

# 非対称行列の固有値問題のフィルタ対角化法

村上 弘

首都大学東京 数理情報科学専攻

非対称な行列の固有値問題の固有値が指定した複素領域内にある固有対を、レイリー・リツ法に基づくフィルタ対角化法で求める。異なるシフト量のレゾルベントの線形結合によるフィルタを、固有値が領域内にある固有ベクトル成分は良く透過させるが、それ以外の固有成分を強く減衰させるように構成する。フィルタを通過したベクトルを十分多く集めて特異値分解で分析すると、固有値が領域内にある固有ベクトルの張る不变部分空間を近似する基底の組が得られる。非対称行列に対するレイリー・リツ法をその基底の組に適用すれば、固有値が領域内にある固有対の良好な近似が得られる。近似対の改良にはレイリー商反復法や同時反復法が利用できる。

## The Filter Diagonalization Method for the Unsymmetric Matrix Eigenproblem

Murakami Hiroshi

Dep. of Math. and Information Sci., Tokyo Metropolitan University.

For a given unsymmetric matrix eigenproblem, the filter diagonalization method based on the Rayleigh-Ritz procedure is used to solve those eigenpairs whose eigenvalues are in the specified region in the complex plane. The filter is a linear combination of resolvents and is designed to pass well those components of eigenvectors whose eigenvalues are in the specified region but block strongly the others. An approximation of the invariant subspace spanned by those eigenvectors whose eigenvalues are in the region is constructed by the SVD analysis from enough many filtered vectors. The Rayleigh-Ritz procedure is applied to it and gives the well approximated eigenpairs. The obtained pairs can be improved by the use of the Rayleigh quotient iteration or the simultaneous iteration.

## 1 はじめに

本研究では、レゾルベントの線形結合をフィルタに用いた「フィルタ対角化法」により、非対称な固有値問題の固有対のうち指定した複素領域に固有値があるものを求める方法について数理的な解析をおこなう。対称な定値一般固有値問題の場合の解析は既に論文 [2] で報告したが、今回は非対称な標準固有値問題に対して同様の解析をおこなう。

非対称な問題は（実、エルミート）対称の問題に比べて難しい。対称な問題の固有値は実数なので求めたい固有値の範囲の指定は一次元の実区間であるが、非対称な問題の固有値は一般には複素数になるため範囲の指定が形状を持った二次元の複素領域になる。

（非対称の場合は固有ベクトルには左右の違いがある。以下の説明では、ベクトルは列ベクトルとし、行列や作用素は左側から作用するものとして、右固有ベクトルを固有ベクトル、右固有対を固有対、右

不变部分空間を不变部分空間、などと「右」は省略する。）

非対称行列が対角化不能の場合、一般的な不变部分空間の基底には固有ベクトル以外に広義固有ベクトルを補う必要がある。対称な問題では「固有ベクトルは互いに直交するようにとれる」が、非対称な問題では「左右の（広義）固有ベクトルが双直交するようにとれる」となり、（広義）固有ベクトルの組は数学的には線形独立であっても数値的にはいくらでも悪条件となり得る。

## 2 フィルタ対角化法

フィルタ対角化法の概要を述べる。

まず「線形フィルタ」を、行列  $A$  の「選択したい固有値を持つ（広義）固有ベクトル成分」は選択的に通過させるが、その他の（広義）固有ベクトル成分は相対的に強く遮断するように構成する（後でレゾルベントの線形結合を用いたフィルタとその特性

を解析する).

そのフィルタに「一般的なベクトル」 $\mathbf{x}$ を通すと, 出力 $\mathbf{y}$ は「選択したい（広義）固有ベクトル成分」の線形結合で近似でき, それ以外の成分を含む割合は微小になる.

「選択したい固有値を持つ（広義）固有ベクトル」の全体が張る部分空間を $\mathcal{S}$ と置く. フィルタの出力 $\mathbf{y}$ は $\mathcal{S}$ の近くにある. ベクトルの組をうまく選んで, その線形結合でフィルタの出力が良く近似されるなら, そのベクトルの組で張られる部分空間 $\mathcal{S}'$ は $\mathcal{S}$ の近似になる. (十分多くのフィルタ出力の組 $Y$ を特異値分解(SVD)し, 相対閾値で特異値を切断した後に残った特異ベクトルを,  $\mathcal{S}'$ の基底として用いる.)

