固有値問題の近似対のフィルタの反復適用による改良
Improvement of Approximate Pairs of Eigenproblem by Iterative Applications of a Filter

村上 弘*
Hiroshi Murakami
首都大学東京 数理科学専攻
Department of Mathematical Sciences, Tokyo Metropolitan University

要 約
実対称定値一般固有値問題の固有値が指定区間にある固有対の近似をうまく調整されたフィルタを利用して求める．フィルタを 2〜3 回繰り返し適用して残差を減らして近似対を改良することを試みる．

Abstract
For a real symmetric-definite generalized eigenproblem we approximately solve those pairs whose eigenvalues are in a specified interval by using a well-tuned filter. In order to improve those approximate eigenpairs we try to apply the filter iteratively 2 to 3 times to reduce their residuals.

1 はじめに

フィルタ対角化法を用いて実対称定値一般固有値問題 $A\mathbf{v} = \lambda B\mathbf{v}$ の固有値が指定区間にある固有対 $(\lambda, \mathbf{v})$ の近似を求める．フィルタはレゾルベント $\mathcal{R}(\rho) \equiv (A - \rho B)^{-1}B$ を用いて構成する．フィルタ $\mathcal{F}$ の構成として以下の種類のものが挙げられる．

- シフト ρ_j が複素数のレゾルベントの線形結合の実部であるもの [5, 7]：$\mathcal{F} \equiv c_\infty I + \mathrm{Re} \sum_{j=1}^{n} c_j \mathcal{R}(\rho_j)$.
- シフト ρ が実数の単一のレゾルベントの実多項式 P であるもの [9]：$\mathcal{F} \equiv P(\mathcal{R}(\rho))$.
- シフト ρ' が虚数の単一のレゾルベントの虚部の実多項式 P であるもの [9]：$\mathcal{F} \equiv P(\mathrm{Im}\mathcal{R}(\rho'))$.
- 混合型（「レゾルベントの線形結合の実部」の実多項式）[8].

ベクトル $\mathbf{x}$ へのレゾルベント $\mathcal{R}(\rho)$ の作用 $\mathbf{y} \leftarrow \mathcal{R}(\rho)\,\mathbf{x}$ は，係数がシフト行列 $C(\rho) \equiv A - \rho B$ である連立 1 次方程式 $C(\rho)\,\mathbf{y} = B\,\mathbf{x}$ を解いて実現する．それがフィルタを作用させる計算の主要部になる．

大規模な連立 1 次方程式を直接法で解く場合の制約要因は行列分解の演算量と，特に分解結果を保持するための記憶容量である．レゾルベントの数が最も少ないフィルタの構成法は単一のレゾルベントだけを用いるものである．しかしそのようなフィルタは，レゾルベントのシフト量や多項式を調整しても，あまり良い伝達特性は得られない（急峻な遮断特性や通過域での伝達率の均一性の実現が困難である）.

*mrkmhrsh@tmu.ac.jp

レゾルベントの数を増して 2〜4 にすればかなり特性を改善できるが，分解の演算量と分解結果を保持する記憶量が数に比例して増える．そこで特性のあまり良くないフィルタを用いて，その 2〜4 回の反復により近似対を改良することを試みる（同一のフィルタを反復する場合には行列分解を再利用できる）．

単純にフィルタを反復すると「必要な固有ベクトル」相互の伝達率の不均一さが反復に伴って 2 乗，3 乗とべきで拡大し，伝達率が相対的に小さい固有ベクトルの精度は減少または消失してしまう．そこでこの不均一さの拡大による影響を抑制するために，毎回のフィルタを適用する前に正規直交化を行なうことにする．これは構造解析に於いて用いられている「（直交化付き）同時逆反復法」[1, 2, 4] と同様である（その原理は「直交化（同時）反復法」[3] である).

