有値を横軸に，近似固有対に対応する Δ の値を対数目盛で縦軸にとり，上側からそれぞれフィルタ対角化法（ITER0），逆反復適用 1 回（ITER1），逆反復適用 2 回（ITER2）の結果をプロットした折線グラフを示す（**図 18**）．逆反復は 1 回で十分に収束したため，左右のグラフはどちらも ITER1 と ITER2 の折線はほとんど重なっている．

例題 9

行列次数 N=10^6，半帯幅 h=10，区間 I=$[-10, 10]$ で，固有対の個数 r=52 の問題を，ランダムな初期ベクトルの個数 m=100 を用いてフィルタの次数 k が 10 と 20 の場合について計算した．

フィルタ後の部分空間の階数は，フィルタの次数 k が 10 の場合は r'=100，k が 20 の場合は r'=60 となった．

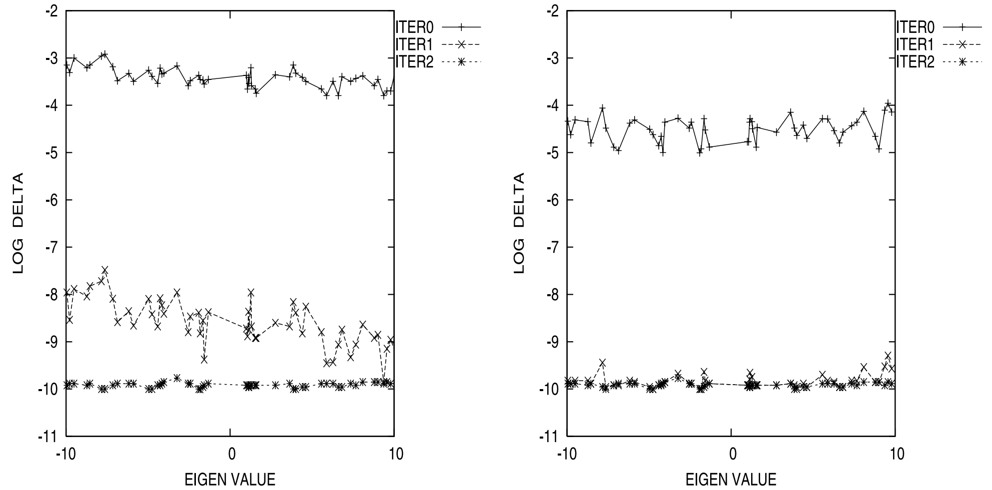
Rayleigh-Ritz 法を部分空間 $\mathcal{S}'$ に適用して得られた近似固有対のうち，固有値が I 内にある個数は，どちらの次数 k の場合にも r=52 に一致した．

「フィルタ対角化法」と「逆反復 2 回分」の計算時間はフィルタの次数 k が 10 の場合にはそれぞれ 1095.7 秒と 573.4 秒，次数が 20 の場合はそれぞれ 1437.7 秒と 375.9 秒であった．

次数 k のそれぞれの場合に，固有値が区間 I 内にある近似固有対について，近似固有値を横軸に，近似固有対に対応する Δ の値を対数目盛で縦軸にとり，上側からそれぞれフィルタ対角化法（ITER0），逆反復適用 1 回（ITER1），逆反復適用 2 回（ITER2）の結果をプロットした折線グラフを示す（**図 19**）．右側のグラフでは ITER1 と ITER2 の折線はほとんど重なっている．

7.2 縮重している場合の実験例

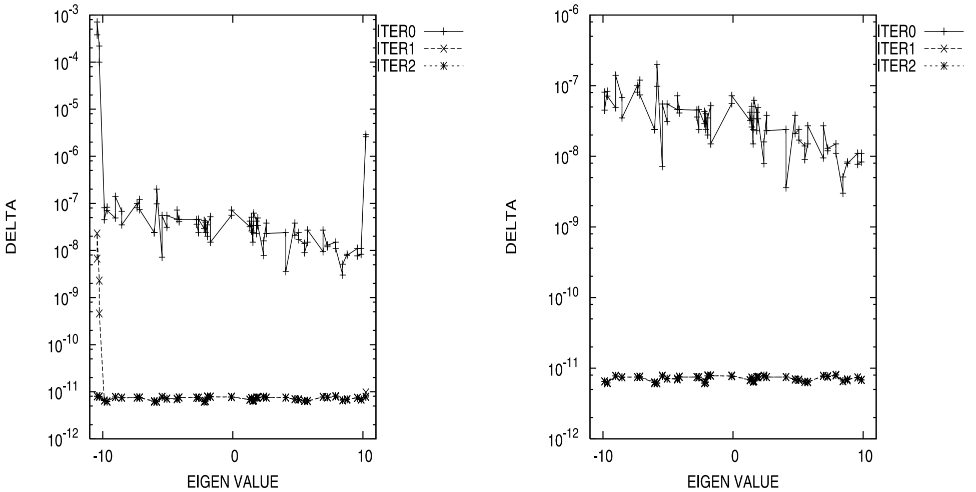
今回の例題 1–9 に用いた係数行列では固有値分布がよく分離しており性質が良かった．対称固有値問題の