$\mathcal{S}$ は $A$ の不变部分空間なので,  $A$ と $\mathcal{S}$ の基底の組に非対称行列に対する Rayleigh-Ritz 法[5]を適用すれば,  $A$ の（広義）固有ベクトルで $\mathcal{S}$ を張るもののが全て得られる.  $\mathcal{S}$ の近似である $\mathcal{S}'$ の基底の組に適用すると, (広義) 固有ベクトルの近似が得られる.

## 2.1 諸注意

フィルタへの入力の組 $X$ の独立性が低いと出力の組 $Y$ の独立性も低くなるので $X$ は正規エルミート直交化しておく. 但し, 直交精度はそれほど必要ない.

フィルタ出力の組 $Y$ の各ベクトルのノルムがどれも極端に小さい場合には, 1) 「フィルタの通過域に $A$ の固有値がない」, 2) 「入力ベクトル $X$ に選択したい（広義）固有ベクトル成分が欠けていた」, のいずれかである. 場合 1 に対してはフィルタの特性(通過域など)を変えてみる. 場合 2 は $X$ に乱数ベクトルの組を用いる場合には, ほとんど生じない.

SVD で相対的な閾値で切断をする理由は, フィルタから出力に漏出した不要な固有成分を捨て, また丸め誤差の拡大を防いで計算の安定性を保つためである. SVD のかわりにベクトルのノルムでピボット選択をする Householder-QR 直交化も利用できる.

$Y$ のベクトルの個数 $m$ は, フィルタが選択し透過する（広義）固有ベクトルの個数 $r$ 以上となる必要があるが,  $r$ に対する事前の知識は仮定できない.  $Y$ の実効ランクは $r$ を越えないでの,  $Y$ は $m > r$ ならばランクが落ちるが,  $m \leq r$ で $m$ が不足もしくは一致する場合にはフルランクになる. 実際は $m$ は十分な余裕を持って $r$ より大きいことが望ましく,  $Y$ を SVD で分析する際に, ある程度の自由度が切断されなければ $m$ を増す必要がある.

フィルタが不用な（広義）固有ベクトル成分を明瞭に遮断し混入がない場合は,  $Y$ の特異値を大きい順に並べると, 急にある所で値が相対的に零になる.

遮断が不完全で混入がある場合は, 特異値の分布は明確な境界を持たずに徐々に減少する.  $\mathcal{S}'$ のランクは切断後に残った特異値の個数なので,  $\mathcal{S}$ のランクと比べると不用な（広義）固有成分の混入した数だけ増えている.

## 3 レゾルベントの線形結合によるフィルタ

本節では, 非対称行列 $A$ のレゾルベントの線形結合によるフィルタの構成と, フィルタ特性についての考察を行う.

### 3.1 準備

$N$ 次正方行列 $A$ の Jordan 標準形を $J$ とすると, 正則行列 $V$ が存在し  $AV = VJ$ となる（注：この $V$ や $J$ を構成する必要はない）. 行列 $V$ の各列 $\mathbf{v}^{(\mu)}$ ,  $\mu=1, 2, \dots, N$ は $A$ の（広義）固有ベクトルになる.

シフト量 $\rho$ の $A$ のレゾルベント $R(\rho) \equiv (A - \rho I)^{-1}$ も $R(\rho)V = V(J - \rho I)^{-1}$ を満たす. さらに線型性から,  $k$ 個のシフト量 $\rho_\ell$ を持つレゾルベントの線形結合 $\mathcal{F} \equiv \sum_{\ell=1}^k \omega_\ell R(\rho_\ell)$ についても同様に,  $F \equiv \sum_{\ell=1}^k \omega_\ell \cdot (J - \rho_\ell I)^{-1}$ と置くと,  $\mathcal{F}V = VF$ となるので,  $A$ と $\mathcal{F}$ の（広義）固有ベクトルの全体は一致する. 特に,  $V$ の各列は $A$ と $\mathcal{F}$ に共通の（広義）固有ベクトルになる.