そこで「正規直交化を施してからフィルタを適用する」操作を 2〜4 回反復することにより改良された近似対を得る方法について実験する．正規直交化には，計量 B の特異値分解（B-SVD）を用いた（これは Löwdin(レフディン）の直交化と実質的に同じものである）．

注意すべきこととして，フィルタの適用はベクトルの組を任意に分けて並列にできるが，正規直交化は組内のベクトルがすべて揃わないと開始できず，同期を要するので並列分散処理向けには不便になること，正規直交化はベクトルの組に対する線形の作用ではないので途中で正規直交化を行うとフィルタが線形の作用素でも処理全体の作用は線形ではないことが挙げられる．

2 実験に用いたフィルタ

用いるフィルタは単一のレゾルベントの多項式型とする．レゾルベントの数が最も少ないが伝達特性はあまり良くできない．求める固有値の区間 $[a, b]$ が固有値分布の下端の場合にはシフト ρ を実数に選ぶことができて，その場合のフィルタは式 (1) の形になる．

$$\mathcal{F} \equiv g_s \, T_n(\, 2\gamma \, \mathcal{R}(\rho) - I \,) \, . \tag{1}$$

シフト ρ' を虚数に選ぶと，区間 $[a, b]$ は任意の位置にとれて，その場合のフィルタは式 (2) の形になる．

$$\mathcal{F} \equiv g_s \, T_n(\, 2\gamma' \, \mathrm{Im} \, \mathcal{R}(\rho') - I \,) \, . \tag{2}$$

ここで $T_n(x)$ は n 次の Chebyshev 多項式を，I は恒等作用素を表す．Im は虚部をとり出す作用素であり，γ や γ' は実数の定数である．g_s は伝達関数の大きさの阻止域での上限である．

2.1 フィルタの設計

今回はフィルタをパラメタの 3 つ組（n，μ，g_s）で指定した（それ以外に（μ，g_s，g_p）で指定することも可能である）．n は Chebyshev 多項式の次数，μ は遷移域と阻止域の境界位置の規格化座標，g_s は阻止域での伝達関数の大きさの上限値である．伝達関数の通過域における最大値は 1 であり最小値は g_p である．以下に，用いたフィルタの構成法を具体的に示す．

レゾルベントのシフトに実数を用いる場合　区間 $[a, b]$ は固有値分布の下端であり，a は最小固有値の下界とする．式 (3) を用いてシフト ρ とレゾルベントの係数 γ（および g_p）を与えられたパラメタの 3 つ組（n，μ，g_s）から計算する．

$$\begin{cases} \sigma & \leftarrow \quad \mu / \sinh\left(\frac{1}{2n} \, \cosh^{-1} \, \frac{1}{g_s} \right) , \\ \rho & \leftarrow \quad a - (b-a) \, \sigma , \\ \gamma & \leftarrow \quad (b-a)(\sigma + \mu) , \\ g_p & \leftarrow \quad g_s \, \cosh \left\{ 2n \sinh^{-1} \, \sqrt{(\mu-1)/(1+\sigma)} \right\} . \end{cases} \tag{3}$$

すると，フィルタ $\mathcal{F}$ は式 (1) により与えられる．

λ に対する正規化座標 t を $\lambda \in [a,b]$ を $t \in [0,1]$ に移す線形変換 $t \equiv \dfrac{\lambda - a}{b - a}$ により定義する．引数 t の伝達関数 $g(t)$ および引数 λ の伝達関数 $f(\lambda)$ は式 (4) になる．

$$g(t) = g_s\, T_n\left(2\,\frac{\mu+\sigma}{t+\sigma} - 1\right),\ f(\lambda) = g_s\, T_n\left(2\gamma\,\frac{1}{\lambda-\rho} - 1\right). \tag{4}$$

レゾルベントのシフトに虚数を用いる場合　シフトに虚数を用いる場合は区間 $[a,b]$ の位置は任意でよい．式 (5) を用いてシフト ρ' とレゾルベントの係数 γ'（および g_p）を与えられたパラメタの 3 つ組（n，μ，g_s）から計算する．

$$\begin{cases} \sigma & \leftarrow & \mu / \sinh\left(\frac{1}{2n}\cosh^{-1}\frac{1}{g_s}\right), \\ \rho' & \leftarrow & \frac{a+b}{2} + \left(\frac{b-a}{2}\right)\sigma\sqrt{-1}, \\ \gamma\,' & \leftarrow & \left(\frac{b-a}{2}\right)\frac{\mu^2+\sigma^2}{\sigma}, \\ g_p & \leftarrow & g_s\cosh\left\{2n\,\sinh^{-1}\sqrt{(\mu^2-1)/(1+\sigma^2)}\right\}. \end{cases} \tag{5}$$