Degree 10 (r'=100)
[1095.7 sec + 573.4 sec]

Degree 20 (r'=60)
[1437.7 sec + 375.9 sec]

図 19 例題 9：N=10^6，h=10，I=[$-10, 10$]（r=52 個の固有対）フィルタ次数 k と近似固有対の品質（m=100）
Fig. 19 Example 9: N=10^6, h=10, I=[$-10, 10$] (r=52 true eigenpairs) Filter degree k and quality of approximated eigenpairs (m=100).



部分空間内の全近似固有対
all approximated eigenpairs in subspace

固有値が I 内の近似固有対
approximated eigenpairs whose eigenvalues are in I

図 20 二重縮重の例題：N=10^5，h=10，I=[$-10, 10$]（r=78 個の固有対）次数 k=40，m=100，r'=84
Fig. 20 Example of doubly degeneracy: N=10^5, h=10, I=[$-10, 10$] (r=78 true eigenpairs) Degree k=40, m=100, r'=84.

解法では先に固有値を求めてから固有ベクトルを求める場合，固有値の分布に縮重や極端な近接があると一般に難しくなる．

フィルタ対角化法は，Rayleigh-Ritz 法に基づいて固有ベクトルの組を直交性を保って求める方法であること，フィルタの透過度が（数学的には）固有値にのみ依存するように構成されていることから，固有値が縮重している問題も縮重がない場合とまったく同様に扱える．

すべての固有値が二重に縮重するように行列を作った．縮重していない場合のテスト問題の $n = N/2$ 次の係数の行列 A_n と B_n から，それらをそれぞれ対角ブロックとして 2 回繰り返した行列 A，B を作る $A = A_n \oplus A_n$，$B = B_n \oplus B_n$ と，A，B を係数とする一般固有値問題の固有値は A_n，B_n を係数とする問題の固有値を二重に重複して持つことが容易に分か

る．もちろん，フィルタ対角化法の例題としてそのような特殊な構造を持っていることを特に利用しないで解かせた．

行列次数 N=10^5，半帯幅 h=10，区間 I=$[-10, 10]$ で，固有対の個数 r=78 の問題を次数 k=40 次のずらし Chebyshev 型のフィルタ（$\gamma = 1$）を用いてランダムな初期ベクトルの個数 $m = 100$ として計算した例である．

フィルタ後の部分空間 $\mathcal{S}'$ の階数 r' は 84 となった．Rayleigh-Ritz 法を部分空間 $\mathcal{S}'$ に適用して得られた固有対のうち，固有値が I 内にある近似固有対の個数は r=78 と一致した．

m のそれぞれの場合について，固有値が区間 I 内にある近似固有対について，近似固有値を横軸に，近似固有対に対応する Δ の値を対数目盛で縦軸にとり，上側からそれぞれフィルタ対角化法（ITER0），逆反復適用 1 回（ITER1），逆反復適用 2 回（ITER2）の結果をプロットした折線グラフを示す（**図 20**）．逆反復は 1 回で十分に収束したため，グラフ上では ITER1 と ITER2 の折線がほとんど重なっている．

区間内の近似固有対について，ITER0 では Δ の値は 10^{-7} 程度以下，ITER1 では Δ の値は 10^{-11} 程度となっていて，区間が $[-10, 10]$ であることを考慮すると，フィルタ対角化法で得られた近似固有値の相対精度は 8 桁程度で，逆反復を加えて得られた固有値の相対精度は 12 桁程度あることがグラフから分かる．

8. 付　　記

(1) レゾルベントの線形和 $\mathcal{F} = \sum_{i=1}^{k} \omega_i (A - \rho_i B)^{-1} B$ の形式の線形演算子は，「櫻井と杉浦の projection 法[17]」においてモーメントを与える積分の中で出現している．彼らの論文では複素周回積分で求めたモーメントを経由して周内部の一般的な有理形関数の極の位置を求める方法を適用することで，複素閉曲線内にある固有値だけを取り出す定式化である．求積公式を用いて曲線上の積分を置き換えて近似すれば，レゾルベントの線形和の形式が出現する．