いま $A$ の Jordan 標準形 $J$ の Jordan 細胞に沿ったブロック分割を $J = \bigoplus_\nu J_{p_\nu}(\lambda_\nu)$ とする. 但し,  $\nu$ は $J$ の Jordan 細胞に付けた番号で, サイズ $p$ で対角に $a$ が並ぶ Jordan 細胞を $J_p(a)$ と表した (Jordan 細胞は対角線の 1 つ上の要素を 1 とする). そのとき $J - \rho_\ell I$ の逆行列のブロック分割は $(J - \rho_\ell I)^{-1} = \bigoplus_\nu \{J_{p_\nu}(\lambda_\nu - \rho_\ell)\}^{-1}$ となる.

$J$ のサイズ $p$ で固有値 $\lambda$ を持つ Jordan 細胞に対応する位置にある $F$ のサイズ $p$ のブロック小行列は $F_p(\lambda) \equiv \sum_{\ell=1}^k \omega_\ell \{J_p(\lambda - \rho_\ell)\}^{-1}$ である.

いま $f(\lambda) \equiv \sum_{\ell=1}^k \frac{\omega_\ell}{\lambda - \rho_\ell}$ と置くと,  $p=1, 2, 3, 4$  の

$$\text{場合: } F_1(\lambda) = \begin{bmatrix} f(\lambda) \end{bmatrix}, \quad F_2(\lambda) = \begin{bmatrix} f(\lambda) & f'(\lambda) \\ 0 & f(\lambda) \end{bmatrix},$$

$$F_3(\lambda) = \begin{bmatrix} f(\lambda) & f'(\lambda) & \frac{f''(\lambda)}{2!} \\ 0 & f(\lambda) & f'(\lambda) \\ 0 & 0 & f(\lambda) \end{bmatrix},$$

$$F_4(\lambda) = \begin{bmatrix} f(\lambda) & f'(\lambda) & \frac{f''(\lambda)}{2!} & \frac{f'''(\lambda)}{3!} \\ 0 & f(\lambda) & f'(\lambda) & \frac{f''(\lambda)}{2!} \\ 0 & 0 & f(\lambda) & f'(\lambda) \\ 0 & 0 & 0 & f(\lambda) \end{bmatrix},$$

などとなる.  $F_p(\lambda)$ は上三角で, 対角から $q$ だけ上

の位置の要素は  $\frac{1}{q!} \left( \frac{d}{d\lambda} \right)^q f(\lambda)$  である.

### 3.2 フィルタ $\mathcal{F}$ の定義

簡単の為、以下では  $A$  の Jordan 標準形が対角の場合で説明する ( $A$  がより一般的な場合には、フィルタ  $\mathcal{F}$  のレゾルベントの線形結合による定義は全く同一のままであるが、透過特性がスカラー  $f(\lambda)$  から  $A$  の Jordan 形  $J$  の細胞に対応したサイズを持つ行列  $F_p(\lambda)$  に変わるなど、式数が少し複雑になるが、性質の議論の展開は概ね同様になる).

$A$  の固有対を  $(\lambda^{(\mu)}, \mathbf{v}^{(\mu)})$  とする。いま  $k$  個の「相異なる」シフト量  $\rho_i$ ,  $i=1, 2, \dots, k$  と、 $k$  個の係数  $\omega_i$ ,  $i=1, 2, \dots, k$  から定義される作用素  $\mathcal{F} \equiv \sum_{i=1}^k \omega_i R(\rho_i)$  と、関数  $f(\lambda) \equiv \sum_{i=1}^k \frac{\omega_i}{\lambda - \rho_i}$  を用いると、 $\mathcal{F} \mathbf{v}^{(\mu)} = \mathbf{v}^{(\mu)} f(\lambda^{(\mu)})$  で、 $\mathbf{v}^{(\mu)}$  は  $\mathcal{F}$  の固有ベクトルでもあり、 $\mathbf{v}^{(\mu)}$  に対応する  $\mathcal{F}$  の固有値は  $f(\lambda^{(\mu)})$  である。有理関数  $f(\lambda)$  を多項式の商で表すと、分母は  $k$  次で分子は分母より次数が小さい。分母はある定数  $c$  を用いて、 $\varphi(\lambda) \equiv c \prod_{i=1}^k (\lambda - \rho_i)$  と書ける。

