2P17　行列の一般固有値問題の数値解法 – 係数が微小に変化する問題の解法の考察 –

○ 村上 弘

首都大学東京 数理科学コース (〒192-0397 八王子市南大沢 1-1)

SCF では線形化による行列の一般固有値問題を反復により解いて自己無撞着にする。収束に近づけば係数行列の変化はしだいに小さくなる。そこで係数行列が微小に変化した一般固有値問題に対しての効率良い解法を考察したい。

N 次の対称行列 A,B(B は正定値) を係数とする (対称定値な) 一般固有値問題 $Ax^{(i)} = \lambda^{(i)}Bx^{(i)}$ の下側から m 個の固有対 $(\lambda^{(i)}, x^{(i)})$ が必要である。(占有軌道数 m は基底関数の個数 N の通常数分の一程度である。)

対称定値の一般固有値問題 $Ax = \lambda Bx$ の通常の解法はコレスキ分解 $B = LL^T$ を用いて $G = L^{-1}AL^{-T}, y = L^Tx$ により対称固有値問題 $Gy = \lambda y$ に帰着される。対称固有値問題はハウスホルダ三重対角化 $T = QGQ^T, z = Qy$ により対称三重対角行列 T の固有値問題 $Tz = \lambda z$ に帰着される。

T の固有値問題解法には二分探索法+逆反復法、QR 反復法, 分割統治法などがある。通常は固有対の必要な個数 m が N の数分の一程度で比較的多いことと、固有ベクトルの正規直交性の精度保証の容易性から二分探索法+逆反復法よりも QR 反復法が有利とされて来たが、最近は計算量や並列性の点から分割統治法 [2] が有望視されている。(QR 反復法では、シフト付き加速法を用いるが、前回の SCF 反復で用いられた時の固有値の値を参考として次回のシフト量に用いれば QR 反復の回数がある程度減ると期待でき、毎回完全に独立として行なうよりも有利にできるように思われる。分割統治法でも前回の SCF 反復で用いた時の各分割ステージでの固有値を今回の初期値として用いるなどにより加速できる可能性がある。以下ではヤコビ法を用いて係数行列の微小な変化を繰り込む方法を検討する。)

SCF 方程式の係数行列の変化が微小である場合の固有対の変化を考察する。B が変化するのは基底函数 (例えば原子位置や基底形状) が変化する場合である。

- まず反復で B が不変な場合を考える。まず、コレスキ分解は変化しない。

  A が $A' = A + \delta A$ へと微小に変化したとすると、対称な標準固有値問題の係数行列は $G = L^{-1}AL^{-T}$ から $G' = L^{-1}(A + \delta A)L^{-T} = G + L^{-1}\delta A\, L^{-T}$ へと変化する。

  G が直交行列 U により対角化されて $\Lambda = U^TGU$ とするとき、$S = U^TG'U$ は $\Lambda + U^TL^{-1}\delta A\, L^{-T}U$ だから非対角成分の弱い対称行列なので、ヤコビ法を用いれば比較的速くしかも精度良く $\Lambda' = V^TSV$ と対角化できる [2]。すると $\Lambda' = V^TU^TG'UV = (UV)^TG'(UV)$ だから、G' の固有値の行列は Λ', 固有ベクトルの行列は $U' = UV$ に

なる。ヤコビ回転の操作をUに累積すれば、U'はUの場所に重ね書き出来、Vの場所は不要である。

- 次に反復でBが微小に変化する場合を考える。一般固有値問題$Ax^{(i)} = Bx^{(i)}\lambda^{(i)}$を、一般固有ベクトルに対して正定値行列$B$についての規格直交化を課して全て解いたとする。そのときUをN個の一般固有ベクトルを並べた行列、Λを一般固有値を並べた行列とすると、$U^T AU = \Lambda$,$U^T BU = I$となる。

  反復でAが$A' = A + \delta A$に、Bが$B' = B + \delta B$に微小に変化したとする。係数A', B'の一般固有値問題$A'x'^{(i)} = B'x'^{(i)}\lambda'^{(i)}$あるいは、$A'U' = B'U'\Lambda'$は、$U' = UV$と置くと、$U^T A'UV = U^T B'UV\Lambda'$より、$(\Lambda + U^T \delta A\, U)V = (I + U^T \delta B\, U)V\Lambda'$となる。$S = \Lambda + U^T \delta A\, U$, $J = I + U^T \delta B\, U$は非対角成分の弱い対称行列 (Jは正定値) であるから、一般固有値問題$SV = JV\Lambda'$は [1] に記述されている一般化ヤコビ法を用いれば比較的速くしかも精度良く解けるように思われる。

  VとΛ'を得たら、A', B'を係数とする一般固有値問題の一般固有値の行列はΛ'で、対応する一般固有ベクトルの行列は$U' = UV$となる。一般化ヤコビ回転の操作をUに累積すれば、U'はUの場所に重ね書きでき、Vの場所は不要である。

上記のヤコビ法を用いて係数の微小な変化を繰り込む方法で特に損な点は、通常は固有ベクトルN個のうち下からのm個だけが必要であるのに、全てを必要とする定式化になっていることである。mの値は普通Nの数分の一程度と少ないので、記憶領域や演算の量が無駄である傾向がある。また特にN次の行列の積の回数が多いのも演算量的に損となるであろう。しかし行列積は演算の局所性が高く並列性も容易に引き出し易いことや、ヤコビ回転についても並列ヤコビ法 [2] がよく知られている他、ブロックヤコビ法 [2] と組み合わせると演算の局所性も高くとれるので欠点を緩和できて有利となる可能性がある。

直接標準固有値問題を毎回前回の情報を用いないで解く方法としては、「ブロックハウスホルダ変換」+「帯行列あるいはブロック三重対角行列に対する分割統治法」[3, 4] の組合せがうまく実装できれば速いように思われる。

参 考 文 献

[1] 戸川隼人:「有限要素法による振動解析」,§4.3 一般化ヤコビ法, サイエンス社,1975.

[2] Golub G.H. and Van Loan C.F.: *Matrix Computations*, 3rd Ed., The Johns Hopkins Univ. Press, Baltimore, Maryland, (1996).

[3] Wilfried N. Gansterer, Robert C. Ward. and Richard P. Muller, ‘An extension of the divide-and-conquer method for a class of symmetric block-tridiagonal eigenproblems’, ACM Transactions on Mathematical Software (TOMS), Vol.28, Issue 1, pp.45-58, March, 2002.

[4] Wilfried N. Gansterer, Yihua Bai, M. Day and Robert C. Ward., ‘A Framework for Approximating Eigenpairs in Electronic Structure Computations’, Computing in Science & Engineering, pp.50-59, Sep/Oct issue (2004).