今回の論文の視点はモーメント法ではなくて，フィルタ対角化法にある．定式化には曲線上の積分を用いなくてもよい．レゾルベントのスペクトル表示を利用することで，離散的な分点 ρ_i の組が与えられると，それに対応するレゾルベントの線形和 $\mathcal{F}$ のスペクトル透過特性 $G(\lambda)$ が近似なしで解析的表示式（有理関数）で表されることを示した．その結果を用いてフィルタの特性 $G(\lambda)$ が望ましいものになるように分点 ρ_i の分布（と線形和の重み）をうまく選ぶのである．

(2) フィルタとしてレゾルベント $(A - \rho_i B)^{-1}$ を利用する方法は，係数 $(A - \rho_i B)$ の連立一次方程式が何らかの手段により高速に解けることが前提であり，そうでなければ実用上の価値がない．たとえば今回扱ったように A，B が幅の狭い帯行列の場合には（片側枢軸選択つきの）*LU*-分解[10] を用いて高速に解ける．

帯行列ではない疎行列の場合にも，直接法で非零要素の分布に適応してグラフ理論の手法などを用いて発生する fill-in をなるべく抑えながら *LU*-分解を行う技法が，構造解析や電子回路などの分野では長年研究され用いられてきた（文献 12) の第 6 章など）．発生する fill-in の量は元の行列の非零分布の性質と用いる解法に依存し，それにより計算時間や実行の完了が左右される．行列の性格に適した方法と高性能な実装は一般には容易ではないが，必要ならば既存の計算ルーチンライブラリ（商業用，非商業用）を利用することが考えられる．行列の非零要素の分布がきわめて一般的で，*LU*-分解の fill-in が非常に多くなる場合，あるいは記憶容量の点から fill-in 発生が許容し難い場合には，反復法を用いて解くことが考えられる（その場合でも，疎行列の *LU*-分解中の fill-in の多くを省略しながら行う「不完全 *LU*-分解」は，反復解法の収束性を改良する前処理として重要である）．

A，B が一般的な疎行列の場合，反復法による複素対称な係数の連立一次方程式の解法については，すでに文献 18) などの実施例がある．疎行列に対する連立一次方程式を解くための反復法には，Krylov 部分空間法系（通常は不完全 LU 分解などの前処理をともなう）以外にも，たとえば行列の由来によってはマルチグリッド法を用いることなども考えられる．疎行列に対する反復法の効率的な使用については今後の研究課題としたい．

(3) 多項式 $\varphi(\lambda)$ が実係数で実数の零点を持たなければ，その零点は $k/2$ 組の複素共役対である．複素共役対称性を利用するとフィルタ作用の計算は $\mathcal{F}\mathbf{x} = \sum_{i=1}^{k} \omega_i (A - \rho_i B)^{-1} B\mathbf{x} = \sum_{\mathrm{Im}\,\rho_i > 0} 2\mathrm{Re}\,\{\omega_i\,(A - \rho_i B)^{-1} B\mathbf{x}\}$ となり，複素対称連立一次方程式を解く回数はフィルタの次数 k の半分の $k/2$ 回で済ませることがで

きる．

9. ま と め

対称な行列 A，B（ただし B は正定値とする）を係数とする一般固有値問題 $A\mathbf{v} = \lambda B\mathbf{v}$ の固有対を $(\lambda_\mu, \mathbf{v}_\mu)$，$\mu$=1, . . . , N とする．相異なる複素数のシフト量 ρ_i，i=1, . . . , k によるレゾルベント $(A-\rho_i B)^{-1}$ の線形結合で与えられる作用素 $\mathcal{F}$ は，$\mathbf{v}_\mu$ をその固有ベクトルとして持ち，作用素 $\mathcal{F}$ に対する $\mathbf{v}_\mu$ の固有値（透過特性）は λ_μ の有理関数 $G(\lambda_\mu)$ として具体的な式により与えられる．G は一般には k 次の有理関数でその分母は k 個のシフト量 ρ_i を零点とする多項式，分子を 1 と決めれば線形結合の係数は一意に決まる．このことを用いて，k 個のシフト量の分布を適切に選ぶことで，指定された区間 I に対応する帯域透過特性を持つフィルタ作用素をレゾルベントの線形和として構成する方法の例を具体的に示した．