### 3.3 フィルタ $\mathcal{F}$ の透過特性

行列  $A$  の固有値  $\lambda^{(\mu)}$  を持つ固有ベクトル  $\mathbf{v}^{(\mu)}$  は行列  $\mathcal{F}$  の固有ベクトルでもある。 $\mathcal{F}$  をフィルタと見るとときには固有ベクトル  $\mathbf{v}^{(\mu)}$  の成分はフィルタを通過するときに  $f(\lambda^{(\mu)})$  倍になるので、 $f(\lambda)$  は透過特性を一般式で表す関数である。 $A$  が固有値  $\lambda$  を持てば、その固有値に属する任意の固有ベクトルはフィルタ  $\mathcal{F}$  を通過するときに  $f(\lambda)$  倍になる。

有理関数  $f(\lambda)$  の分子は分母より低次で、遠方  $|\lambda| \rightarrow \infty$  では  $f(\lambda) = O(|\lambda|^{-(k-k')})$  のように減衰する。(さらに  $f(\lambda)$  の  $\ell$  階導関数は遠方での減衰の次数が  $\ell$  だけ増して  $O(|\lambda|^{-(k-k'+\ell)})$  になる。これは  $A$  が対角化不能の場合に関係する。)

遠方で  $f(\lambda)$  が最も早く減衰するのは、 $f(\lambda)$  を多項式の商として表したときの分子が定数の場合である。そこで以降では分子が 1 の場合、すなわち  $f(\lambda) \equiv 1/\varphi(\lambda)$  に限定する。そのとき、 $1/\varphi(z) = \sum_{i=1}^k \omega_i/(z - \rho_i)$  より、レゾルベントの線形結合の係数は  $\omega_i = 1/\varphi'(\rho_i)$  と決まるので、 $k$  個の相異なる分点の組  $\{\rho_i\}$  を指定すればフィルタ  $\mathcal{F}$  が(定数倍の自由度を除いて)決定される。

フィルタの作用で「領域  $\mathcal{D}$  から離れた固有値を持つ固有ベクトル」の成分をなるべく除去したい。そのためには  $|f(\lambda)|$  の値は領域  $\mathcal{D}$  内で小さく、外でなるべく小さくなるようにする。言い替えれば  $|\varphi(\lambda)|$  の値は領域  $\mathcal{D}$  内で大きくなく、外でなるべく大きくなるようにする。

「絶対値が領域  $\mathcal{D}$  内でだけなるべく小さい」性質を持つ多項式を  $\varphi(\lambda)$  に採用すれば良い。実区間の近傍での Chebyshev 多項式が典型的な例である。

#### 例 (Chebyshev 多項式によるフィルタ)

特性関数  $f(\lambda)$  の分母の多項式を  $\varphi(\lambda) = T_k(t)$  ( $k$  次 Chebyshev 多項式) にとる。但し、 $t = (2\lambda - \alpha - \beta)/(\beta - \alpha)$  は区間  $\mathcal{I} = [\alpha, \beta]$  に対する  $\lambda$  の相対座標で、区間の中心で 0、両端で  $\pm 1$  の値をとる。区間内  $|t| \leq 1$  のときは  $|f(\lambda)| \geq 1$  で、遠方  $|t| \gg 1$  のときは  $|f(\lambda)| \approx 2^{-(k-1)} |t|^{-k}$ 。この多項式の  $k$  個の零点の相対座標は  $\theta_\ell = (2\ell - 1)\pi/2k$  と置くと  $t_\ell = \cos \theta_\ell$ ,  $\ell = 1, 2, \dots, k$  で与えられる。

図 1 は複素平面上での Chebyshev 多項式による  $|f(\lambda)|$  の対数値の等高線グラフである。

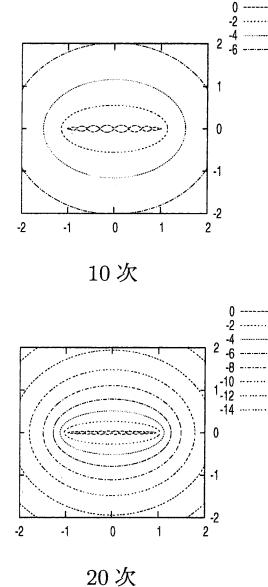


図 1: Chebyshev 多項式 :  $\log_{10} |f(\lambda)|$  の等高線 (相対座標)。

### 3.4 共鳴による数値計算上の困難

固有値と一致もしくは極めて近接する極を  $f(\lambda)$  が持つと、共鳴した固有成分だけが非常に大きく増幅されてフィルタの出力を占め、有限精度演算の丸め誤差で他の固有ベクトル成分の情報の精度が失われて部分空間  $S$  の近似の程度が劣化する。そこで領域  $\mathcal{D}$  内の固有値  $\lambda_i$  での  $|f(\lambda_i)|$  の最大最小の比(一種の条件数)を制限する必要がある。

