

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

村 上 弘^{†1}

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 subspace 法をフィルタの出力ベクトルの組が張る部分空間に対して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のには適切でない。そのためこれまで、フィルタの出力ベクトルの組を B -計量で特異値分解して閾値以下の特異値は切断することで subspace 法を適用する B -正規直交基底の組を構成してきた。

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、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。

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。

Filter Diagonalization Method which Constructs an Approximation of Orthonormal Basis of the Invariant Subspace from the Filtered Vectors

HIROSHI MURAKAMI^{†1}

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^{(6)-(11),14)}を用いて求める。シフト量が複素数のレゾルベントの線形結合をフィルタとして用いる。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には適切でない。

これまでの方法では、閾値による特異値の切断を行う B -計量の特異値分解をフィルタの出力ベクトルの組に適用することで 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。さらに特異値分解では元の固有値問題の係数 A を参照せずに B -正規直交性だけに基づいて基底の組を構成することから、基底の組の張る空間は一般には不変部分空間の近似にはならない。

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。

2. フィルタとその伝達関数

大規模な N 次の実対称定値一般固有値問題 (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 $[a, b]$ のフィルタを利用して求める。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

^{†1} 首都大学東京 数理情報科学専攻

Department of Mathematics and Information Sciences, Tokyo Metropolitan University

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, 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),5)} の Butterworth, Chebyshev, inverse Chebyshev, elliptic と伝達率特性が同じフィルタをレゾルベントの線形結合として構成できる^{12),14)}. 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^{7),8)} で用いられているフィルタは Butterworth と一致する.

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, $g_{\min}$ を通過

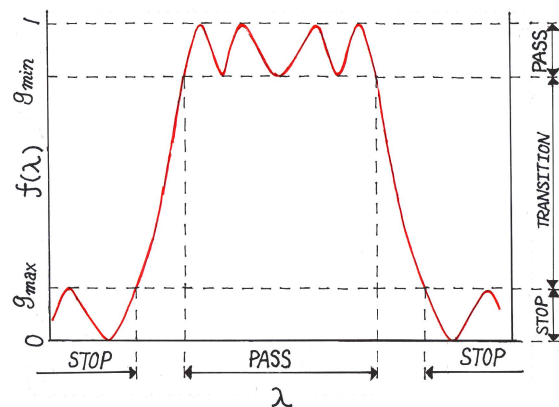


図 1 フィルタの伝達関数 $f(\lambda)$ の概念図.

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 $(\mu, g_{\min}, g_{\max})$ を指定すると, 条件を満たせる最小の次数 n の値が決まり, n をその値以上に設定すれば $g(t)$ が完全に決まる (もしも, 制約条件の 3 組を $(\mu, g_{\min}, n)$ 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.

フィルタの設計の詳細については既に資料^{12)–14)} 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 (これまでの方法)

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. その組 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. これまで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 $Z^T A Z$ 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 法の近似度が下がる. 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 $\mathcal{F}$ の近似対 $(\rho, \mathbf{v})$ 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: $A\mathbf{v}=\lambda B\mathbf{v}$ の近似対を subspace 法で求める。

4.1 $\mathcal{F}$ の近似固有対の解法

$\mathcal{F}$ の組 Y の張る部分空間内での近似対 $(\rho, \mathbf{v})$ を Ritz-Galerkin 法を用いて以下の方法で求める。