すると，フィルタ $\mathcal{F}$ は式 (2) により与えられる．

λ の正規化座標 t を $\lambda \in [a,b]$ を $t \in [-1,1]$ に移す線形変換 $\lambda \equiv \frac{1}{2}(a+b) + \frac{1}{2}(b-a)t$ によって定義する．引数 t の伝達関数 $g(t)$ と引数 λ の伝達関数 $f(\lambda)$ は式 (6) で与えられる．

$$g(t) = g_s\, T_n\left(2\,\frac{\mu^2+\sigma^2}{t^2+\sigma^2} - 1\right),\ f(\lambda) = g_s\, T_n\left(2\,\gamma\,'\,\mathrm{Im}\,\frac{1}{\lambda-\rho'} - 1\right). \tag{6}$$

3　フィルタの反復で近似対を改良する方法の概略

3.1　フィルタ対角化法の概略

行列 A と B が実対称で，B は正定値である一般固有値問題 $A\,\mathbf{v} = \lambda B\,\mathbf{v}$ の固有対 $(\lambda, \mathbf{v})$ で $\lambda \in [a,b]$ であるものを解くために，固有値が $[a,b]$ に入る固有ベクトルは良く通過するが固有値が $[a,b]$ から離れた固有ベクトルはできるだけ阻止するように特性がうまく調整された線形作用素をフィルタに用いる．そのようなフィルタは $[a,b]$ 近傍の固有値を持つ固有ベクトルで張られた不変部分空間への射影作用素の近似である．フィルタを適用して得られたベクトルを十分多く集めて，適切に分析を行なうことにより不変部分空間を近似する空間の基底を構成する [6]．構成された基底に Rayleigh-Ritz 法を適用すれば必要な近似対が得られる．

3.2　直交化付きのフィルタ適用の反復による対角化の手順

今回は簡単のため同一のフィルタを `IT` 回（2〜4 回）適用した，ただし毎回のフィルタ適用の前に必ず B-正規直交化を適用する．以下に，直交化付きフィルタの反復による対角化の手順を示す．

1. レゾルベントを与える係数行列を分解してフィルタ $\mathcal{F}$ を準備する;
2. $Y^{(0)}$ をランダムなベクトル m 個の組とする；
3. for $i = 1, 2, \ldots,$ `IT` do
   $X^{(i)} \Leftarrow (Y^{(i-1)}$の B-正規直交化$)$；　$Y^{(i)} \Leftarrow \mathcal{F}\, X^{(i)}$；
   enddo

   注：途中の B-正規直交化で階数低下が起きたら，$X^{(i)}$ や $Y^{(i)}$ のベクトルの数 m をその階数に変える．

そうして得られた最後の X と Y について，以下のようにする．

4. 「必要な固有値全部を持つ不変部分空間」その近似の基底 Z を Y の列の線形結合で構成（X と伝達特性の値 g_s，g_p も利用）[6].

5. Rayleigh-Ritz 法を基底 Z に適用して得られた Ritz 対を元の一般固有値問題の近似対とする．

今回は B-正規直交化には閾値付きの B-特異値分解を使用した．その閾値をマシンイプシロンの 100 倍と設定して，閾値より小さい特異値を持つ特異ベクトルは切断した．

4 直交化付きフィルタ反復の実験例

4.1 例題に用いた実対称定値一般固有値問題

1 辺の長さが π の立方体領域で，境界に零ディリクレ条件を課した場合の 3 次元ラプラシアンの固有値方程式 (7)，それを FEM で離散化して得られる実対称定値一般固有値問題 (8) を実験の例題として用いた．

$$-\nabla^2 \phi(x,y,z) = \lambda \, \phi(x,y,z) \,. \tag{7}$$

$$A \, \mathbf{v} = \lambda B \, \mathbf{v} \,. \tag{8}$$

立方体の各辺方向をそれぞれ $N_1{+}1$，$N_2{+}1$，$N_3{+}1$ に等分割して，各方向の区間の直積による直方体を有限要素とする（下図 1）．

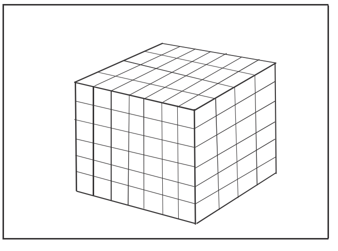


図 1: 有限要素分割の概念図．　$(N_1, N_2, N_3) = (3, 5, 6)$ の例．

有限要素内の基底関数は各辺方向の 3 重線形関数とする．行列 A と B の次数は $N = N_1 N_2 N_3$ である．

いま $N_1 \leq N_2 \leq N_3$ として，帯幅が小さくなるように基底関数に番号を付けると，半帯幅（対角要素を含まず）は $w_L = 1 + N_1 + N_1 N_2$ になる．離散化で得られた一般固有値問題にフィルタ対角化法を適用して，固有値が区間 $[a, b]$ 内の固有対の近似を求める．この例題の固有値は簡単な数式で厳密値が計算できる．与えられた区間内にある固有値の正しい数も，厳密値を作って区間内にあるものを数えればわかる．

