ハイパフォーマンス
コンピューティング 61-9
(1996. 5. 24)

重複する固有値に対応する固有ベクトルを計算するQDアルゴリズム

津野直人† 野寺 隆†

実対称三重対角行列の固有値が二分法などであらかじめ計算されているとき，対応する固有ベクトルは一般に逆反復法で計算することができる．しかし，固有値が病的に近いときなどには，求めるベクトルの直交性を確保するために特別な操作が必要とされる．この逆反復法の欠点を補うような固有ベクトルの計算法が B. N. Parlett[1] によって提案されている．本稿では，Parlett 法の有効性について検討し，逆反復法を越える方法ではないことを報告する．

The QD Algorithm for Computing Eigenvectors for Multiple Eigenvalues

NAOTO TSUNO† and TAKASHI NODERA†

An eigenvector of a real symmetric tri-diagonal matrix is generally computed by inverse iteration, when an eigenvalue of the matrix is already known. However, inverse iteration needs some particular operation to compute mutually orthogonal eigenvectors for pathologically close eigenvalues. Now, the new algorithm for computing eigenvectors which doesn't have this disadvantage is presented by B. N. Parlett[1]. In this paper, the effectiveness of Parlett's method is discussed, and it is reported that Parlett's method is inferior to invers iteration.

1. はじめに

固有値問題の数値解法は，以下のような目的ごとに効率の良い方法が異なる．

(a) すべての固有値を求める
(b) 一部の固有値のみを求める

それぞれについて，

(1) 対応するすべての固有ベクトルを求める
(2) 対応する一部の固有ベクトルのみを求める
(3) 固有ベクトルを求める必要はない

行列が実対称ならば，いずれの場合も，まず Householder 変換などを用いて，三重対角行列に変換する．その後，すべての固有値が必要なときには QR 法，一部の固有値のみが必要ならば二分法を利用するのが一般的である．固有ベクトルについては，すべてが必要ならば QR 法の中で別計算を行なって求めることができ，一部の固有ベクトルのみでよいときは，逆反復法で求めることができる（図 1）．

本稿では，始めに実対称三重対角行列の性質について述べる．次に，逆反復法の概要と，それに代わる方法として提案された Parlett の計算法について述べ，

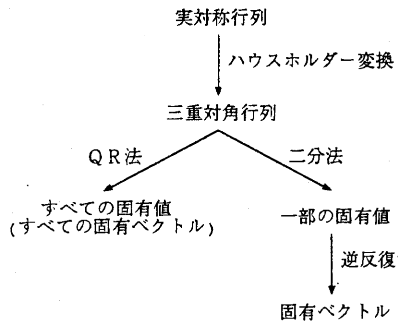

図 1　実対称行列の固有値問題の数値解法
Fig. 1　Numerical methods of eigen problem for real symmetric matrix

Parlett 法の有効性について検討する．

2. 表記法

Parlett[1] は，行列 B の特異値 σ に対し

$$(B^T B - \sigma^2 I)v = 0$$

となる「特異ベクトル」 v を求める，という表現を用いている．ここで行列 B は

† 慶應義塾大学理工学部
Faculty of Science and Technology, Keio University

$$B = \begin{bmatrix} a_1 & b_1 & & & \text{\Large 0} \\ & a_2 & b_2 & & \\ & & \cdots & \cdots & \\ & & & a_{n-1} & b_{n-1} \\ \text{\Large 0} & & & & a_n \end{bmatrix} \qquad (1)$$

という形の実二重対角行列で，各対角要素 a_i, b_i が 0 でないことを仮定している．

これは，実対称三重対角行列

$$A = B^T B$$
$$= \begin{bmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & & & \text{\Large 0} \\ \beta_1 & \alpha_2 & \beta_2 & & \\ & \cdots & \cdots & \cdots & \\ & & \beta_{n-2} & \alpha_{n-1} & \beta_{n-1} \\ \text{\Large 0} & & & \beta_{n-1} & \alpha_n \end{bmatrix}$$