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ことの仮定から容易に出てくる関係 $B\mathcal{F}=\mathcal{F}^TB$ を用いると、 $\alpha=Y^TBY$ がわかり、 α は半正定値対称である。また同様に $\beta=X^TB\mathcal{F}X=Y^TBX=\beta^T$ 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ことから、係数 α, β はどちらも悪条件であるので、それ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、入っているため、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 $\mathbf{u}=Q\mathbf{w}$ 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 (例えば $100\epsilon_{\text{MAC}}$) を ϵ と置き、値が 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 $\hat{G}\hat{\mathbf{w}}=\rho\hat{D}\hat{\mathbf{w}}$ を得る。さらに、変換 $\hat{\mathbf{w}}\equiv\hat{D}^{1/2}\mathbf{z}$ により $H\equiv\hat{D}^{-1/2}\hat{G}\hat{D}^{-1/2}$ 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 $\hat{\mathbf{w}}$ 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 法で解くと $\mathbf{z}$ 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 $\mathbf{v}^{(i)}=(1/\sqrt{\rho^{(i)}})\cdot Y\mathbf{u}^{(i)}$ と規格化すれば、 $\mathbf{v}^{(i)}$ が B -正規直交となる。)

5. 数値実験の例

近似対の精度の評価方法

近似対 $(\lambda, \mathbf{v})$ 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 $\Delta\equiv\sqrt{\mathbf{r}^TB^{-1}\mathbf{r}}$ は固有値の誤差上限を与え、 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 の上限の簡単な拡張になっている。但し、固有値の誤差上限としては固有ベクトルの近似が悪いと過大評価で、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。

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 i7-2600K (3.4GHz, 8MB, 4 コア, Hyperthread 機能オフ, P67chipset); 主記憶: 16Gbytes (dual channel; 4x4GB DDR3 1600MHz PC3-12800 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。

5.1 例題 1 (次数 $n=12$ の elliptic フィルタ)

この例題 1 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 ($|p-q|\leq h$) 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、 $p, q=1, 2, \dots, N$ で、 $\delta_{p,q}$ は Kronecker 記号である。この一般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、 $g_{\min}=-3[\text{dB}]$, $g_{\max}=-150.14[\text{dB}]$ に対して、 $\mu=1.4$ である。フィルタの係数 c_∞ は 9.7×10^{-16} と小さいので省いた。

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新提案の方法とを比較実験する。

従来の方法 (例題 1)

B -SVD による Y 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 法を適用した。得られた 130 個の近似対で固有値が区間 $[50, 100]$ 内にあるものは 111 個であった。これら 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

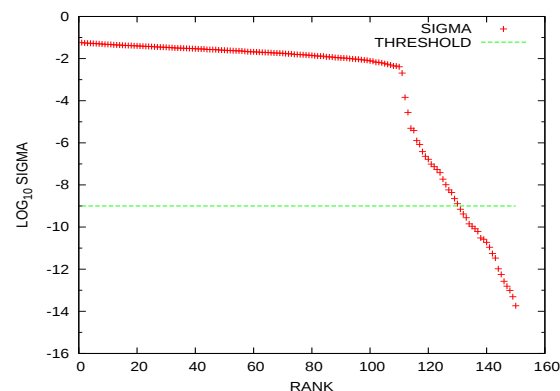


図 2 例題 1, 従来の方: 特異値分布 ($m=150$, 閾値の絶対値 10^{-9})

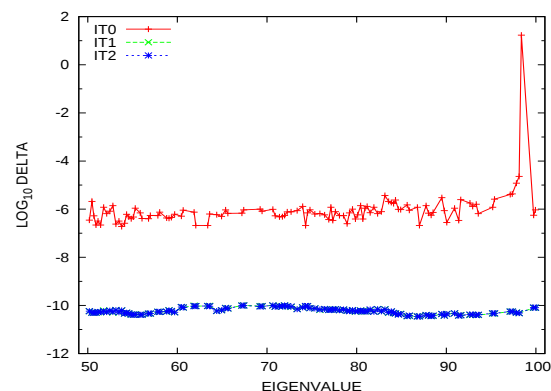


図 3 例題 1, 従来の方: 近似対の残差のノルム (区間 $[50,100]$, $m=150$)