4.2 近似対の相対残差

近似対 $(\lambda, \mathbf{v})$ の相対残差 Θ を式 $\Theta \equiv || \, A \, \mathbf{v} - \lambda B \, \mathbf{v} \, || / || \lambda B \, \mathbf{v} ||$ で定義する．この値はベクトル $\mathbf{v}$ の規格化にはよらず，共通の定数を行列 A と B に乗じても不変である．ベクトルのノルム $|| \cdot ||$ に今回はユークリッドノルムを用いた．すると幾何学的には 2 つのベクトル $A\mathbf{v}$ と $\lambda B\mathbf{v}$ の挟む角が θ のとき $\Theta = 2 \sin(\theta/2)$ であり，微小角なら $\Theta \approx \theta$ である．この相対残差 Θ の大きさで近似対の質を評価する，小さいほど良い．

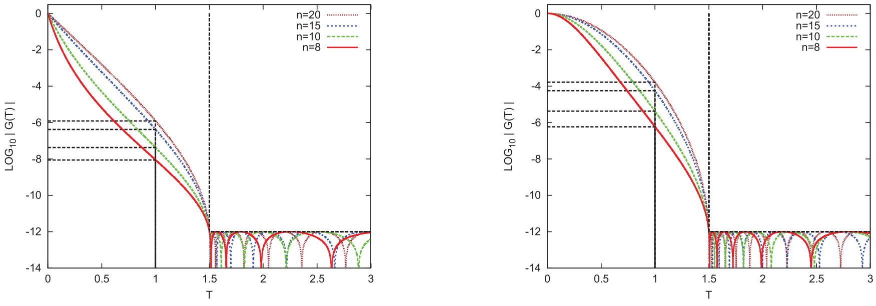
相対残差 Θ の計算は行列 A と B が疎であるほど容易であり，さらに複数の対に対してまとめて計算を行なうと，A と B への記憶参照をそれぞれ 1 回ずつで済ませることができる．

4.3 下端固有対を解いた実験例

フィルタは実数シフトの単一のレゾルベントの n 次多項式である．反復では毎回同じフィルタを用いた．フィルタは 3 つ組（n，μ，g_s）で指定し，今回の実験では全て $\mu = 1.5$，$g_s = 10^{-12}$ とした．次数 n が 8，10，15，20 の各場合について，横軸に規格化座標 t をとり縦軸にフィルタの伝達関数の大きさ $|g(t)|$ をとってプロットしたグラフを図 2 の左側に示す．

例題 R1：実数シフトのレゾルベントの多項式型フィルタの例 1　FEM の要素分割は $(N_1, N_2, N_3) = (20, 30, 40)$ とした．行列 A と B の次数 N は $24,000$，下帯幅 w_L は 621 である．固有値を求める区間は $[a, b] = [0, 30]$ とした（下端固有値）．求めるべき固有値の数は 54 である．通過域と遷移域を併わせた区間 $[0, 45]$ にある固有値の数は 106 であるのでベクトルの数 m は 106 より多くすることが望ましい．実験例を図 3 と図 4 に示す．次数 n が 10 以下では 4 回，n が 15 以上では 3 回までは残差が改良されている．

例題 R2：実数シフトのレゾルベントの多項式型フィルタの例 2　例題 R2 の一般固有値問題の係数行列は例題 R1 と同じであり，行列 A と B の次数は $N = 24,000$，下帯幅は $w_L = 621$ である．固有値を求める区間は $[a, b] = [0, 100]$（下端固有値）とする．　求めるべき固有値の数は 378 である．通過域と遷移域を併わせた区間 $[0, 150]$ 内にある固有値の数は 700 であるのでベクトルの数 m は 700 より多くするのが望ましい．実験例を図 5 と図 6 に示す．次数 n が 10 以下で 4 回，n が 15 以上で 3 回までは残差が改良されている．