このように構成したフィルタ $\mathcal{F}$ を利用したフィルタ対角化法を実施した．区間 I 内に固有値を持つ固有ベクトルが張る部分空間を S_I とすると，$\mathcal{F}$ は S_I への近似的な射影子である．フィルタ対角化法の概略は：

- 無作為ベクトルを十分多くとり，線形独立性を高めるためにあらかじめ直交化した後にフィルタ $\mathcal{F}$ に通した像ベクトルを集めて特異値分解を適用することで，S_I を近似する部分空間 S' の基底ベクトルの組を構成する．
- 通常の Rayleigh-Ritz 法を部分空間 S' に適用すれば，固有値が区間 I に含まれるすべての固有対の近似が得られる．

フィルタ対角化法で得られた近似固有対には，用いるフィルタの遮断特性が完全ではないために余分な固有ベクトル成分が混ざる影響，演算誤差の影響などが入る．得られた固有対には他の対角化法での場合と同様に，事後の改良を施すことが可能である．たとえば固有値分布がよく分離している場合には，通常の単純な逆反復法が適用できる．固有値分布が重複もしくは近接している場合には，よく行われているように同時逆反復法を用いて，逆反復ごとに得られた近似固有ベクトルを直交化し，Rayleigh-Ritz 法を適用することになるであろう．

得られた近似固有対 $(\lambda, \mathbf{v})$ の精度の簡便な見積りとして残差を $\mathbf{r} \equiv (A-\lambda B)\mathbf{v}$ とするとき，固有値の真の値からの誤差の限界がノルム $\Delta \equiv \sqrt{\mathbf{r}^T B^{-1}\mathbf{r}}$ により与えられることが利用できる．真の固有対が分からない一般的な状況下ではきわめて有効な判断材料を与える（ただしこのノルムの計算には B^{-1} をベクトルに作用させるために，B を係数とする連立一次方程式が精度良く高速に解けることが必要である）．

今回は行列 A，B が幅の狭い帯行列の場合に一応限定し，上記のフィルタ対角化法のプログラムを作成して，方法が実際にうまく機能することを数値実験で確認した．得られた近似固有対に逆反復法による改良を施し，残差のノルムにより改良にともなう近似固有対の品質の変化を調べた．

10. 今後の課題

今後の課題としては以下のようなことが考えられる．

(1) 実験対象を帯行列の問題から，より実用的一般的な疎行列の問題へ広げるべきである．その場合，フィルタの構成に現れる連立一次方程式を効率的に解くためには疎行列用の直接解法あるいは反復解法についての研究が必要となる（例：文献 18)）．

(2) 今回の例題に用いた係数行列は，固有値分布がよく分離していて性質が良いもの（例題 1–9）か，あるいはすべての固有値が二重に縮重しているものであった．今後は固有値分布に極端な近接あるいは高度な縮重を含む困難な例題を作って与えて，解法の特性の実証をさらに行うことを検討するべきである．フィルタ対角化法による固有対の計算では固有ベクトルを Rayleigh-Ritz 法に基づいて求めるため，固有値に近接や縮重がある場合も原理上困難はないが，Rayleigh-Ritz 法で得られた固有対の改良を行う段階においては，固有値の分布によっては単純な逆反復法ではなく，同時逆反復法を用いる必要が生じる[13)]．

(3) 今回のフィルタ対角化法は本質的に並列性の高い計算部分が多く含まれているので，その並列性を実際に引き出す計算を行い，並列化性能の実験評価をすることが望ましい．

(4) 今回用いたフィルタでは，共鳴による部分空間の計算精度の劣化を防ぐためにシフト量 ρ_i として複素数を採用した．そのとき，解くべき連立一次方程式の係数行列 $A-\rho_i B$ は複素対称になる．今回の実験では行列の片側枢軸交換つき LU 分解を用いたが，この係数行列は（複素数シフトを導入したことから）つねに非特異なので，対称性を利用する複素数版の Cholesky 分解 LL^T や改訂 Cholesky 分解 LDL^T の方法も検討する価値が在る．