Chebyshev 多項式を分母とするフィルタの透過特性  $f(\lambda)$  は、実の区間  $\mathcal{I} = [\alpha, \beta]$  の外で急減衰し、不

要な固有ベクトル成分の除去性能は良好だが、実区間内にある極が固有値と一致もしくは極端に近接して共鳴を起こすリスクがある。

### 3.5 共鳴を回避する方法

非対称な固有値問題は行列が実でも、固有値は一般には複素数である。実数の零点を持たない多項式を  $\varphi(\lambda)$  に採用すれば、実数の固有値との一致や近接による共鳴は回避できるが、複素数の固有値と共鳴を生じる可能性は残る。

以下、実数の零点を持たない多項式によるフィルタの例を二種類示す。

#### 例：円分多項式

多項式  $\varphi(\lambda) \equiv 1 + t^k$ 、但し  $k$  は偶数、 $t$  は実区間  $\mathcal{I} = [\alpha, \beta]$  に対する  $\lambda$  の相対座標で、区間上で  $1 \leq \varphi(\lambda) \leq 2$  となり、最大最小の比は 2 である。零点は複素平面上で区間を直径とする円周の  $k$  等分点である。零点の相対座標は  $t_\ell = \cos \theta_\ell + i \sin \theta_\ell$ ,  $\ell=1, 2, \dots, k$ 、但し  $\theta_\ell = (2\ell - 1)\pi/k$  と書ける。

図 2 は円分多項式による  $|f(\lambda)|$  の対数値の等高線グラフである。

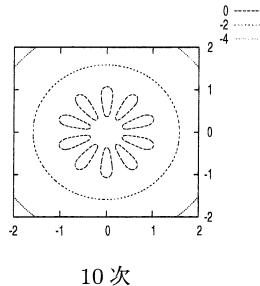


図 2: 円分多項式:  $\log_{10} |f(\lambda)|$  の等高線 (相対座標)。

#### 例：値シフト Chebyshev 多項式

多項式は  $\varphi(\lambda) \equiv (T_k(t) + 1 + 2\gamma)/(2\gamma)$ 、但し  $k$  は偶数で、 $\gamma > 0$ 。 $t$  は実区間  $\mathcal{I} = [\alpha, \beta]$  に対する  $\lambda$  の相対座標。

複素平面上で  $\varphi(\lambda)$  の零点は区間の両端を焦点とする楕円の周上にあり、その相対座標は  $t_\ell = \cosh \tau \cdot \cos \theta_\ell + i \sinh \tau \cdot \sin \theta_\ell$ ,  $\ell=1, 2, \dots, k$  と書ける。但し、 $\tau = (1/k) \operatorname{arccosh}(1 + 2\gamma)$ ,  $\theta_\ell = (2\ell - 1)\pi/k$ 。 $\gamma$  一定で  $k$  を増やしていくと楕円の短軸は  $k$  にほぼ反比例して減少し、楕円は  $t$  の実区間  $\mathcal{I}$  に漸近する。 $k$  一定で  $\gamma$  を増やすと、楕円の短軸は緩慢に伸びる。

図 3 は複素平面上での値シフト Chebyshev 多項式 ( $\gamma = 1$ ) の零点分布の例、図 4 はそれによる複素平面上での  $|f(\lambda)|$  の対数の等高線グラフである。