の固有値 $\lambda = \sigma^2$ に対応する固有ベクトル $\boldsymbol{v}$

$$(A - \lambda I)\boldsymbol{v} = 0$$

を求めることと同値である．ここで，行列 A には

- 正定値性をもつ
- 主対角要素 α_i が正
- 副対角要素 β_i が 0 でない

という制約がつく．以下，実対称三重対角行列の固有値と固有ベクトル，という表現を用いる．

3. 実対称三重対角行列の性質

命題 1 実対称行列の固有ベクトルは，固有値が重複している場合も含めて，すべて互いに直交するようにとることができる．(証明略)

命題 2 実対称三重対角行列のすべての副対角要素が 0 でないとき，その行列に重複する固有値は存在しない．(証明は Wilkinson2) の pp.100-101, 103-104, 300 を参照のこと)

命題 2 の対偶をとることで，実対称三重対角行列が重複する固有値をもつとき，少なくとも 1 つの副対角要素が 0 になることがわかる．しかし，病的に近い固有値をもつときに，必ずしも副対角要素が 0 に近ずくとは限らない．Wilkinson[2] は次のように定義される $(2m+1)\times(2m+1)$ 次の実対称三重対角行列をこの例としてあげている．

$$\begin{cases} \text{主対角要素} \\ \quad \alpha_i = m + 1 - i \quad (i = 1, \cdots, m+1) \\ \quad \alpha_i = i - m - 1 \\ \qquad\qquad (i = m+2, \cdots, 2m+1) \\ \text{副対角要素} \\ \quad \beta_i = 1 \quad (i = 1, \cdots, 2m) \end{cases}$$

例えば，$m = 10$ としたときの 21×21 次の行列の固有値を小数点以下 5 桁まで計算すると次のようになる．

10.74619	7.00395	3.04310
10.74619	6.00023	2.96106
9.21068	6.00022	2.13021
9.21068	5.00024	1.78932
8.03894	4.99978	0.94753
8.03894	4.00435	0.25381
7.00395	3.99605	−1.12544

4. 固有ベクトルの計算

命題 2 より，重複する固有値をもつ実対称行列を Householder 変換などで三重対角行列に変換すると，少なくとも 1 つの副対角要素が 0 になることがわかる．つまり，三重対角行列 A が

$$A = \left[\begin{array}{c|c} A_1 & 0 \\ \hline 0 & A_2 \end{array}\right] \qquad (2)$$

というように，やはり三重対角である小行列 A_1, A_2 の直和に分解されることになる．このとき，行列 A の固有値は，小行列 A_1 または A_2 の固有値である．各小行列の中で固有値が重複しているとすると，さらに小行列の直和に分解されるので，最終的に行列 A は，重複する固有値をもたない小行列の直和に分解される，という性質をもつ．

簡単のため，三重対角行列 A が (2) 式のように直和分解されており，小行列 A_1, A_2 が共通な固有値 λ をもっているとする．つまり，λ は行列 A で 2 重に重複している固有値である．このとき，行列 A の固有値 λ に対応する固有ベクトルは，各小行列 A_1, A_2 でそれぞれ固有値 λ に対応する固有ベクトル $\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2$

$$(A_1 - \lambda I)\boldsymbol{v}_1 = 0$$
$$(A_2 - \lambda I)\boldsymbol{v}_2 = 0$$

を計算することで

$$\left[\begin{array}{c} \boldsymbol{v}_1 \\ \hline 0 \end{array}\right], \quad \left[\begin{array}{c} 0 \\ \hline \boldsymbol{v}_2 \end{array}\right]$$

のように求められる．この 2 つのベクトルは明らかに，互いに直交する．このようにして，重複する固有値に対しても，互いに直交するベクトルを自然に求めることができる．同様にして，行列 A が 3 つ以上の小行列の直和に分解されているときも，互いに直交するベクトルを求めることができる．

