Sakurai-Sugiura 法による行列の対角化

永井佑紀

平成 26 年 5 月 2 日

Sakurai-Sugiura 法 (SS 法) は、任意の範囲の固有値と固有ベクトルを求める事のできる手法である。この手法はプログラムが比較的単純にも関わらず高速に高精度に計算ができる。この手法の解説を行う。詳細は Y. Nagai *et al.*, J. Phys. Soc. Jpn. **82**, 094701 (2013) を参照すること。

1 行列の対角化

ある $N \times N$ のエルミート行列 A が

$$A\boldsymbol{x}_i = \lambda_i \boldsymbol{x}_i \tag{1}$$

を満たすとき、λ_i を固有値、$\boldsymbol{x}_i$ を固有ベクトルと呼ぶ。エルミート行列であれば、固有値は実数である。また、N 本の固有ベクトル並べて作った行列 P

$$P = \left(\begin{array}{ccc} \boldsymbol{x}_1 & \cdots & \boldsymbol{x}_N \end{array} \right) \tag{2}$$

はユニタリー行列であり、$P^\dagger P = 1_{N\times N}$ を満たす。また、

$$AP = P \left(\begin{array}{ccc} \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_N \end{array} \right) \tag{3}$$

より、

$$P^\dagger A P = \left(\begin{array}{ccc} \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_N \end{array} \right) \tag{4}$$

が成り立つ。よって、A は P によって対角化可能である。また、行列 A は、P を用いると

$$A = P \left(\begin{array}{ccc} \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_N \end{array} \right) P^\dagger \tag{5}$$

と書く事ができる。固有ベクトル $\boldsymbol{x}_i$ を用いてあらわに書くと、

$$A = \sum_{l=1}^{N} \lambda_l \boldsymbol{x}_l \boldsymbol{x}_l^\dagger \tag{6}$$

となる。

2　行列次元の縮小

さて、行列 A の固有値固有ベクトルのすべてを求める必要がない場合を考える。例えば、すべての固有値の数は N 個であるが、M 個だけ必要な場合を考えてみる。これはすなわち、行列 A が M 個の固有値固有ベクトルの情報だけを持っている行列であっても構わないことを意味している。したがって、行列 A を

$$A \sim \sum_{l=1}^{M} \lambda_l \boldsymbol{x}_l \boldsymbol{x}_l^{\dagger} \tag{7}$$

と近似してもよい。これを行列表記で書くと、

$$A \sim \tilde{P}\tilde{D}\tilde{P}^{\dagger} \tag{8}$$

となる。ここで、

$$\tilde{P} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{x}_1 & \cdots & \boldsymbol{x}_M \end{pmatrix} \tag{9}$$

$$\tilde{D} \equiv \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_M \end{pmatrix} \tag{10}$$

という $N \times M$ 行列 $\tilde{P}$ と $M \times M$ 行列 $\tilde{D}$ を定義した。

次に、行列 $\tilde{D}$ はある $M \times M$ 行列を対角化して得られた行列であると考える。すなわち、

$$\tilde{D} = \tilde{U}^{\dagger}\tilde{A}\tilde{U} \tag{11}$$

であるとする。ここで、$\tilde{U}$ は $M \times M$ のユニタリー行列、$\tilde{A}$ は $M \times M$ のエルミート行列であるとする。これを元の行列 A の表式に代入すると

$$A \sim \tilde{P}\tilde{U}^{\dagger}\tilde{A}\tilde{U}\tilde{P}^{\dagger} \tag{12}$$

$$= \tilde{Q}\tilde{A}\tilde{Q}^{\dagger} \tag{13}$$

となる。ここで、$\tilde{Q}$ を

$$\tilde{Q} \equiv \begin{pmatrix} \boldsymbol{c}_1 & \cdots & \boldsymbol{c}_M \end{pmatrix} \tag{14}$$

