2006

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

○ 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, 区間 $I = [\alpha, \beta]$ に固有値を持つ (以降で「区間 I に対応する」と呼ぶ) 固有対を全て求める. 解法として部分空間法 (subspace method) に基づく「フィルタ対角化法 [1]」を用いる. レゾルベントのスペクトル表示を利用し, 区間 I に対応する固有ベクトル成分を透過, それ以外を減衰させる作用素を導出し, フィルタとして用いる. フィルタを適用したベクトルを集めて, 区間 I に対応する固有ベクトル成分で張られた部分空間を構成し, 部分空間法を適用して近似固有対を求める.

問題: 行列 A, B が実対称で,B は正定値とする. 実対称定値一般固有値問題 $A\mathbf{v} = \lambda B\mathbf{v}$ の実区間 $I = [\alpha, \beta]$ に対応した固有対を全て求めるものとする.

フィルタ対角化法 [1] の原理: 区間 I に対応した全ての固有ベクトルが張る部分空間を S とする. S の次元は I に対応した固有対の個数 r に等しい. S に部分空間法を適用すると区間 I に対応した固有対が全て得られることから, 問題は部分空間 S の具体的な構成に帰着する.

いま $\hat{\mathcal{F}}$ を区間 I に対応する固有ベクトル成分は通過させるがそうでない固有ベクトル成分は通過させない理想的なフィルタ特性の線形作用素だとする. そのとき任意のベクトルに $\hat{\mathcal{F}}$ を作用させると S に入る. (作用素 $\hat{\mathcal{F}}$ は S への射影である.)

一般的なベクトル $\mathbf{x}^{(i)}$ をフィルタに通過させた出力のベクトル $\mathbf{y}^{(i)}{=}\hat{\mathcal{F}}\mathbf{x}^{(i)}$ を十分に多く集めると，それらにより空間 S を張ることができる. フィルタを通過させた m 個のベクトル $\mathbf{y}^{(i)}, i{=}1, 2, \ldots, m$ が階数 r に到達して S を張るとき, それらの適切な線形結合により部分空間 S の r 個の基底 $w^{(j)}, j{=}1, 2, \ldots, r$ が構成できる. 部分空間法を基底で表現された S に適用すれば, 求める固有対が得られる.

実際には, 精度有限の数値計算による誤差が入り, 階数や線形独立性などが曖昧になる以外にも, 現実のフィルタでは区間 I に対応しない固有ベクトル成分の遮断は完全ではなく近似的なものであることからも誤差が入る. そこで空間に行列 B による計量を入れて閾値による切断で算法の安定化を行なう. 一般には m は r よりもある程度大にとらねばならず, 特に初期ベクトル $\mathbf{x}^{(i)}$ が乱数由来の場合には, m を大きくとることで統計的に部分空間の近似向上が期待できる. フィルタの遮断特性の不完全性により混入した固有ベクトルの影響で, $\mathbf{y}^{(i)}, i{=}1, 2, \ldots, m$ から B-正規直交基底を (統計学の主成分分析に倣った方法で) 構成すると, その個数 r' は本来の個数 r よりも大きくなり, r' 個の基底で張られた部分空間 S' も $S{\subset}S'$ を近似的には満たすが少しずれたものになる.