5. 逆反復法

いくつかの固有ベクトルを選んで計算するときには，一般に逆反復法が用いられる．これは，行列 A の固有値が近似値 τ として計算されているとき

$$(A-\tau I)\boldsymbol{x}^{(k+1)}=\boldsymbol{x}^{(k)}$$

という反復を各段階で正規化しながら繰り返すという方法である．左辺の行列が特異に近くなるので，連立1次方程式を注意深く解く必要がある．逆反復法は通常収束が速く，しかも一回目の反復で残差ノルムが大きく減少する，といった特徴をもつ．また，必要に応じて固有値の精度を改善することも可能である．

逆反復法を用いると，1つの固有値に対して反復の収束先が1つしかないので，固有値が重複しているときが問題になる．しかし，重複度だけの異なる初期ベクトルから反復を行なったり，固有値の有効桁の最後の方を変えて反復を行なうことで，線形独立な固有ベクトルを得られることが多い．このとき，固有ベクトルの直交性を確保するために Gram-Schmidt の直交化法などが必要になることもある．

6. Parlett 法

6.1 概　要

Parlett 法は，固有値が病的に近いときでも互いに直交する固有ベクトルを計算できる方法として提案されている．

Parlett 法は以下の2つのステップから構成される．

ステップ1: 2つの近似固有ベクトル $\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}$ を計算する．

$$(A-\lambda I)\boldsymbol{x}=\boldsymbol{e}_n \qquad (3)$$
$$(A-\lambda I)\boldsymbol{y}=\boldsymbol{e}_1 \qquad (4)$$

ステップ2: ステップ1で計算されたベクトル $\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}$ の要素を利用し，より残差ノルムが小さくなるようなベクトル $\boldsymbol{z}$ を計算する．

$$(A-\lambda I)\boldsymbol{z}=\boldsymbol{e}_k$$

複数の固有値が計算機の精度のために等しくなっているときには，ステップ2を，固有値の個数だけ異なる添字 k をとって実行することで，それだけの固有ベクトルを得ることができる．

ベクトル $\boldsymbol{x},\boldsymbol{y},\boldsymbol{z}$ の計算は，それぞれ $O(n)$ の演算で実行できる．この計算とは別に，添字 k を選択するための操作が必要となる．

Parlett 法の本質は，逆反復法の「一回目の反復で残差ノルムが大きく減少する」という性質を利用し，異なる初期ベクトル $\boldsymbol{e}_k$ から逆反復法を一回だけ反復させる，という点にある．

6.2 ステップ1

この小節では，(3)，(4) 式の実対称三重対角行列 A の代わりに (1) 式の二重対角行列 B を用いた

$$(B^TB-\lambda I)\boldsymbol{x}=\boldsymbol{e}_n \qquad (5)$$
$$(B^TB-\lambda I)\boldsymbol{y}=\boldsymbol{e}_1 \qquad (6)$$

という表現を用いる．

```
t_1 := λ
q_1 := a_1^2 − λ
for k := 1 step 1 until n − 1 do
  begin
    e_k := a_k^2 * b_k^2 / q_k
    t_{k+1} := λ + b_k^2 * t_k / q_k
    q_{k+1} := a_{k+1}^2 − t_{k+1}
  end
```

図2　LU 分解を行なう QD アルゴリズム

Fig. 2　The QD algorithm for LU decomposition

6.2.1 ベクトル $\boldsymbol{x}$ の計算

始めに，行列 B の要素を利用した

$$D=\begin{bmatrix} 1 & & & & 0 \\ & a_1b_1 & & & \\ & & \cdots & & \\ & & & \prod_{i=1}^{n-2}a_ib_i & \\ 0 & & & & \prod_{i=1}^{n-1}a_ib_i \end{bmatrix}$$