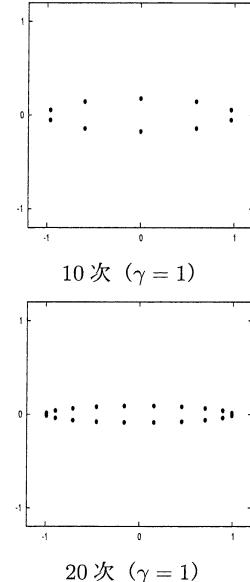


図 3: 値シフト Chebyshev 多項式の零点 (相対座標)。

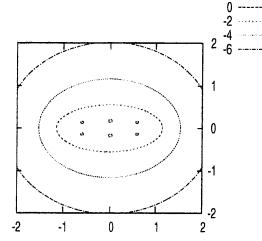
### 3.6 分点の配置について

固有値を求める複素領域を  $D$  とするときに、複素平面上での分点  $\rho_i$  の配置は、フィルタの特性関数  $|f(\lambda)|$  の値が、 $D$  内部では相対的に大きく、 $D$  外部では極めて小さくなるようにする。

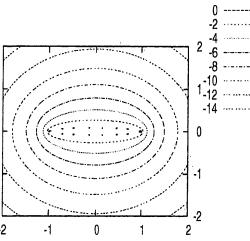
予め標準的な座標での領域に対する分点の組と結合係数  $\rho_i$ ,  $\omega_i$ ,  $i=1, 2, \dots, k$  を用意しておくと、適切な複素の線形座標変換  $\rho \rightarrow a\rho + b$ ,  $a, b \in \mathbb{C}$  により複素平面上で領域を（並行移動、拡大縮小、回転で）希望する位置、大きさ、向きに移して利用できる。この分点の一斉の線形変換に伴って結合係数  $\omega_i$  は、一斉に定数倍される。

### 3.7 共鳴の困難を回避する処方

固有値が実数に限定される対称な固有値問題とは異なり、非対称な問題では固有値は一般には複素数となるので、フィルタの特性関数  $f(\lambda)$  の極をうまく



10 次 ( $\gamma = 1$ )



20 次 ( $\gamma = 1$ )

図 4: 値シフト Chebyshev 多項式 :  $\log_{10} |f(\lambda)|$  の等高線 (相対座標) .

配置して事前に固有値と共鳴しないことを保証することは (なにか別の根拠がなければ) できず、共鳴か共鳴に近い状況を生じる可能性がある。

共鳴の回避は事前にはできないため、入力ベクトルにレゾルベントを作用させる段階でノルムの増幅率がある閾値を越えたシフト量の分点が共鳴または共鳴に近いと見なし、該当する分点が存在する時は、以下の簡単な処方を試みる。

- 該当の分点を除外してフィルタを再構成する。
- 該当の分点を動かしてフィルタを再構成する。

再構成後の  $|f(\lambda)|$  が遠方で最も早く減少するよう結合係数は決める。これらの方針について、以下で少し考察してみる。

### 3.7.1 分点を除外する場合

分点  $\rho_i$  の添字集合を  $\mathcal{G}$ 、除外する分点の添字集合を  $\mathcal{E}$  と書くと、除外後のフィルタの結合係数は除外前の係数  $\omega_i$  に修正因子  $\tau_i \equiv \prod_{j \in \mathcal{E}} (\rho_i - \rho_j)$  を乗じる形に書いて、 $\tilde{\omega}_i = \tau_i \omega_i$  となる。

フィルタ次数は除外された分点の個数だけ低下するので、分点は少し多めにとり、十分な次数が保たれるようにする必要がある。共鳴の程度を下げるために増幅率の閾値を過度に下げるとき、除外される個数が過剰となる可能性がある。

注記： 増幅率が大きいレゾルベントの分点は固

有値に近く、増幅されたベクトルも固有ベクトルに近い（閾値が低いと必ずしも近くないが）。分点で得た情報を単に除外せず利用する良い処方の構成は今後の検討課題である。

### 3.7.2 分点を移動させる場合

分点の一部を移動させる場合に、フィルタの結合係数の大部分を元の係数に修正を施す形で与える方法を述べる。全分点の添字集合を  $\mathcal{G}$ 、移動させる分点の添字集合を  $\mathcal{M}$  と書き、元の分点の座標を  $\rho_i$ 、移動後の分点を  $\tilde{\rho}_i$  と置くと、分点をいくつか移動した後の係数  $\tilde{\omega}_i$  は、元の係数  $\omega_i$  を用いて、

