2P08

大規模な一般固有値問題のフィルタ対角化法による解法について

○ 村上 弘

首都大学東京・数理情報科学専攻（〒 192-0397 八王子市南大沢 1-1）

要約: 対称定値一般固有値問題 $A\mathbf{v} = \lambda B\mathbf{v}$ の，指定された実区間 $I = [\alpha, \beta]$ に固有値が含まれる全ての固有対を求めることにする．解法には部分空間内での対角化であるサブスペース法（subspace method）に基づくフィルタ対角化法（filter diagonalization method）を用いることにする（フィルタ対角化法の例：[1]）．「フィルタ」は，固有値が I に含まれる固有ベクトルの成分は通過できるがそれ以外は（近似的に）遮断されるように構成された線形作用素である．特に，レゾルベントの線形和の形式で構成されたフィルタを用いることにする [2, 3, 4].（レゾルベントの線形和の作用素は既に [5] に於いて現れている.）

固有値が I に含まれる全ての固有ベクトルで張られた部分空間を $\mathcal{S}$ とするとき，任意の入力ベクトルにフィルタ作用素を適用すると，$\mathcal{S}$ に近似的に含まれる出力ベクトルが得られる．そのような出力ベクトルを十分に多く集め，特異値分解を用いて分析して適切な線形結合を構成すると，部分空間 $\mathcal{S}$ を近似する $\mathcal{S}'$ の基底ベクトルの組が得られる．この基底で表現された $\mathcal{S}'$ にサブスペース法を適用すれば，固有値が I に含まれる全ての固有対に対する近似解が求まる．

レゾルベントの線形和の形式のフィルタは透過帯域や鋭い遮断特性のものを容易に構成できるが，レゾルベントの作用の実現には ρ を複素数として行列 $A - \rho B$ を係数とする連立一次方程式を解く必要がある．行列 A,B が帯幅の狭い行列のときは帯 LU-分解により連立一次方程式は容易に解けて困難は少ない [4]．行列 A,B が帯幅の狭い行列とならなくても，理工学の大規模問題では（相互作用が近接力で，空間分割型の離散近似や近似展開の基底系が局所的台を持つ場合などでは）多くの場合に非零要素の割合が極めて少ない疎行列になる．記憶量や計算量などの面から連立一次方程式を LU-分解で解くのが困難な場合には疎行列性を利用し，何らかの反復的方法で解くことになる（例：[6]）．

そこでフィルタとしての構造や性質をうまく利用し，フィルタの作用を能率良く実現する手法を模索する．

参 考 文 献

[1] Toledo S. and Rabani E.: "Very Large Electronic Structure Calculations Using an Out-of-Core Filter-Diagonalization Method", J. Comput. Physics, **v180** (2002), pp.256–269.

[2] 村上 弘: "対称定値一般固有値問題のフィルタ部分空間法による固有対の近似解法", 日本コンピュータ化学会 2007 年春季年会講演予稿集 (2007 年 5 月),2**O**06.

[3] 村上 弘: "シフトつき逆を組み合わせたフィルタによる固有値問題解法", 第 36 回数値解析シンポジウム NAS2007 講演予稿集 (2007 年 6 月), pp.85–88.

[4] 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, (2007 年 6 月), pp.31–36.

[5] Sakurai T. and Sugiura H.: "A Projection Method for Generalized Eigenvalue Problems Using Numerical Integration", J. Comput. Appl. Math., **v159** (2003), pp.119–128.

[6] 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 (2006 年 6 月), pp.61–64.