6S−1

行列の固有ベクトル計算の諸問題

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$Tv_i=\lambda_i v_i$ $(i=1,2,\cdots,m,\cdots n)$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を求めてから、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。

固有値λを求める		固有ベクトルｖを求める
by 平方根付ＱＲ法 合理的ＱＬ法 無平方根ＱＲ法 単純二分割法 改良二分割法 多分割法	→	by 同次方程式法 逆反復法 ＱＲ法

2．同次方程式法

$v=(x_1,x_2,\cdots\cdots,x_n)$ 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、ＮＩＣＥＲ[1]やＥＩＳＰＡＣＫ[2]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$=Qe_n=L_{nn}A^{-1}e_n$を得る。よって、ＱＲ法が逆反復法の一種である事が、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。

Some Problems in the Calculation of Eigenvectors
Yoshitaka BEPPU
Shotoku Gakuen Women's College

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

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

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κ

κ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)