- $i \in \mathcal{G} - \mathcal{M}$  のとき、 $\tilde{\omega}_i = \omega_i / \prod_{j \in \mathcal{M}} \frac{\rho_i - \tilde{\rho}_j}{\rho_i - \rho_j}$ ,
- $i \in \mathcal{M}$  のとき、 $\tilde{\omega}_i = \prod_{j \in \mathcal{G} - \mathcal{M}} (\tilde{\rho}_i - \rho_j)^{-1} \times \prod_{j \in \mathcal{M} - \{i\}} (\tilde{\rho}_i - \tilde{\rho}_j)^{-1}$ 、となる。分点を移動させる方法は、レゾルベントの作用を並列に一斉処理する場合は特に、移動が発生すると、レゾルベントの作用の処理を追加する分だけ経過時間が延びる。移動させてもレゾルベントが閾値条件を再び満たさない可能性もある。

## 4 近似固有対の改良

「フィルタ対角化法」で、領域  $\mathcal{D}$  の近傍に固有値を持つ「欲しい固有対全て」の一様で良質な近似対が得られたら、それを初期値として Rayleigh 商シフト付きの逆反復法あるいは Rayleigh-Ritz 付きの同時逆反復法で近似対を改良する。固有値分布が良く分離している場合には逆反復法でも良いが、縮重もしくは近接のある場合には、逆反復法では収束が困難または収束しないので同時逆反復法を用いる [3, 4]。

## 5 数値実験

非対称行列  $A$  のレゾルベントの線形結合によるフィルタ対角化法を用いて、必要な領域に固有値を持つ  $A$  の近似固有対を複数求めて、次に Rayleigh 商シフト逆反復法を用いて改良した計算例を示す。

行列  $A$  は 200 次方程式  $p(z) = z^{200} + c_2 z^2 + c_1 z + c_0 = 0$ 、但し  $c_2 = -0.81078$ ,  $c_1 = -9.0617301$ ,  $c_0 = 10.53771414908$  のフロベニウス隨伴行列で、固有値が複素平面上で 1 の付近にある固有対を求める。

値シフト Chebyshev 多項式による次数 30,  $\gamma=1$ , 区間  $[0.8, 1.2]$  に対応したフィルタを用いた。200 次の複素ベクトルを乱数で 20 個生成し、正規エルミート直交化して初期ベクトルの組  $X$  を作った。フィルタ出力の組  $Y = \mathcal{F}X$  を特異値分解し、特異値の相対閾値  $10^{-5}$  で切断すると有効階数は  $r'=6$  であった。6 個の特異ベクトルの組の張る部分空間に Rayleigh-

Ritz の方法を適用して、フィルタ対角化の結果の近似固有対を得た。この 6 個の近似対は固有値が良く分離していたので、各近似対を Rayleigh 商シフト付きの逆反復法で改良を施した。その例を表 1 に示す。表中  $Q$  は近似固有ベクトルの Rayleigh 商、RES は 2-ノルムでベクトルを正規化した近似対の残差のノルムであり、反復 0 は逆反復法を適用前のフィルタ対角化の結果の固有対に対応する。

区間 [0.8,1.2] の“値ずらし型 Chebyshev”フィルタは、固有値の実部がこの区間にあってしかも虚部の絶対値が小さいとき、すなわち実軸に近いほど大きな透過率を持つ。そのことに対応して、乱数ベクトルを入力してフィルタ対角化法で求めた 6 個の近似固有対（逆反復法に対する初期固有対）は、固有値が実軸に近いほど精度が高いことが、表 1 の残差のノルムの値からわかる。