とすると、$\boldsymbol{c}_i$ は

$$\boldsymbol{c}_i = \sum_{l=1}^{M} U_{jl}^{*} \boldsymbol{x}_l \tag{15}$$

となり、固有ベクトル $\boldsymbol{x}_i$ の線形結合で書けていることがわかる。

さて、もし $\boldsymbol{c}_i$ を用意する事ができれば、$\tilde{Q}$ を用意することができ、その結果、

$$\tilde{A} = \tilde{Q}^{\dagger}A\tilde{Q} \tag{16}$$

とすることで $\tilde{A}$ を用意することができる。この $M \times M$ 行列 $\tilde{A}$ を対角化すると M 個の固有値 λ_i と行列 $\tilde{U}$ が求まり、$\tilde{U}$ が求まると

$$\tilde{P} = \tilde{Q}\tilde{U}^{\dagger} \tag{17}$$

から $\tilde{P}$ が求まる。よって、M 個の固有値と固有ベクトルを求めることができる。

以上から、何らかの方法で $\boldsymbol{c}_i$ を求めることで行列次元の縮小を行うことができる。

3 SS 法

3.1 射影

$\boldsymbol{c}_i$ を求める方法を考えよう。一般に、ある N 次元ベクトル $\boldsymbol{v}$ は、$N \times N$ の行列 A の固有ベクトル $\boldsymbol{x}_i$ を用いて

$$\boldsymbol{v} = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i \boldsymbol{x}_i \tag{18}$$

と展開することができる。もし、M 個の固有ベクトルで展開されるベクトル

$$\boldsymbol{s} \equiv \sum_{i}^{M} \alpha_i \boldsymbol{x}_i \tag{19}$$

を $\boldsymbol{v}$ から作る事ができれば、そのベクトルを $\boldsymbol{c}_i$ とみなすことができる。ベクトル $\boldsymbol{v}$ に対する射影 $P_\Gamma(A)$ を用いて

$$\boldsymbol{s} = P_\Gamma(A)\boldsymbol{v} \tag{20}$$

が書けたとする。このベクトルに行列 A を k 回かけたベクトル

$$\boldsymbol{s}^k = A^k P_\Gamma(A)\boldsymbol{v} \tag{21}$$

を m 個（$k = 0, \cdots m-1$）用意すると、これらのベクトル達はクリロフ部分空間を作るので、線形独立になる。また、$\boldsymbol{v}$ を異なった L 本用意すると、L 本の線形独立なベクトルを用意することができる。これらの mL 本のベクトルを使えば、$\boldsymbol{c}_i$ を作ることができる。よって、射影 $P_\Gamma(A)$ や射影 $A^k P_\Gamma(A)$ がわかればよい。

あるベクトル $\boldsymbol{v}$ の中のある固有ベクトル $\boldsymbol{x}_j$ の重みを計算したい場合、

$$P_j \equiv \boldsymbol{x}_j \boldsymbol{x}_j^\dagger \tag{22}$$

という行列を用意すれば、

$$P_j \boldsymbol{v} = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i \boldsymbol{x}_j \boldsymbol{x}_j^\dagger \boldsymbol{x}_i = \alpha_j \boldsymbol{x}_j \tag{23}$$

によって計算することができる。よって、$\boldsymbol{v}_M$ は

$$\boldsymbol{s} = \sum_{j=1}^{M} P_j \boldsymbol{v} \tag{24}$$

で計算することができるので、

$$P_\Gamma(A) = \sum_{j=1}^{M} P_j \tag{25}$$

である。しかしながら、P_j は固有ベクトル $\boldsymbol{x}_j$ によって定義されており、固有ベクトルがわからない場合には定義式通りでは計算することができない。そこで、複素積分を用いる事でこの問題を回避する。

