2P02

対称定値一般固有値問題の区間内にある固有値の推定法

○ 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)

対称定値一般固有値問題: 行列 A が対称、行列 B が (狭義) 正定値対称 (もちろん B が単位行列でも良い) の対称定値一般固有値問題 $Av = \lambda Bv$ の全ての固有値は実数である。逆反復法で固有対を解く場合、精度の高い固有値の近似値を初期値として与えることが望ましい。指定した実区間 $I = [\alpha, \beta]$ 内に固有値のある固有対を求めるものとする。(注: 計算の内部では実区間 $\mu \in [\alpha, \beta]$ を変換 $\mu = \alpha + (\beta - \alpha)(1 + t)/2$ により標準区間 $t \in [-1, 1]$ に移して処理する。) 今回の方法は複素円周上の関数値を用いる「櫻井-杉浦法」[1, 2] と類似している。

固有値を極に持つ有理関数 F: いま ν 番目の固有対を (λ_ν, v_ν) とする。固有ベクトル v_ν は B-正規直交 ${v_\nu}^T B v_\rho = \delta_{\nu,\rho}$ とすると、$(A - \mu B)^{-1} = \sum_\nu v_\nu (\lambda_\nu - \mu)^{-1} {v_\nu}^T$ が成り立つ。ベクトル h を用いて関数 $F(\mu) \equiv h^T (A - \mu B)^{-1} h$ を定義すると、F は有理関数 $F(\mu) = \sum_\nu |{v_\nu}^T h|^2 (\lambda_\nu - \mu)^{-1}$ で、極は全て一位で固有値に一致する。${v_\nu}^T h = 0$ では $\mu = \lambda_\nu$ にある極が消えるから、区間内の求めたい全ての固有対の添字 η に対して $|{v_\eta}^T h|$ が微小とならないように h を「適切に」とる必要がある。

関数 F の値の計算: 関数 $F(\mu)$ の値は、h を右辺とする連立一次方程式 $(A - \mu B)x = h$ を解いて $h^T x$ として求める。F を用いる方法の効率と成否は、$(A - \mu B)$ を係数とする連立一次方程式が高速かつ高精度に解けるかに大きく依存する。例えば行列 A,B が幅の狭い帯行列あるいはブロック帯行列ならば、連立一次方程式は部分枢軸選択を伴う LU-分解法を用いて高速かつ高精度に解ける。

関数 F の有理関数近似式の構成: 直交多項式を基底とする展開形を分子分母 (次数は m, n) に用いて F を有理関数近似する。$F(\mu) \approx \{ \sum_{\ell=0}^m a_\ell \, p_\ell(\mu) \} / \{ \sum_{k=0}^n b_k \, p_k(\mu) \}$。但し、$p_\ell(\mu)$ は区間内の ℓ 次の直交多項式である。直交多項式を展開基底に用いるのは、区間内での数値的線形独立性が高く近似上有利だからである。

$N = m + n + 1$ と置くと、区間内の N 個の補間点 $\mu_j, j = 1, \cdots, N$ で近似式が F の値を補間する条件は $\sum_{\ell=0}^m a_\ell \, p_\ell(\mu_j) - \sum_{k=0}^n b_k \, p_k(\mu_j) F(\mu_j) = 0, j = 1, \cdots, N$。この線形関係を解いて分子分母の展開係数 $\{a_\ell\}, \{b_k\}$ を求める。(全係数を並べたベクトル g により関係は $g^T C = 0$ と書ける。行列 C の QR-分解から係数 g が決まる。あるいは分母の係数の線形関係を導き解くことも可能。詳細省略)。N 次の直交多項式 $p_N(\mu)$ の N 個の零点を補間点にとると良い性質が期待できる。(展開基底の「直交多項式」を、N 個の選点と重みで定義された「選点直交多項式」に一般化する場合は、その N 個の選点を補間点とする。詳細省略)

関数 F の極の近似: 直交多項式で基底展開された近似式の分母の零点は、ヘッセンベルグ形の疎な n 次の行列の固有値として求められる (詳細省略)。構成された有理関数近似の分子と分母の多項式は、補間の近似次数を上げるとそれだけ共通あるいは共通に極めて近い因子が増える。従って、補間の次数を十分に高くとった場合の区間内にある分母の零点は F の区間内にある極の近似値の候補だが、必ずしも真の極に対応するものとは限らない。そこで分母の零点での近似式の極の強度を分子も考慮に入れて調べ (詳細省略)、強度が閾値以下で微小のものは近似法の誤差や数値計算誤差から生じた見掛けの極として除外する。それゆえ、真の極が強度が微小のために除外されないように「適切な」ベクトル h をとることが必要になる。区間内の (n 個以下の) 分母の零点を、固有値の初期値として全く選別せずに逆反復を一回行ない、「逆反復によるベクトルの増幅率」や「逆反復による近似固有ベクトルのレーリー商と固有値の初期値とのずれの程度」等に基づいて選択する方が固有値を見落とす傾向が少ないように思われるが、計算の無駄が多い。

