

フィルタを用いた対称一般固有値問題の解法

村上 弘 (首都大学東京)

フィルタとその伝達関数 大規模な N 次実対称定値一般固有値問題 $Av = \lambda Bv$ で、固有値が区間 $[a, b]$ にある固有対を求めるのに $[a, b]$ を通過帯域とするフィルタを用いる。レゾルベントを $\mathcal{R}(\tau) \equiv (A - \tau B)^{-1}B$ とし、フィルタ作用素はその線形結合 $\mathcal{F} = c_\infty I + \sum_{p=1}^{2n} \gamma_p \mathcal{R}(\tau_p)$ とする。すると固有値 λ の固有ベクトル v に対して $\mathcal{F}v = f(\lambda)v$ が成立する。ここで、伝達関数 $f(\lambda) = c_\infty + \sum_{p=1}^{2n} \gamma_p / (\lambda - \tau_p)$ は λ の有理関数で、任意の固有値 λ を持つ固有ベクトルに対する伝達率を与える。フィルタの次数 n 、複素シフト量 τ_p 、複素係数 γ_p 、実係数 c_∞ は、伝達関数の形状特性に対する制約を満たすように決める。数学的類似性により、アナログ電気回路の典型的4種類のフィルタであるバターワース、チェビシェフ、逆チェビシェフ、楕円と同じ特性のフィルタを構成することができて、その伝達関数 $f(\lambda)$ は実軸上で非負の実数値をとる。

従来の方 十分に多くの m 個のランダムな N 次ベクトルを、計量 B で正規直交化して組 X とする。フィルタ $\mathcal{F}$ を組 X に作用させて得たベクトルの組を Y とする。組 Y を固有値が区間 $[a, b]$ にある固有ベクトル全体が張る不変部分空間の近似部分空間の基底の組であるとみなす。組 Y が張る部分空間内で元の一般固有値問題の近似対を Ritz-Galerkin 法 (サブスペース法) で求めるのに、従来法では数値的安定性のためにまず $N \times m$ 行列 Y を計量 B で特異値分解し、次に特異値が閾値よりも大きい特異ベクトル $r (\leq m)$ 個を集めた組 Z を作り、次数 r の小さい $Z^T A Z$ を係数とする標準固有値問題に帰着させてきた。この B -SVD で得られる特異ベクトルの組は、組 Y が張る空間を計量 B で説明する良い成分軸 (主成分) ではあるが、元の一般固有値問題の構造とは無関係に構成されるため、各々の特異ベクトルは $[a, b]$ の近傍に固有値がある固有ベクトルの混合したものになる。そのため一般には切断の閾値を大きく設定すると、切断された基底の組 Z の張る部分空間による不変部分空間の近似度が悪化する。しかし逆に閾値を過度に小さく設定すると、基底の組 Z に有効精度が減少した特異値の小さな短いベクトルが B -正規化で拡大されて丸め誤差を多く含む特異ベクトルとして参加するため、残差の大きい偽の固有対が多数現われるようになる。

今回の方法 今回の手法はこれまでのように、組 Y が張る部分空間内での元の一般固有値問題の (Ritz 値による) 近似固有対を (B -SVD を用いるなどして) Ritz-Galerkin 法 (サブスペース法) で直接求めるのではなくて、以下のような2段階の方法をとる。レゾルベントの線形結合をフィルタ作用素とする場合は、元の一般固有値問題 $Av = \lambda Bv$ の固有対 (λ, v) の固有ベクトル v は同時にフィルタ作用素 $\mathcal{F}$ の固有ベクトルでもあり、 $\mathcal{F}v = f(\lambda)v$ を満たす。そこでまず、組 Y が張る部分空間内でのフィルタ作用素 $\mathcal{F}$ の (調和 Ritz 値による) 近似固有対 (ρ, v) を Ritz-Galerkin 法で求める (方法は後述。またベクトル v は B -正規直交にとれる)。得られた $\mathcal{F}$ の近似対 (ρ, v) のうちで、値 ρ が区間 $[a, b]$ (あるいはその近傍) に対する伝達関数 $f(\lambda)$ の値域に含まれているベクトル v をすべて集めて組 Z を作る。次にこの組 Z の張る部分空間内に於いて、Ritz-Galerkin 法で元の一般固有値問題 $Av = \lambda Bv$ の (Ritz 値による) 近似固有対を求める。

$\mathcal{F}$ の近似固有対の解法 組 Y の張る部分空間内での $\mathcal{F}$ の (調和 Ritz 値による) 近似固有対 (ρ, v) は、Ritz-Galerkin 法で以下の方法により求める。固有値方程式 $\mathcal{F}v = \rho v$ に於いて $v = Yu$ とおき、両辺に左から $X^T B$ を乗じると、小さい次数 m の一般固有値問題 $\alpha u = \rho \beta u$ を得る。但し、 $\alpha = X^T B \mathcal{F} Y$ 、 $\beta = X^T B Y$ である。関係 $B \mathcal{F} = \mathcal{F}^T B$ を用いると、 $\alpha = Y^T B Y$ であり、 α は半正定値対称、また $\beta = X^T B \mathcal{F} X = Y^T B X = \beta^T$ により β も対称である。また典型的フィルタなどの $f(\lambda)$ が非負の実関数の場合には β は半正定値になる。通常はフィルタの性質から Y の特異値には微小な値が多く現われるため、係数 α 、 β はどちらも条件が極めて悪い。そこで固有値方程式 $\alpha u = \rho \beta u$ を以下の特別な方法で解く。 α の式には Y が2回入っているが β には1回なので、 α よりも β の方が性質が良い。そこでまず β を Jacobi 法により固有値を減少順に並べて対称固有値分解して $\beta = Q^T D Q$ とする。 $G \equiv Q \alpha Q^T$ 、 $u \equiv Q w$ と直交変換すれば $G w = \rho D w$ となる。小さい閾値 ϵ 未満の D の対角要素と対応する行と列を G 、 D 、 w から省いて、切断された固有値方程式 $\hat{G} \hat{w} = \rho \hat{D} \hat{w}$ を得る。さらに $H \equiv \hat{D}^{-1/2} \hat{G} \hat{D}^{-1/2}$ 、 $\hat{w} \equiv \hat{D}^{1/2} z$ と変換すると、標準固有値問題 $H z = \rho z$ を得るので、これを Jacobi 法で解く。得られた固有対 (ρ, z) のベクトル z から逆変換により対応する $\hat{w}$ を得て、切断された行の自由度に零を補って w を得て、さらに u を得て、 $v = Yu$ を得る (u の規格化係数の記述は省略する)。