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

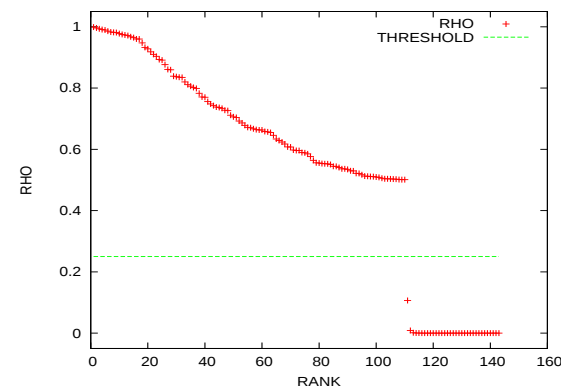


図 4 例題 1, 新しい方: ρ の値の分布 ($m=150$, 閾値 0.25)

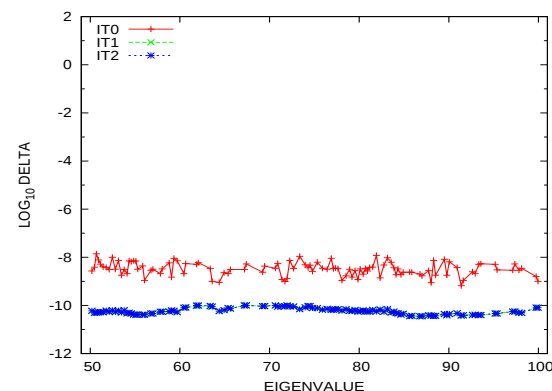


図 5 例題 1, 新しい方: 近似対の残差のノルム (区間 $[50,100]$, $m=150$)

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 $[50,100]$ の外に出たので、グラフの IT1, IT2 のプロットには含まれていない。IT1, IT2 のプロットに含まれる逆反復により改良された近似対 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、固有対の相対精度は少なくとも 12 桁程度はあることがわかる。計算の経過時間は、1 スレッド実行ではフィルタ対角化に 142.0 秒, 2 回の逆反復に 216.9 秒で、4 スレッド並列実行ではフィルタ対角化に 44.2 秒, 2 回の逆反復に 62.3 秒であった。

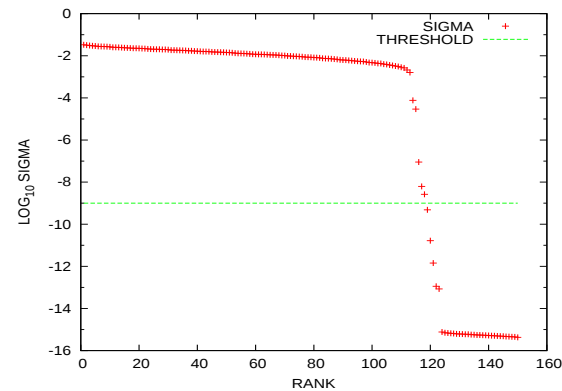


図 6 例題 2, 従来の方法: 特異値分布 ($m=150$, 閾値の値 10^{-9})

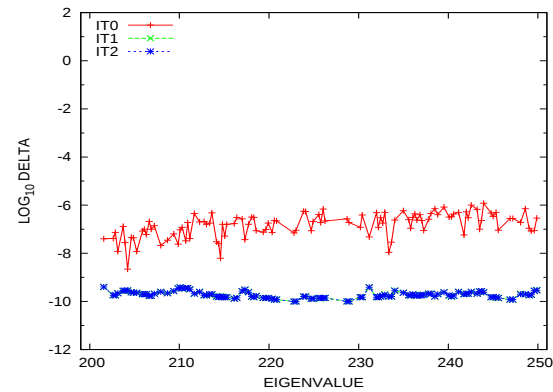


図 7 例題 2, 従来の方法: 近似対の残差のノルム (区間 $[200,250]$, $m=150$)

新しい方法 (例題 1)

「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 4) に示す. $g_{\min} = -3[\text{dB}]$ から, 通過帯域での ρ の下限は約 0.5011872 である. ρ の閾値を 0.25 とすると, 固有対の