下端対用　　　　中間対用（右半分）

図 2: フィルタの伝達関数の大きさ $|g(t)|$（$\mu = 1.5$，$g_s = 10^{-12}$）

4.4 中間固有対を解いた実験例

フィルタはシフトが虚数の単一のレゾルベントの虚部の n 次多項式であり，多項式に Chebyshev 多項式を用いる簡易型とする．反復では毎回同じフィルタを用いた．フィルタは 3 つ組（n，μ，g_s）で指定するが，今回の実験では常に $\mu = 1.5$，$g_s = 10^{-12}$ とした．次数 n が 8，10，15，20 の各場合について，横軸に規格化座標 t を正の側だけについてとり，縦軸にフィルタの伝達関数の大きさ $|g(t)|$ をとってプロットしたグラフを図 2 の右側に示す．

例題 C：虚数シフトのレゾルベントの多項式型フィルタの例　FEM の要素分割を $(N_1, N_2, N_3) = (50, 60, 70)$ とした．この例題の行列 A と B の次数は $N = 210,000$，下帯幅は $w_L = 3,051$ である．固有値を求める区間は $[a, b] = [100, 200]$（中間固有値）とした．求めるべき固有値の数は 801 である．通過域と遷移域を併わせた区間 $[75, 225]$ にある固有値の数は $1,192$ である．するとベクトルの数 m は $1,192$ よりも多くすることが望ましい．実験例を図 7 と図 8 に示す．n が 10 以下で 3 回，n が 15 以上で 2 回までは改良されている．