（5） シフト量が実数のレゾルベントだけを用いる安定な計算法が構成できないかについても，改めて研究すべきであろう．

参 考 文 献

1) Alacid, M., Leforestier, C. and Moiseyev, N.: Bound and resonance states by a time-independent filter diagonalization method for larger Hamiltonian systems, *Chem. Phys. Lett.*, Vol.305, pp.258–262 (1999).
2) Braun, M., Sofianos, S.A., Papageorgiou, D.G. and Lagaris, I.E.: An Efficient Chebyshev-Lanczos Method for Obtaining Eigensolutions of the Schrödinger Equation on a Grid, *J. Comput. Phys.*, Vol.126, pp.315–327 (1996).
3) Crawford, C.R.: Reduction of a Band-Symmetric Generalized Eigen-value Problem, *Comm. ACM*, Vol.16, No.1, pp.41–44 (1973).
4) Demmel, J.W. and Veselic, K.: Jacobi's method is more accurate than *QR*, *SIAM J. Matrix and Appl.*, Vol.13, No.4, pp.1204–1245 (1992).
5) Ericsson, T. and Ruhe, A.: The spectral transformation Lanczos method for the numerical solution of large sparse generalized symmetric eigenvalue problems, *Math. Comp.*, Vol.35, pp.1251–1268 (1980).
6) Kaufman, L.: Banded Eigenvalue Solvers on Vector Machines, *ACM Trans. Math. Soft.*, Vol.10, No.1, pp.73–86 (1984).
7) Mandelshtam, V.A. and Taylor, H.S.: Spectral projection approach to the quantum scattering calculations, *J. Chem. Phys.*, Vol.102, pp.7390–7399 (1995).
8) Mandelshtam, V.A. and Taylor, H.S.: A low-storage filter diagonalization method for quantum eigenenergy calculation for spectral analysis of time signal, *J. Chem. Phys.*, Vol.106, pp.5085–5090 (1997).
9) Mandelshtam, V.A. and Taylor, H.S.: The quantum resonance spectrum of the H_3^+ molecular ion for $J = 0$. An accurate calculation using filter diagonalization, *J. Chem. Soc. Faraday Trans.*, Vol.93, pp.847–860 (1997).
10) Martin, R.S. and Wilkinson, J.H.: Solution of symmetric and unsymmetric band equations and the calculations of eigenvectors of band matrices, *Numer. Math.*, Vol.9, pp.279–301 (1967).
11) 松本純一：Krylov 部分空間反復法を用いた Arnoldi 法による有限要素並列固有値解析，日本応用数理学会論文誌，Vol.15, No.2, pp.145–158 (2005).
12) 村田健郎，小国 力，唐木幸比古：スーパーコンピュータ 科学技術計算への適用，丸善 (1985).
13) 小国 力（編），村田健郎，三好俊郎，ドンガラ, J.J., 長谷川秀彦（著）：行列計算ソフトウェア，丸善 (1991).
14) Parlett, B.N.: *The Symmetric Eigenvalue Problem*, SIAM, Philadelphia (1998).
15) Rutishauser, H.: The Jacobi method for real symmetric matrices, *Numer. Math.*, Vol.9, pp.1–10 (1966).
16) Saad, Y.: Diagonalization algorithms in real space methods for electronic structure calculations, PMAA-06, IRISA, Rennes, Sep. 8th, Dept. Comput. Sci. and Eng., Univ. of Minnesota (2006)
17) Sakurai, T. and Sugiura, H.: A Projection Method for Generalized Eigenvalue Problems, *J. Comput. Appl. Math.*, Vol.159, pp.119–128 (2003).
18) 多田野寛人，櫻井鉄也：一般化固有値問題で現れる複素対称連立一次方程式に対する反復解法の性能評価，第 35 回数値解析シンポジウム講演予稿集，pp.61–64 (June 2006).
19) 杉原正顕，室田一雄：数値計算法の数理，第 2 章 2 節，岩波書店 (1994).
20) Toledo, S. and Rabani, E.: Very Large Electronic Structure Calculations Using an Out-of-Core Filter-Diagonalization Method, *J. Comput. Physics*, Vol.180, pp.256–269 (2002).
21) Wall, M.R. and Neuhauser, D.: Extraction, through filter-diagonalization, of general quantum eigenvalues or classical normal mode frequencies from a small number of residues or a short-time segment of a signal. 1. Theory and application to a quantum-dynamics model, *J. Chem. Phys.*, Vol.102, pp.8011–8022 (1995).
22) 矢川元基，青山祐司：有限要素固有値解析 — 大規模並列計算手法，森北出版 (2001).

（平成 19 年 7 月 23 日受付）
（平成 19 年 11 月 29 日採録）

村上 弘

現在，首都大学東京・数理情報科学専攻の准教授．研究分野は，数学または科学の問題の数値的あるいは記号的方法による効率の良いあるいは精度の良い解法，およびその並列化．1992 年北海道大学の理学博士号（化学第二学専攻）を取得．