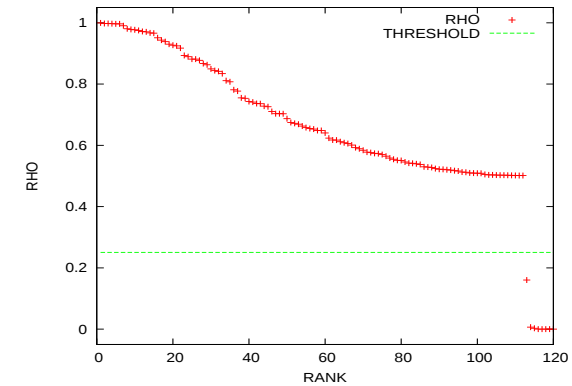


図 8 例題 2, 新しい方法: ρ の値の分布 ($m=150$, 閾値 0.25)

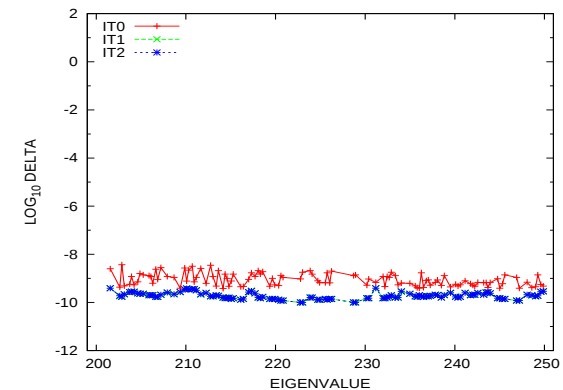


図 9 例題 2, 新しい方法: 近似対の残差のノルム (区間 $[200,250]$, $m=150$)

個数と一致する 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. 得られた近似対の固有値は全て区間 $[50,100]$ 内にあった. 得られた近似対についてグラフ (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

による近似対の残差のノルムの大きさは $10^{-9} \sim 10^{-8}$ 程度で、固有値の相対精度は少なくとも 10 桁～11 桁程度であることがわかる。IT1 と IT2 のグラフから、逆反復で改良された近似対の固有値の相対精度は少なくとも 12 桁程度であることがわかる。計算の経過時間は、1 スレッド実行ではフィルタ対角化に 134.9 秒、2 回の逆反復に 183.8 秒であった。4 スレッド並列実行ではフィルタ対角化に 40.4 秒、2 回の逆反復に 53.7 秒であった。

5.2 例題 2 (次数 $n=16$ の elliptic フィルタ)

この例題 2 の係数行列 A, B はどちらも次数 $N=3 \times 10^5$ の帯行列で、半帯幅は $h=100$ である。帯内 ($|p-q| \leq h$) の行列要素は $A_{p,q} = \frac{pq}{\sqrt{p^2+q^2}}$, $B_{p,q} = \frac{1}{p+q-1} + \delta_{p,q}$ とした。但し、 $p, q=1, 2, \dots, N$ で、 $\delta_{p,q}$ は Kronecker 記号である。この一般固有値問題の固有対で固有値が区間 $[200, 250]$ にあるものは 112 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、 $g_{\min} = -3[\text{dB}]$, $g_{\max} = -142.7[\text{dB}]$ に対して、 $\mu=1.1$ である。フィルタの係数 c_∞ は 5.3×10^{-15} と小さいので省略した。フィルタ出力の組 Y から subspace 法に与える基底の組 Z を作るのに、切断付き SVD を用いた従来の方法と、新提案の方法とを実験により比較する。

従来の方法 (例題 2)