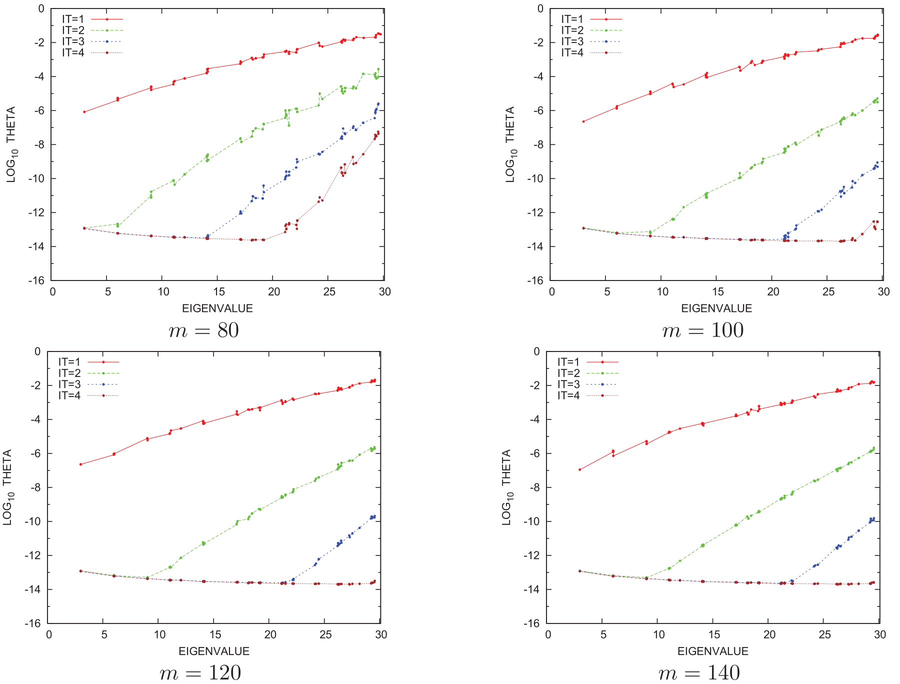


図 3: 例題 R1：各近似対の相対残差（$n = 8$）（m は 106 より大きいことが望ましい）

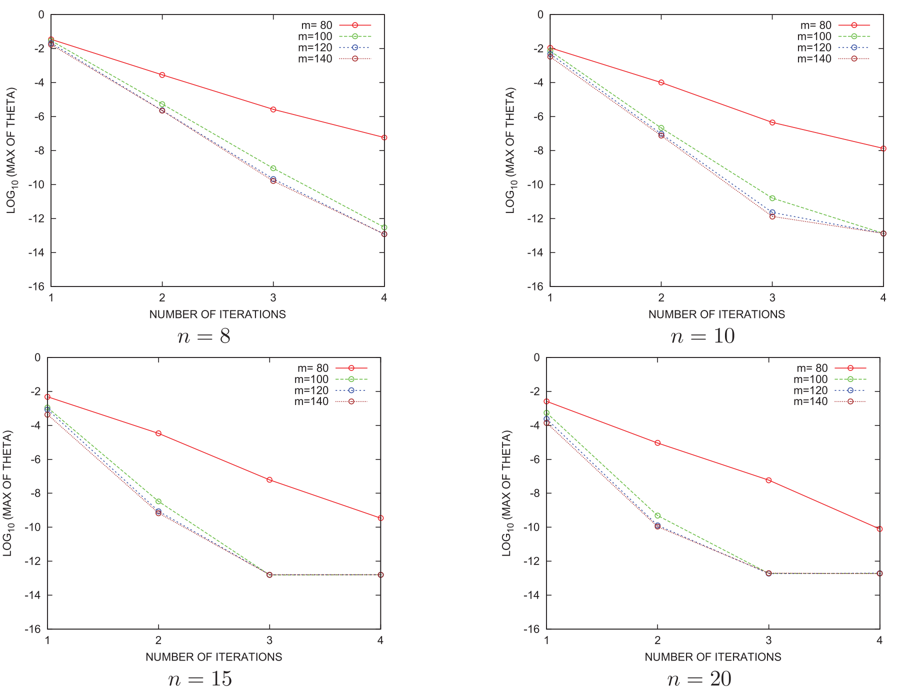


図 4: 例題 R1：反復回数に対する近似対の相対残差の最大値（m は 106 より大きいことが望ましい）

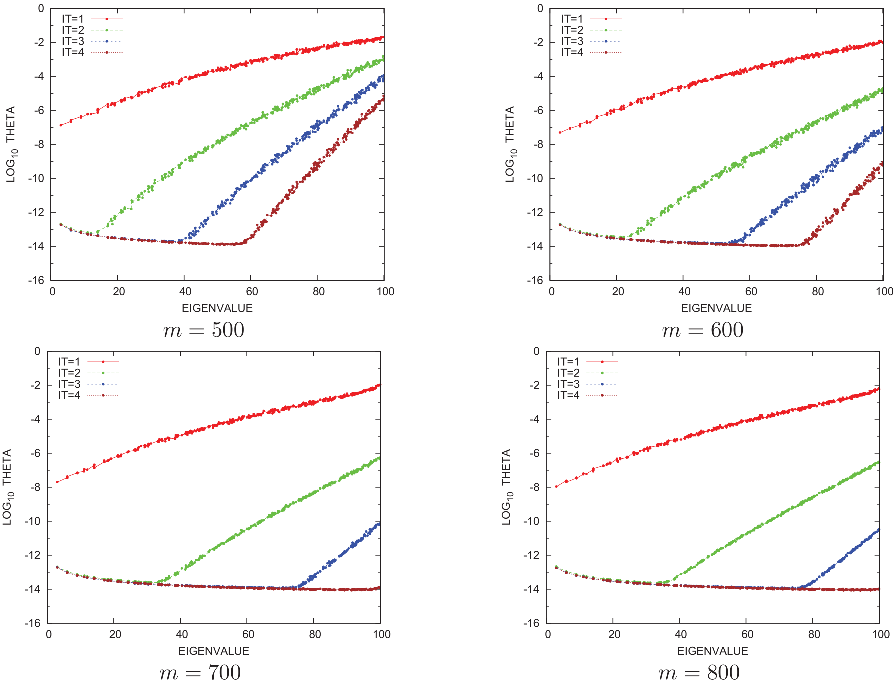


図 5: 例題 R2：各近似対の相対残差（$n = 8$）（m は 700 より大きいことが望ましい）

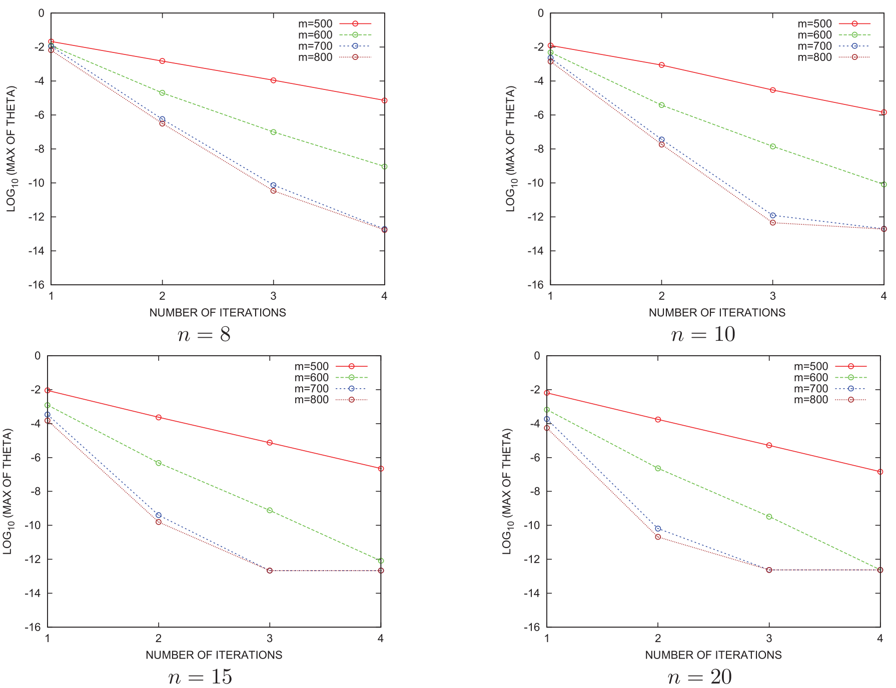


図 6: 例題 R2：反復回数に対する近似対の相対残差の最大値（m は 700 より大きいことが望ましい）

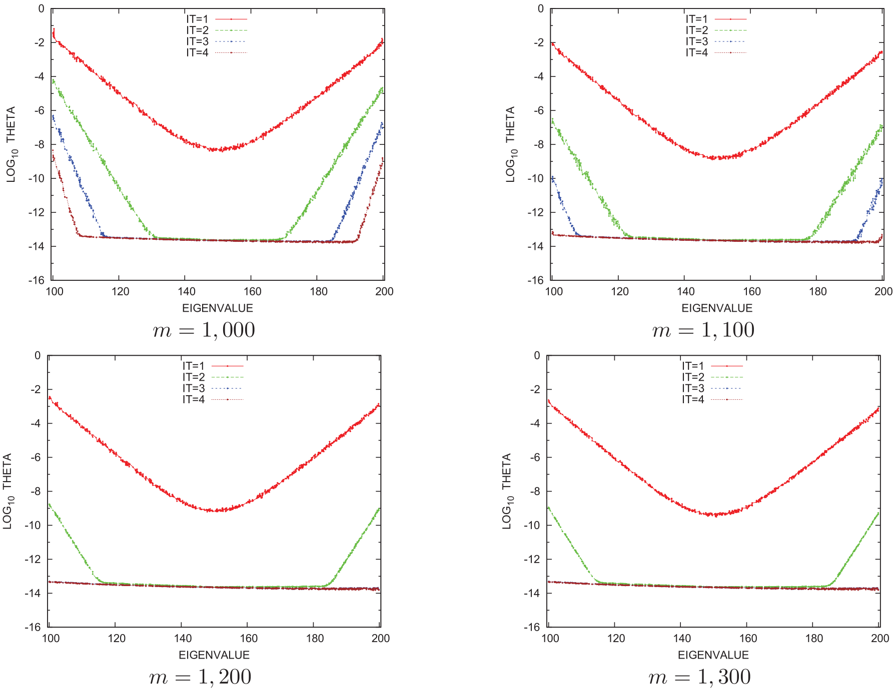


図 7: 例題 C：各近似対の相対残差（$n = 8$）（m は $1,192$ より大きいことが望ましい）

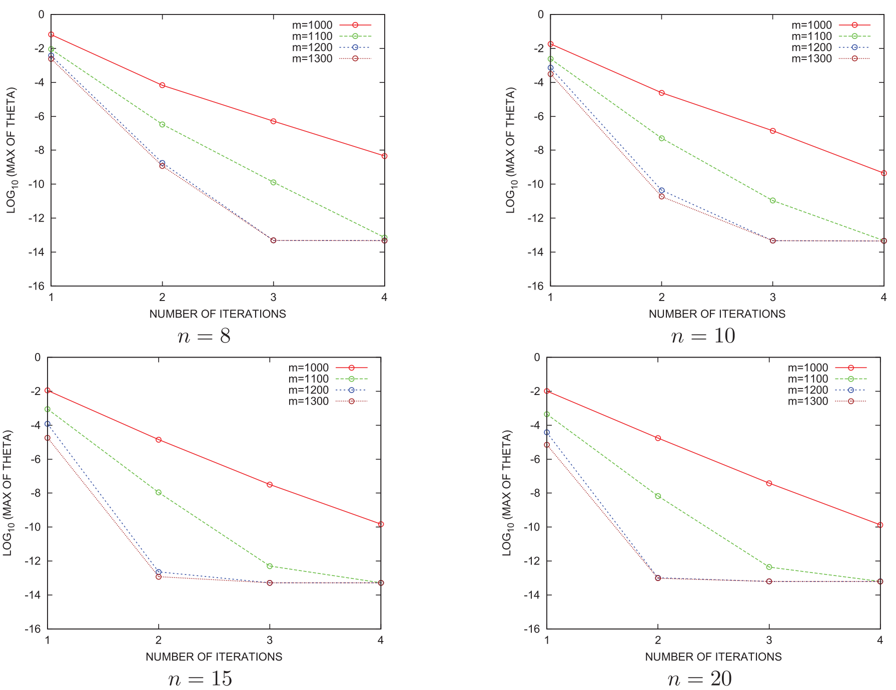


図 8: 例題 C：反復回数に対する近似対の相対残差の最大値（m は $1,192$ より大きいことが望ましい）

5　おわりに

実対称定値一般固有値問題の固有対で指定された区間に固有値があるものをフィルタ対角化法で近似して求める．フィルタはレゾルベントを用いて構成するが，レゾルベントの作用を与える連立 1 次方程式を直接法により解く場合には，大規模な問題であると行列分解の計算量や分解結果の記憶量が制約になる．そこでレゾルベントの数が最少である「単一のレゾルベントの多項式型のフィルタ」を採用したいが，伝達関数の特性があまり良くすることができないので，これまでは近似対の相対残差を一様に十分小さくすることはできなかった [9].

