2O07　フィルタ対角化における櫻井・杉浦法と村上法の関連について

○池上 努
産総研

行列の固有値問題を解く際、固有値スペクトルの一部の領域に局限して固有値・固有ベクトルを求める手法を、フィルタ対角化と呼ぶ。フィルタ対角化では、漸化式を用いて多項式型のフィルタ関数を作用させる手法 [1] が一般的であるが、近年、新たなフィルタ対角化の手法が提案された [2, 3]。本稿では、Cauchy の積分定理に基く櫻井・杉浦法 [2] と、村上による逆冪型のフィルタ関数 [3] の関連について論じる。

櫻井・杉浦法では、一般固有値問題

$$Ax = \lambda Bx \tag{1}$$

を関数

$$f(z) = v^T(zB - A)^{-1}Bv \tag{2}$$

の特異値探索問題に置き換える。ここで v は任意の非零ベクトルである。Caucy 積分

$$\frac{1}{2\pi i}\int_\Gamma g(z)f(z)dz = 0 \tag{3}$$

を恒等式として満たす多項式 g(z) を求めると、$g(z) = 0$ の解は閉路 Γ 内の固有値 λ に一致する。一方、関数

$$W(\lambda) = \frac{1}{2\pi i}\int_\Gamma \frac{1}{z-\lambda}dz \tag{4}$$

は閉路 Γ に関して窓関数になることに着目すると、櫻井・杉浦法は $W(\lambda)$ を暗黙のフィルタ関数として用いていると考えられる。

櫻井・杉浦法の具体的な計算では、Γ として γ を中心とした半径 ρ の円周をとり、経路積分を台形公式で近似して

$$s_j = \frac{1}{N}\sum_{k=1}^{n}(z_k - \gamma)^{j+1}(z_kB - A)^{-1}Bv, \qquad j = 0, 1, 2, \ldots, \tag{5}$$

$$z_k = \rho e^{i\frac{2\pi}{N}(k-\frac{1}{2})} + \gamma \tag{6}$$

を求め、$\{s_j\}$ よりフィルター部分空間を作成する [4]。ここで式 (5) は村上型フィルター関数と同じ逆冪型の構造を有する。櫻井・杉浦法では、j を振ることで種々のフィルター関数を v に作用させ、部分空間を生成する。一方、j を固定し、複数の v に対し式 (5) を評価して部分空間を生成すれば、従来のフィルター対角化と同等の手法になる。

発表では具体的なフィルタ関数の形状や、並列化に向けた工夫について述べる。

[1] R. Chen and H. Guo, J. Chem. Phys. **105**, 1311 (1996).

[2] T. Sakurai and H. Sugiura, J. Comput. Appl. Math. bf 159, 119 (2003).

[3] 村上 弘, HPCS2007 (つくば)

[4] T. Sakurai and H. Tadano, private communication.