3.2 複素積分

式 (6) より、行列 A は射影 P_j を用いて

$$A = \sum_{j=1}^{N} \lambda_j P_j \tag{26}$$

と書く事ができる。ここで、A のレゾルベント $(zI-A)^{-1}$ は

$$(zI-A)^{-1}=\sum_{j=1}^{N}\frac{P_j}{z-\lambda_j} \tag{27}$$

と書けることを用いる。複素平面 z 上において中心 γ 半径 ρ の円上 Γ での複素積分を考えると、

$$s=\frac{1}{2\pi i}\oint_{\Gamma}(zI-A)^{-1}dz=\sum_{j=1}^{M}P_j \tag{28}$$

となる。ここで、円 Γ で囲まれた領域には固有値が M 個存在しているとした。よって、射影 $P_{\Gamma}(A)$ は固有ベクトルをあらわに使わずに

$$P_{\Gamma}(A)=\frac{1}{2\pi i}\oint_{\Gamma}(zI-A)^{-1}dz \tag{29}$$

と書く事ができる。また、$A^kP_{\Gamma}(A)$ は

$$A^k\sum_{j=1}^{M}P_j=\sum_{j=1}^{M}\lambda_jP_j \tag{30}$$

より、

$$A^kP_{\Gamma}(A)=\frac{1}{2\pi i}\oint_{\Gamma}z^k(zI-A)^{-1}dz \tag{31}$$

となる。以上から、あるベクトル $\boldsymbol{v}$ は、射影 $A^kP_{\Gamma}(A)$ により、

$$\boldsymbol{s}_k=\frac{1}{2\pi i}\oint_{\Gamma}z^k(zI-A)^{-1}\boldsymbol{v}dz \tag{32}$$

となる。

計算すべき量は $(zI-A)^{-1}\boldsymbol{v}$ であるが、これは、

$$\boldsymbol{y}(z)\equiv(zI-A)^{-1}\boldsymbol{v} \tag{33}$$

として、連立方程式

$$(zI-A)\boldsymbol{y}(z)=\boldsymbol{v} \tag{34}$$

の解 $\boldsymbol{y}(z)$ を求めることで計算できる。あとは、この量 $\boldsymbol{y}(z)$ を用いて Γ 上の複素積分を数値的に評価すればよい。

3.3 複素積分の数値評価

次に、Γ 上の複素積分を数値的に評価する。円周 Γ 上の N 個の等間隔点を

$$z_j=\gamma+\rho\exp\left(\frac{2\pi i}{N}(j+\frac{1}{2})\right) \tag{35}$$

とする。これらの点を用いて台形公式で複素積分を評価すると、

$$\boldsymbol{s}_k=\frac{1}{N}\sum_{j=0}^{N-1}\left(\frac{z_j-\gamma}{\rho}\right)^{k+1}y(z_j) \tag{36}$$

となる。

L 本の別のベクトル $\boldsymbol{v}_l$ に関しての射影を求めたい場合には、ベクトル $\boldsymbol{v}_l$ を L 本横に並べて $N \times L$ の行列 V を作成し、

$$(z_j I - A)Y(z_j) = V \tag{37}$$

を解いて

$$S_k = \frac{1}{N}\sum_{j=0}^{N-1}\left(\frac{z_j - \gamma}{\rho}\right)^{k+1} Y(z_j) \tag{38}$$

とすれば、全部で mL 本のベクトルが得られる。

3.4 正規直交基底の計算

さて、全部で mL 本のベクトルが得られた。これらのベクトルはすべて、円 Γ に囲まれた中に存在する固有値に付随する固有ベクトルのみで展開されている。円 Γ 内に存在する固有値の数を M とすると、線形独立なベクトルは M 本のはずである。そこで、この固有値の数 M を求める。そのためには、作った mL 本のベクトルを横に並べた $N \times mL$ 行列

$$S \equiv \begin{pmatrix} S_0 & \cdots & S_{m-1} \end{pmatrix} \tag{39}$$

の rank がわかればよい。rank を求めるには、S を特異値分解してゼロでない特異値の数を数えればよい。

特異値分解とは、ある $n \times m$ 行列 M を

$$M = U\Sigma V^\dagger \tag{40}$$

のように分解することを意味している。ここで、U は $n \times k$ の正規直交行列、V は $k \times m$ の正規直交行列で、

$$U^\dagger U = V^\dagger V = I \tag{41}$$

となる。また、Σ は非負の $k \times k$ 対角行列である。そして、k は行列 M の rank を表す。数値計算で特異値分解を行うと、U は $n \times n$、V は $m \times m$、Σ は $n \times m$ の行列となる。行列の rank は行列 Σ のゼロでない対角成分を数えて得る事ができる。

特異値分解によって rank$M$ を得る事ができると、特異値分解で出てきた行列 U の列幅を M とすれば $N \times M$ の正規直交行列が得られることがわかる。よって、

$$\tilde{Q} = U(:, 1 : M) \tag{42}$$

とすればよい。ここで $U(:, 1 : M)$ は Fortran90 表記である。得られた行列 $\tilde{Q}$ を用いて $\tilde{A}$ を計算することで、円 Γ に入っている固有値固有ベクトルをすべて求めることができる。計算の詳しいアルゴリズムは論文を参照。