フィルタ $\mathcal{F}$ の構成: いま μ 番目の固有対を $(\lambda_\mu, \mathbf{v}_\mu)$ とし, 固有ベクトル $\mathbf{v}_\mu$ は B-正規直交とするとき, レゾルベントのスペクトル表示 $(A - \rho B)^{-1} = \sum_\mu \frac{\mathbf{v}_\mu \mathbf{v}_\mu^T}{\lambda_\mu - \rho}$ が成り立つ. 二個のレゾルベントの間に B を挟んだ積のスペクトル表示は $(A - \rho_i B)^{-1} B\, (A - \rho_j B)^{-1} = \sum_\mu \frac{\mathbf{v}_\mu \mathbf{v}_\mu^T}{(\lambda_\mu - \rho_i)(\lambda_\mu - \rho_j)}$. 任意個のレゾルベントの間に B を挟んだ積のスペクトル表示も同様となる. いまフィルタ作用素 $\mathcal{F}$ を係数 $c_k{}^{-1}$ と $(A - \rho_i B)^{-1} B, i = 1, 2, \ldots, k$ の積と定義する: $\mathcal{F} \equiv c_k{}^{-1} \prod_{i=1}^{k} \left\{(A - \rho_i B)^{-1} B\right\} = \frac{1}{c_k} \sum_\mu \frac{\mathbf{v}_\mu \mathbf{v}_\mu^T}{\prod_{i=1}^{k}(\lambda_\mu - \rho_i)} B = \sum_\mu \frac{\mathbf{v}_\mu \mathbf{v}_\mu^T}{\varphi_k(\lambda_\mu)} B$. 但し $\varphi_k(\lambda) = c_k \prod_{i=1}^{k}(\lambda - \rho_i)$. 更に多項式 $\varphi_k(\lambda) = c_k \prod_{i=1}^{k}(\lambda - \rho_i)$ の零点に重複が無いとき, 恒等式 $1/\varphi_k(z) = \sum_{i=1}^{k} \frac{\gamma_i}{z - \rho_i}$, 但し $\gamma_i = 1/\varphi'_k(\rho_i)$ を用いると, $\sum_\mu \frac{\mathbf{v}_\mu \mathbf{v}_\mu^T}{\varphi_k(\lambda_\mu)} = \sum_\mu \sum_{i=1}^{k} \frac{\gamma_i}{\lambda_\mu - \rho_i} \mathbf{v}_\mu \mathbf{v}_\mu^T = \sum_{i=1}^{k} \gamma_i \sum_\mu \frac{\mathbf{v}_\mu \mathbf{v}_\mu^T}{\lambda_\mu - \rho_i} = \sum_{i=1}^{k} \gamma_i \, (A - \rho_i B)^{-1}$. よって $\mathcal{F}$ の別の表式 $\mathcal{F} = \sum_{i=1}^{k} \gamma_i \, (A - \rho_i B)^{-1} B$ が得られる. この形は複素円周積分の台形積分近似で導かれた「櫻井と杉原の射影演算子 [2]」に既に現れている.

注意: 本方法は係数 $A-\rho_iB$ を持つ連立一次方程式が高速に解けないと実用上の価値が無い.

フィルタ $\mathcal{F}$ の透過率: ベクトル $\mathbf{x}$ に $\mathcal{F}$ を作用させたものがベクトル $\mathbf{y}$ であるとき, $\mathbf{x}$ と $\mathbf{y}$ の固有ベクトルの組 $\{\mathbf{v}_\mu\}$ による展開を, $\mathbf{x}=\sum_\mu \alpha_\mu \mathbf{v}_\mu$, $\mathbf{y}=\sum_\mu \beta_\mu \mathbf{v}_\mu$ とすると, 係数間には関係 $\beta_\mu=\alpha_\mu/\varphi_k(\lambda_\mu)$ が成立する. $G(\lambda)=1/\varphi_k(\lambda)$ を定義すると, 固有ベクトル $\mathbf{v}_\mu$ のフィルタ $\mathcal{F}$ による「透過率」は, $G(\lambda_\mu)$ により与えられる. いま区間内 $\lambda\in I$ での $|\varphi_k(\lambda)|$ の最大値を M と置くとき, $\lambda\in I$ のとき $|G(\lambda)|\geq 1/M$, $\lambda\notin I$ のとき $|t|\gg 1$ で $G(\lambda)=O(t^{-k})$ となる. 但し $t=\frac{\lambda-(\alpha+\beta)/2}{(\beta-\alpha)/2}$ は λ の I に対する相対座標で, 区間の中心で 0, 両端で ± 1 の値をとる. 固有値 λ が区間 I から離れた固有ベクトル成分は, 漸近的に固有値 λ の区間 I との相対座標 t の k 乗に反比例する減衰を受ける.