B -SVD による Y の特異値分布をグラフ (図 6) に示す。特異値の閾値を 10^{-9} とすると、切断の結果 118 個の基底が得られた。その 118 個の基底の組に subspace 法を適用して得られた近似対 118 個のうちで固有値が区間 $[200, 250]$ 内にあるものはちょうど 112 個であった。グラフ (図 7) に、これら 112 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 118 個の近似対を Rayleigh 商逆反復によりそれぞれ 1 回、2 回改良を施したもののうちで固有値が区間内のもの 112 個の残差のプロットである。このグラフより、これら 112 個の近似対の残差のノルムの大きさは $10^{-8} \sim 10^{-6}$ 程度なので、近似固有値の相対精度が少なくとも 8 桁程度はあることが分かる。計算の経過時間は、スレッド数 4 の並列実行ではフィルタ対角化に 349.9 秒、2 回の逆反復に 180.8 秒であった。

新しい方法 (例題 2)

2.2×10^{-14} を閾値として β の固有値分解を切断すると、次元は 120 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。 $g_{\min} = -3[\text{dB}]$ から、通過帯域での ρ の下限は約 0.5011872 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 112 個の基底の組を得た。その 112 個の基底の組に subspace 法を適用して得ら

れた近似対の固有値は、全て区間 $[200, 250]$ 内にあった。グラフ (図 9) には得られた近似対について、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対の残差のノルムの大きさは 4×10^{-10} から 4×10^{-9} 程度で、近似固有値の相対精度が既に少なくとも 11 桁前後はあることがわかる。計算の経過時間は、スレッド数 4 の並列実行ではフィルタ対角化に 289.3 秒、2 回の逆反復に 168.5 秒であった。

5.3 例題 3 (低次 $n=4$ の Chebyshev フィルタ)

この例題 3 の係数行列 A, B はどちらも次数 $N=3 \times 10^5$ の帯行列で、半帯幅は $h=100$ である。帯内 ($|p-q| \leq h$) 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、 $p, q=1, 2, \dots, N$ で、 $\delta_{p,q}$ は Kronecker 記号である。この一般固有値問題の固有対で固有値が区間 $[150, 200]$ 内のものは 88 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、 $g_{\min} = -3[\text{dB}]$, $g_{\max} = -39.715[\text{dB}]$ に対して $\mu=2$ である。Chebyshev フィルタでは係数 c_∞ は常に零である。

フィルタ出力の組 Y から subspace 法に与える基底の組 Z を作るのに、切断付き SVD を用いた従来の方法と、新提案の方法とを実験により比較する。

従来の方法 (例題 3)

B -SVD による Y 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 100 個の基底が得られた (この閾値は比較的良好な結果を与えるように選んだ)。その 100 個の基底の組に subspace 法を適用して得られたフィルタ対角化による近似対 100 個のうちで、固有値が区間 $[150, 200]$ 内にあるものは 88 個であった。このフィルタ対角化法で得られた近似対 100 個に Rayleigh 商逆反復を 2 回適用したが、固有値が区間内にある近似対の個数は 88 個のままであった。グラフ (図 11) に、これら 88 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近似対のうちで固有値が区間内にあるもの 88 個に対する残差のノルムのプロットで、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 100 個の近似対を Rayleigh 商逆反復により 1 回、2 回の改良を施して得られた近似対のうちで固有値が区間 $[150, 200]$ 内にあるもの 88 個分のプロットである。このグラフからフィルタ対角化法で得られた IT0 で示された 88 個の近似対の残差のノルムの大きさは 10^{-0} 程度で、近似固有値の相対精度は少なくとも 2 桁程度はあることが分かる。計算の経過時間は、スレッド数 4 の並列実行ではフィルタ対角化に 82.1 秒、2 回の逆反復に 144.7 秒であった。