重複あるいは高度近接の固有値の困難: F に基づいて固有値を求める方法は、表示 $F(\mu) = \sum_\nu |{v_\nu}^T h|^2 (\lambda_\nu -$

$\mu)^{-1}$ からも容易に判るが、固有値が重複あるいは高度の近接の場合には F の極は重なり合いあるいは補間の分解能の不足から数値的に分離できず一個の固有値として認識されうる。つまり固有値が重複や高度近接の状況は、関数 F の極だけを見ていても認識できない。(このため、区間内の重複を込めた固有値の個数を把握した上で本方法を適用するのが安全である。固有値の個数の知識があれば、有理関数近似に用いる次数を見積もったり、あるいは個数が多過ぎて近似が困難な場合には区間の再分割を要求することもできる。改訂コレスキー分解 $(A-\mu B)=LDL^T$ が実施可能な場合 (例えば行列 A,B が比較的幅の狭い帯行列あるいはブロック帯行列ならば、改訂コレスキー分解は能率良く実行可能である) には、μ より小さい固有値の重複を込めた個数は D の負の対角要素の個数に等しいので、区間の両端 $\mu=\alpha,\beta$ での個数の差として区間内の固有値の個数が得られる。これは通常の二分法の原理である。)

固有値に重複や高度の近接があり得る状況下で、逆反復法を用いて近似固有対を求める処理は、「通常の固有値計算 + 逆反復法」と原理は同様になる。但し「通常の固有値解法」を用いる場合には、固有値の重複や近接の状況が逆反復法の適用の前に把握されているが、「関数 F の極から固有値を求める方法」を用いる場合には状況の把握ができずに逆反復法を適用せねばならないため、困難の程度が高くなる。

μ が近似固有値のとき、$(A-\mu B)$ の丁寧な LU-分解が実施可能ならば近似的な階数不足度から固有空間の次元 (固有値の重複度) が得られ、線形独立な固有ベクトルも得られるのでそれらを B-正規直交化する。あるいはレーリー商逆反復を B-再直交化付きで適用する、等々[4, 6]。

関数 F の減次操作: Ω を「既に得た固有対」(全てあるいは一部) の添字集合とする。関数 F から「既に得た固有対」の寄与を除去した関数を $\widehat{F}$ とすると、$F(\mu)=\sum_\nu |h^T v_\nu|^2(\lambda_\nu-\mu)^{-1}$ だから、$\widehat{F}(\mu)=F(\mu)-\sum_{\omega\in\Omega}|h^T v_\omega|^2(\lambda_\omega-\mu)^{-1}$ となり、$\widehat{F}$ の補間点 μ_j での値は F の補間点での値から容易に計算できる。

あるいは、ベクトル h から新たなベクトル $\widehat{h}$ を $\widehat{h}=h-B\sum_{\omega\in\Omega}v_\omega({v_\omega}^T h)$ により作ると、添字が Ω に属する固有対と $\widehat{h}$ は直交 $(\widehat{h}^T v_\omega=0)$ し、Ω に属さない固有対との内積の値は h と $\widehat{h}$ で等しい。そこで $\widehat{F}(\mu)\equiv\widehat{h}^T(A-\mu B)^{-1}\widehat{h}$ を定義すると、やはり $\widehat{F}$ は F から Ω に属する添字を持つ固有対の寄与を除去したものとなる。補間点 μ_j での $(A-\mu B)$ の LU-分解は再利用が可能である。

減次を行えば、原理的には重複や近接に近い状況の固有値がある場合にも、固有対を段階的に分離し認識できる。但し、固有ベクトルを求める際には逆反復の過程では既知の重複あるいは近接した固有対との間に B-直交性を課す必要がある。

実験例: 実験では A,B を幅の狭い帯行列とし、LU-分解を用いて F を求める連立一次方程式を解いた。直交多項式として最も簡便なチェビシェフ多項式を用いた。ポスター発表当日に詳しい説明と実験例を示す。

参 考 文 献

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

[2] 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.

[3] 山内二郎・宇野利雄・一松 信 共編：
「電子計算機のための数値計算法 I」, 第 5 章:'函数計算', 培風館 (1965).
「電子計算機のための数値計算法 III」, 培風館 (1972).

[4] 村田 健郎・小国 力・唐木 幸比古: 「スーパーコンピュータ 科学技術計算への適用」, 丸善 (1985).

[5] 村田 健郎: 「線形代数と線形計算法序説」, サイエンス社 (1986).

[6] 小国力 編, 村田 健郎・三好 俊郎・ドンガラ J.J.・長谷川 秀彦 共著: 「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).

[7] Zachary Battles and Lloyd N. Trefethen: "An Extension of Matlab to Continuous Functions and Operators", SIAM. J. Sci. Comput. **v**25, No.5 (2004), pp.1743-1770.

[8] 森 正武: 「数値解析」, 第 4 章:'関数近似', 共立出版 (1973).