共鳴の問題: 多項式 $\varphi_k(\lambda)$ の零点が固有値のどれかに極端な近接もしくは一致する (共鳴) とき, フィルタ $\mathcal{F}$ の出力ベクトル $\mathbf{y}$ 中の共鳴する固有ベクトルの大きな成分により他の非共鳴な固有ベクトル成分が覆われて線形独立性が悪化し, 有限精度計算では丸め誤差により精度が失われ, 得られる「部分空間」の近似が悪くなる. そこで $|G(\lambda)|$ が区間外で小さいだけではなく, 区間内での最大最小の比 (一種の条件数) をも小さく抑える必要がある. 今の問題では固有値は全て実数だから, 多項式 $\varphi_k(\lambda)$ として実数の零点を持たないものを選ぶと共鳴の問題を予め回避できる. そのとき $\varphi_k(\lambda)$ が実多項式ならば零点は複素共役対 $k/2$ 組で, フィルタの作用は対称性を利用して $\mathcal{F}\mathbf{x}=\sum_{i=1}^{k}\gamma_i(A-\rho_iB)^{-1}B\mathbf{x}=\sum_{\mathrm{Im}\,\rho_i>0}2\mathrm{Re}\,\{\gamma_i\,(A-\rho_iB)^{-1}B\mathbf{x}\}$ により計算できる.

櫻井と杉浦型の多項式: 次数 k を偶数として多項式を $\varphi_k(\lambda)=1+t^k$ にとると, これは実の零点を持たない. 但し t は λ の I に対する相対座標. この多項式の零点は複素円周上の等分点である. 零点の相対座標を $t_\ell=x_\ell+\mathrm{i}y_\ell$ とすると, $x_\ell=\cos\theta_\ell$, $y_\ell=\sin\theta_\ell$ で $\theta_\ell=(2\ell-1)\pi/k$, $\ell{=}1,2,\ldots,k$. 虚部が正の零点は $\ell{=}1,2,\ldots,k/2$ に対応する. $G(\lambda)=1/\varphi_k(\lambda)$ の値は, 区間の中央で 1, 区間の両端で 1/2, 区間の外では漸近的に $|t|\gg 1$ のとき $G(\lambda)=O(t^{-k})$.

値をずらした Chebyshev 多項式: 次数 k を偶数,$\gamma>0$ とし, 多項式を $\varphi_k(\lambda)=\frac{1}{2\gamma}(T_k(t)+1+2\gamma)$ にとる. 但し $T_k(t)$ は k 次の Chebyshev 多項式. 全零点は複素平面上の区間 I の両端を焦点とする楕円の周上にあり, 零点の相対座標を $t_\ell=x_\ell+\mathrm{i}y_\ell$,$\ell{=}1,2,\ldots,k$ とすると, $x_\ell=\cosh\tau\cdot\cos\theta_\ell$, $y_\ell=\sinh\tau\cdot\sin\theta_\ell$. 但し $\tau{=}(1/k)\cosh^{-1}(1+2\gamma)$, $\theta_\ell{=}(2\ell-1)\pi/k$. 虚部が正の零点は $\ell{=}1,2,\ldots,k/2$ に対応する. 区間 I の中で $|\varphi_k(\lambda)|$ の最大最小の比 (条件数) は $1+\gamma^{-1}$ で, $G(\lambda)$ の区間内の振幅の大きさは γ に反比例するが, 区間外の漏出の強さは γ に比例. 今のフィルタの用途には区間内では最大最小の比が適度に小さければ十分で, むしろ区間外の漏出の強さを小さく抑えるのが良い. 例えば $\gamma=1$ にとる.

フィルタの透過率をグラフを描いて比較すると, 多項式 $\varphi_k(\lambda)$ として「値をずらした Chebyshev 多項式」を用いる場合の方が「複素円周上の等分点を零点とする多項式」を用いる場合に比べて, 次数 k が同じ場合に区間外での漏出が小さい. (但し,$(A-\rho_iB)^{-1}$ の作用を連立一次方程式を解いて実現するのに, LU-分解のような直接法ではなく反復法を用いる場合 [3] には, 反復の収束性が ρ_i と固有値の分布に依存するので, フィルタの特性の比較だけで優劣を議論することは妥当でない.)

実験例: 行列 A,B を行列の次数に比べて帯幅の狭い帯行列にとり, フィルタの作用の計算には帯 LU-分解を利用する. フィルタ対角化法により得た近似固有対の改良は, (固有値に縮重や極端な近接がなければ) 通常の逆反復法が利用できる. 実験例の詳細や具体的な結果は会場で紹介する.

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

[3] 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.