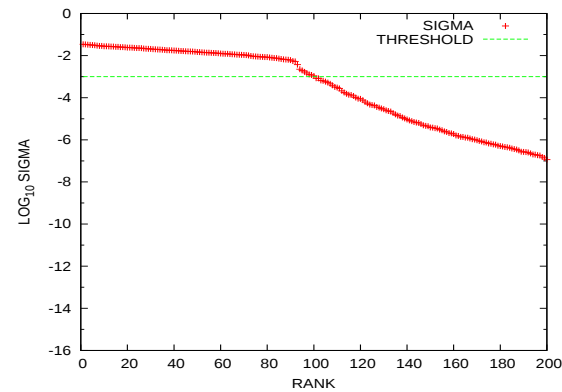


図 10 例題 3, 従来の方法: 特異値分布 (区間 [150,200], $m=200$)

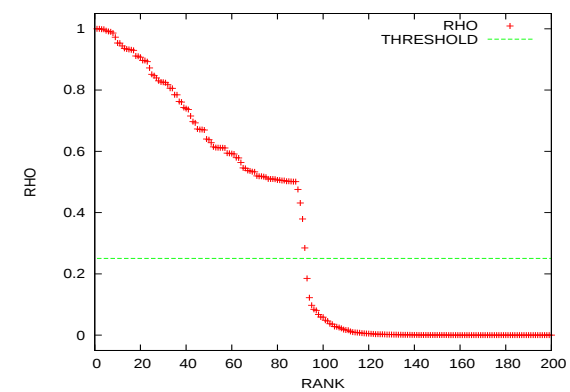


図 12 例題 3, 新しい方法: ρ の値の分布 ($m=200$, 閾値 0.25)

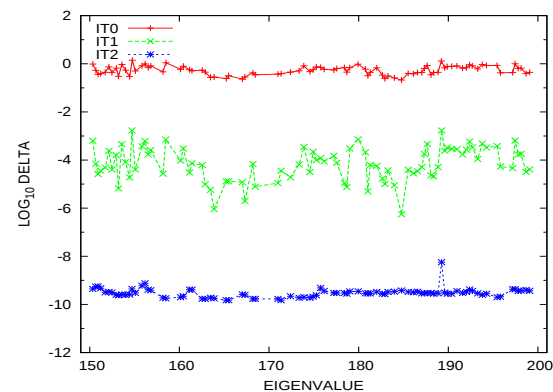


図 11 例題 3, 従来の方法: 近似対の残差のノルム (区間 [150,200], $m=200$)

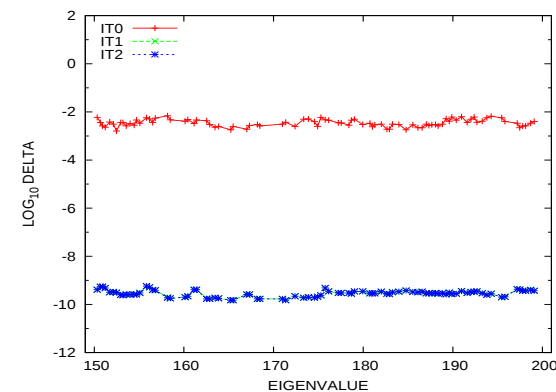


図 13 例題 3, 新しい方法: 近似対の残差のノルム (区間 [150,200], $m=200$)

新しい方法 (例題 3)

β の最小固有値は 1.0×10^{-9} で、閾値 2.2×10^{-14} に対しては β の固有値の切断は生じなかった。グラフ (図 12) に ρ の分布を減少順に示す。 $g_{\min} = -3$ [dB] から、通過帯域での ρ の下限は約 0.5011872 である。 $\rho(88)=0.5011687$, $\rho(89)=0.4754493$, $\rho(90)=0.4313191$, $\rho(91)=0.3792976$, $\rho(92)=0.2845459$, $\rho(93)=0.1852036$ なので、88 番目の ρ の値は通過帯域での下限値よりも僅かに小さい。いま ρ の閾値を簡単に 0.25 に設定すれば、真の固有