表 1: 逆反復法による近似固有対の改良。

反復	$Q$	RES
近似対 1		
0	(0.99737228169808, -0.07427221462634)	1.0E-03
1	(0.99750990459796, -0.07424092833867)	1.2E-06
2	(0.99750964074953, -0.07424067033468)	8.3E-12
近似対 2		
0	(0.99758663572427, 0.07422785353170)	4.3E-04
1	(0.99750970896572, 0.07424078545152)	3.5E-07
2	(0.99750964074733, 0.07424067033387)	9.8E-13
近似対 3		
0	(0.99811266256063, -0.04406704931349)	9.5E-06
1	(0.99811271253546, -0.04406587763153)	1.2E-10
2	(0.99811271257415, -0.04406587763941)	3.0E-16
近似対 4		
0	(0.99811144661415, 0.04406693534182)	1.2E-05
1	(0.99811271258096, 0.04406587763006)	1.7E-10
2	(0.99811271257415, 0.04406587763941)	2.3E-16
近似対 5		
0	(0.99813163464687, -0.01456568588516)	3.9E-08
1	(0.99813163796875, -0.01456568522496)	1.5E-15
2	(0.99813163796875, -0.01456568522496)	1.7E-16
近似対 6		
0	(0.99813162999610, 0.01456568769252)	4.8E-08
1	(0.99813163796875, 0.01456568522496)	4.3E-15
2	(0.99813163796875, 0.01456568522496)	3.5E-16

## 6 まとめ

非対称行列  $A$  の固有値問題で、指定した場所付近に固有値がある固有対を「フィルタ対角化法」で求める方法について考察した。フィルタ  $\mathcal{F}$  として  $A$  のレゾルベントの線形結合を用いると、 $A$  と  $\mathcal{F}$  は（広義）固有ベクトル全体を共有する。 $A$  が対角化可能な場合には固有ベクトル  $v_\mu$  のフィルタ  $\mathcal{F}$  による透過率（固有値）は  $v_\mu$  の固有値  $\lambda_\mu$  だけで決まる値  $f(\lambda_\mu)$  になる（対角化不能の場合は、固有値  $\lambda_\mu$  のサイズ  $p$  の Jordan 級胞に対応した  $p$  個の（広義）固有ベクトルの組に対する透過率が、 $p$  次の行列  $F_p(\lambda_\mu)$  になる）。但し、 $f(\lambda) = \sum_{\ell=1}^k \frac{\omega_\ell}{\lambda - \rho_\ell}$  はフィルタ  $\mathcal{F}$

の構成パラメタであるレゾルベントのシフト量  $\rho_\ell$  と結合係数  $\omega_\ell$  から決まる  $\lambda$  の有理関数。そこでパラメタをうまく選び、フィルタの透過特性  $f(\lambda)$  が、欲しい固有値を持つ「必要な固有成分」は選択的に透過させるがそれ以外の不要な成分を強く遮断するようになる。（フィルタを構成するレゾルベントの分点  $\rho_\ell$  に固有値と一致もしくは近接したものがあると、共鳴した固有ベクトル成分がフィルタ出力を占めて、他の成分の情報が丸め誤差で覆い隠され失われるので、そのような状況を検知したら不都合な分点をずらしてとり直すかまたは捨てて、フィルタを再構成し困難を回避する。）そのように決定したフィルタ  $\mathcal{F}$  に一般的なベクトルを通して、その出力は遮断特性的不完全性から「不要な固有成分」も弱く含む（演算誤差も含む）が、近似的に「必要な固有ベクトル」の線形結合になる。フィルタの出力を十分多く集めて特異値分解し、特異値を相対閾値で切断した後に残った特異ベクトルが張る部分空間  $S'$  は、「必要な固有成分」が張る不变部分空間  $S$  を近似する。非対称な行列に対する Rayleigh-Ritz 法を  $S'$  に適用すると、固有値がフィルタの通過領域の近傍にある固有対の近似が得られる。以上の「フィルタ対角化法」で得られた近似対の改良には、通常の Rayleigh 商逆反復法や Rayleigh-Ritz 付き同時逆反復法などが利用できる。

プログラムを書き簡単な例題に適用し、方法が実際に働くことを幾つかの場合に確かめた。

## 参考文献

- [1] Golub, G. H. and van Loan, C. F.: Matrix Computations, 3rd Ed., *The Johns Hopkins Univ. Press* (1983).
- [2] 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ティングシステム, Vol.49,SIG2(ACS 21),pp.66-87(2008).
- [3] 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).
- [4] 小国力 編, 村田 健郎, 三好 俊郎, ドンガラ J.J., 長谷川 秀彦 共著: 「行列計算ソフトウェア」, 丸善 (1991).
- [5] Zhongxiao Jia and G. W. Stewart: An Analysis of the Rayleigh-Ritz Method for Approximating Eigenspaces, *Math. Comp.*, Vol.70, No.234, pp.637-647 (2000).