

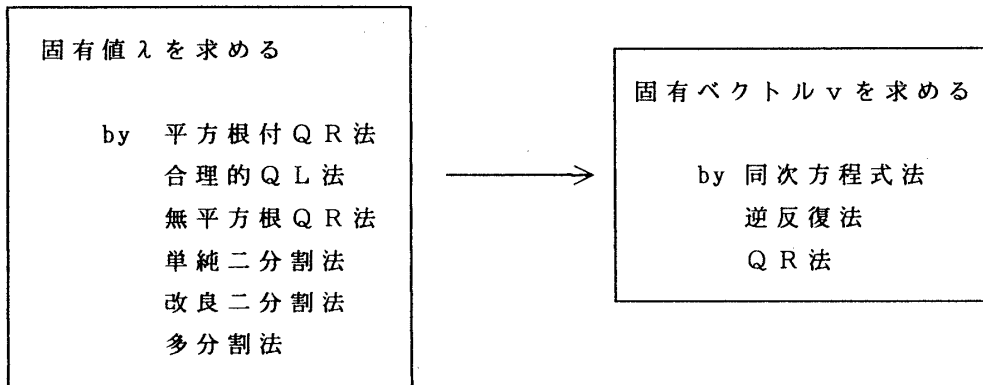
行列の固有ベクトル計算の諸問題

6S-1

別府良孝
聖徳学園女子短大

1. はじめに

実対称三重対角行列 T に関する標準固有値問題 $T v_i = \lambda_i v_i (i=1, 2, \dots, m, \dots, n)$ は、種々の方法で解くことができる。固有値 λ と固有ベクトル v を同時に求めたければ、ヤコビ法・ベキ乗法・伝統的QR法・ホモトピー法等を用いれば良い。固有値 λ を求めたから、固有ベクトル v を求めたければ、下図の過程を経れば良いが、固有ベクトル v の求め方について検討を加えたので報告する。



2. 同次方程式法

$v = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ とした時、 x_i の比は同次方程式 $(T - \lambda I) v = 0$ を解けば求まるので、正規化の条件 $\|v\| = 1$ を課すことにより、 v を定める事ができる。この方法は、あふれを起こしやすく、その上、副対角要素が小さい時大きな誤差を生じやすいので、NICER¹⁾ や EISPAC²⁾ の中では使用されていない。

3. 逆反復法とQR法

$A = QR$ の両辺の転置をとると $Q = A^{-1}L$ を得る。第 n 単位座標ベクトルを e_n とすれば、 Q の第 n 列 $= Q e_n = L_{nn} A^{-1} e_n$ を得る。よって、QR法が逆反復法の一様である事が、理解できる。両者の数値計算上の特徴は表1のごとく整理できる。

	逆反復法	QR法
n個の v_i を求めるのに必要な演算量 ベクトル化	n^2 に比例 困難	n^3 に比例 容易

表1. 逆反復法とQR法の比較

4. 逆反復法における係数行列

初期ベクトルを $u^{[0]}$ 、原点移動量を z として、連立一次方程式

$$(T - zI) u^{[1]} = u^{[0]} \quad (1)$$

を解くというのが、逆反復法の実際である。 z として λ の近似値を用いると、係数行列 $(T - zI)$ が特異になる心配があるが、心配の有無に関して種々の見解³⁻⁷⁾がある。

5. 逆反復法における初期ベクトル

$u^{[0]}$ として、三種類のベクトル、即ち、乱数ベクトル・解ベクトル・解への直交ベクトルを用いて、優劣を比較検討した。

6. 逆反復法の収束に必要な反復数 k

k の値について、種々の見解³⁻⁷⁾があるが、一概に言えない事を確認した。

7. 連立一次方程式(1)を解くための算法

EISPACKやNICERの中の逆反復ルーチンでは、部分軸選択ガウス消去法が用いられているが、バンチ分解法は有望でない事が判明した。

8. おわりに

逆反復法の改良を意図して種々試みたが、詳細については講演の際報告する。

謝辞： 電算機を利用させていただいた名大・東大・分子研の計算センターに深謝する。

参考文献：

- 1) Y. Beppu & I. Ninomiya, "NICER---- Fast Eigenvalue Routines",
Comput. Phys. Commun. Vol. 23(1981)123.
- 2) Garbow, Boyle, Dongarra & Moler: Matrix Eigensystem Routines (1972)
- 3) Wilkinson : The Algebraic Eigenvalue Problem (1965)
- 4) Jennings : Matrix Computation for Engineers and Scientist (1977)
- 5) Parlett : The Symmetric Eigenvalue Problems (1980)
- 6) Golub-Loan: Matrix Computations (1989)
- 7) Watkins : Fundamentals of Matrix Computations (1991)