そこで今回は特性のあまり良くないフィルタを使い，正規直交化を行なった後にフィルタを適用する操作を 2〜4 回反復する実験を行なった．濾過するベクトルの数 m が十分であれば，使用するフィルタの特性の良さの程度にも依るが，フィルタを 2 回，3 回あるいは 4 回適用することにより，近似対の相対残差を一様に十分小さくできることを数値実験で確かめた．つまり，特性のあまり良くないフィルタを使用しても，フィルタの適用を直交化を付きで反復するならば近似対の改良ができる（近似対の品質の確認を相対残差を求めることにより行なうための手間は比較的少なく済む）．今回は簡単化のために毎回の反復には同じフィルタを用いたが，同じレゾルベントで構成された異なる特性のフィルタを組み合わせて用いることも可能である．

参　考　文　献

[1] H. Rutishauser: “Computational aspecs of F. L. Bauer’s simultaneous iteration method”, *Numer. Math.*, **v.13**, No.1 (1969), pp.4–13.

[2] H. Rutishauser: “Simultaneous Iteration Method for Symmetric Matrices”, in *Handbook for Automatic Computation*, Springer-Verlag(1971), pp.284-302.
(Reprinted from *Numer. Math.*, **v.16** (1970), pp.205-223.)

[3] Gene H. Golub and Charles F. Van Loan: *Matrix Computations*(4th Ed.), The John Hopkins Univ. Press, (2013). (§8.2.4:‘Orthogonal Iteration’).

[4] 村田 健郎, 他: 「行列計算ソフトウェア: WS, スーパーコン, 並列計算機」, 丸善 (1991).
(§11.2:ベキ乗法一族, §11.4:レーリー-リッツ法つきの同時逆反復法, §11.8:対称行列用の一般固有値問題)

[5] 村上弘: 固有値が指定された区間内にある固有対を解くための対称固有値問題用のフィルタの設計, **情報処理学会論文誌：コンピューティングシステム** (ACS31), Vol.3, No.3 (2010), pp.1–21.

[6] 村上弘: 対称一般固有値問題のフィルタ作用素を用いた不変部分空間の近似構成, **情報処理学会論文誌：コンピューティングシステム** (ACS35), Vol.4, No.4 (2011), pp.1–14.

[7] 村上弘: レゾルベントの線形結合をフィルタに用いたエルミート定値一般固有値問題のフィルタ対角化法, **情報処理学会論文誌：コンピューティングシステム** (ACS45), Vol.7, No.1 (2014), pp.57–72.

[8] 村上弘: 少数のレゾルベントの多項式型フィルタを用いた一般固有値問題の解法, **情報処理学会研究報告**, Vol.2018-HPC-165, No.15 (2018 年 7 月), pp.1–21.

[9] 村上弘: 単一のレゾルベントのチェビシェフ多項式による実対称定値一般固有値問題の解法用の簡易型フィルタ, **情報処理学会論文誌：コンピューティングシステム** (ACS64), (2019 年 3 月頃印刷予定)．