2P19　微小な摂動を受けた対称行列の固有対の求解法について

○ 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)

対称な一般固有値問題の解法は量子化学で極めて重要である．SCF 法では線形化により得た行列一般固有値問題を反復で解いて自己無撞着にする．収束に近づくと係数行列の変化はしだいに小さくなる．そこで，反復中の行列の一般固有値問題の解を既に求めたとき，係数行列が微小変化した問題の解を能率良く解く方法が望まれる．また低精度演算で得た結果の解を改良して，高精度演算による解を得ることも類似の課題と言える．

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．(通常の LCAO 法では占有軌道数 m は基底関数の個数 N の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 の数分の一程度と比較的多いことや，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 反復法の利用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] が極めて有望である．(QR 反復法ではシフト付き加速法を用いるが，前回の SCF 反復で用いた固有値の値を次回のシフト量の参考値に用いれば，前回の知識を利用しない場合に比べて QR 反復の回数をある程度減らせることを期待でき，有利となるように思われる．同様に分割統治法についても前回の SCF 反復の際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ことで計算を加速できる可能性がある．以下では係数行列の微小な変化をヤコビ法を用いて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．するとコレスキ分解は不変である．

  A が微小に変化して $A' = A + \delta A$ になったとすると，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 $\Lambda + U^TL^{-1}\delta A\, L^{-T}U$ であるから非対角成分の弱い対称行列なので，ヤコビ法を用いると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て，V の場所は不要である．

- 次に反復で B も微小に変化させる場合を考える．一般固有値問題 $Ax^{(i)} = Bx^{(i)}\lambda^{(i)}$ を，正定値行列 B についての規格直交化を課した一般固有ベクトルを全て解いたとする．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，$U^TAU = \Lambda$,$U^TBU = I$ 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，$U^TA'UV = U^TB'UV\Lambda'$ 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ると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 に累積すると，U' は U の場所に重ね書きできて，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であることが特に損な点である．m の値は普通 N の数分の一程度なので，記憶領域や演算の量が無駄な傾向がある．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．しかしこれらの短所は，行列積が演算局所性が高くて並列性も容易に引き出し易いことや，ヤコビ法についてはヤコビ回転に並列ヤコビ法 [2] が適用できることや，ブロックヤコビ法 [2] を組み合わせることで演算の局所性も高められることから，短所をある程度を緩和でき，有利になる可能性がある．

標準固有値問題を過去の情報を用いずに直接解く方法としては,「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).