対の個数よりも 4 個多い 92 個の基底の組を得る。その 92 個の基底の組に subspace 法を適用して得られた近似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 88 個で、残り 4 個は外側にあった。得られた 92 個の近似対のうちで固有値が区間 [150,200] 内のもの 88 個についてグラフ (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 88 個の固有対に対す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 92 個の近似対を Rayleigh 商逆反復によりそれぞれ 1 回, 2 回改良を施したもののうちで固有値が区間内のものの残差である. この IT0 のグラフからフィルタ対角化法による近似対のうちで固有値が区間内のものの残差のノルムの大きさは 10^{-3} から 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対の固有値の相対精度は少なくとも 11 桁程度はあることもわかる. 計算の経過時間は, スレッド数 4 の並列実行ではフィルタ対角化に 66.4 秒, 2 回の逆反復に 134.3 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 X を $\mathcal{F}$ で濾過した出力ベクトルの組 Y を作る. Y の適切な線形結合により部分空間の基底の組 Z を構成し, Z を subspace 法に与えることで近似固有対を求める.

これまでの方法では, 閾値で特異値の切断を行う SVD を Y に適用して得られる B -正規直交基底の組を Z として用いてきた. フィルタの性能が良ければ通常は満足に働くが, 切断の閾値を最適に決める方法はまだ見い出せていない (参考文献³⁾ の L -曲線の理論が応用できる可能性がある). 切断付き SVD では subspace 法に与える基底の組 Z を出力ベクトルの組 Y と計量 B だけを用いて元の GEVP の係数 A とは無関係に構成するので, Z の張る空間は一般に不変部分空間の構造まで含めた良い近似とはならず, Z に subspace 法を適用して得られる近似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現れるが, 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, 組 Z をその 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基底の組 Z に subspace 法を適用して元の GEVP の近似固有対を求める.

通過帯域 $[a, b]$ のフィルタ $\mathcal{F}$ にレゾルベントの線形結合を採用した場合には, 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と, 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.

$\mathcal{F}$ 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対 $(\rho, \mathbf{v})$ のうちで, ρ の値が ($f(\lambda)$ の通過帯域 $\lambda \in [a, b]$ に対する値域である) 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, 新しい方法はこれまで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の分布する場合でも, 入力ベクトルの個数をそれに対応して多くとれば, 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 (1966), pp.1–10.
- 2) Daniels, R.W.: *Approximation Methods for Electronic Filter Design*, McGraw-Hill, 1974.
- 3) Hansen, P.C. and O’Leary, D.P.: The Use of the L -curve in the Regularization of Discrete Ill-posed Problems, *SIAM J. Sci. Comput.*, Vol.14, No.6 (1993), pp.1487–1503.
- 4) Daniel B.S.: Criteria for Combining Inverse and Rayleigh Quotient Iteration, *SIAM J. Numer. Anal.*, Vol.25, No.6 (1988), pp.1369–1375.
- 5) Lutovac, M.D., Tošić, D.Y. and Evans, B.L.: *Filter Design for Signal Processing*, §12.8, Prentice Hall, 2001.
- 6) 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 (2002), pp.256–269.
- 7) Sakurai, T. and Sugiura, H.: A projection method for generalized eigenvalue problems using numerical integration, *J. Comp. Appl. Math.*, Vol.159(2003), pp.119–128.
- 8) Polizzi, E.: Density-matrix-based algorithm for solving eigenvalue problems, *Phys. Rev. B*, Vol.79, No.11(2009), p.115112[6pages].
- 9) 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) (2007), pp.31–36.
- 10) 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タシステム, Vol.49, No.SIG2 (ACS21) (2008), pp.66–87.
- 11) Ikegami, T., Tadano, H., Umeda, H. and Sakurai, T.: Hierarchical parallel algorithm to solve large generalized eigenproblems, *HPCS2010 論文集* (2010), pp.107–114.
- 12) 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).
- 13) 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).
- 14) 村上 弘: 固有値が指定された区間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タシステム (ACS31), Vol.3, No.3 (2010), pp.1–21.