という対角行列で行列 B^TB を DB^TBD^{-1} のように変換する．この変換により，行列 B^TB の上側の副対角要素が1になり，下側の副対角要素が2乗される．主対角要素は変化しない．次に，図2の QD アルゴリズムを用いて

$$\begin{aligned} D(B^TB-\lambda I)D^{-1} &= DB^TBD^{-1}-\lambda I \\ &= LU \end{aligned} \qquad (7)$$

という LU 分解を行なう．行列 L と U は

$$L=\begin{bmatrix} 1 & & & & 0 \\ e_1 & 1 & & & \\ & \cdots & \cdots & & \\ & & e_{n-2} & 1 & \\ 0 & & & e_{n-1} & 1 \end{bmatrix} \qquad (8)$$

$$U=\begin{bmatrix} q_1 & 1 & & & 0 \\ & q_2 & 1 & & \\ & & \cdots & \cdots & \\ & & & q_{n-1} & 1 \\ 0 & & & & q_n \end{bmatrix} \qquad (9)$$

という形をした特殊な下三角行列と，上三角行列である．ここで

$$\boldsymbol{c}=\left[1,-q_1,q_1q_2,\cdots,(-1)^{n-1}\prod_{i=1}^{n-1}q_i\right]^T$$

というベクトルを考えると

$$LUc = (-1)^{n-1} \prod_{i=1}^{n} q_i \cdot e_n$$

となり

$$D^{-1}LUc = (B^TB - \lambda I)D^{-1}c = (-1)^{n-1} \frac{\prod_{i=1}^{n} q_i}{\prod_{i=1}^{n-1} a_i b_i} \cdot e_n$$

が作られる．したがって，固有ベクトルには実数倍の自由度があるので，(5) 式の解は

$$\boldsymbol{x} = D^{-1}\boldsymbol{c} = \left[1, -\frac{q_1}{a_1b_1}, \frac{q_1q_2}{a_1b_1a_2b_2}, \cdots, \cdots, (-1)^{n-1} \frac{\prod_{i=1}^{n-1} q_i}{\prod_{i=1}^{n-1} a_i b_i}\right]^T$$

ととればよい．よって，ベクトル $\boldsymbol{x}$ の各要素は

$$x_{(1)} = 1$$
$$x_{(k+1)} = -\frac{q_k}{a_k b_k} \cdot x_{(k)} \quad (k = 1, 2, \cdots, n-1)$$

という漸化式で求めることができる．

(7) 式のような特殊な LU 分解を行なうことで，前進代入，後退代入の段階で加減算を使わないように工夫されている．

6.2.2 ベクトル $\boldsymbol{y}$ の計算

ベクトル $\boldsymbol{y}$ の計算は，ベクトル $\boldsymbol{x}$ の計算と同様の操作を以下のように行なえばよい．

まず次のような対角行列を考える．

$$D = \begin{bmatrix} \prod_{i=1}^{n-1} a_i b_i & & & & 0 \\ & \prod_{i=2}^{n-1} a_i b_i & & & \\ & & \cdots & & \\ & & & a_{n-1}b_{n-1} & \\ 0 & & & & 1 \end{bmatrix}$$

この行列 D を用いて

$$D(B^TB - \lambda I)D^{-1} = DB^TBD^{-1} - \lambda I = L^TU^T$$

という分解を行なう．そして

$$\boldsymbol{c} = \left[(-1)^{n-1} \prod_{i=2}^{n} q_i, \cdots, q_{n-1}q_n, -q_n, 1\right]^T$$

というベクトルを考えると，ベクトル $\boldsymbol{y}$ の各要素は

$$y_{(n)} = 1$$
$$y_{(k)} = -\frac{q_{k+1}}{a_k b_k} \cdot y_{(k+1)} \quad (k = n-1, n-2, \cdots, 1)$$

という漸化式で求めることができる．

6.3 ステップ 2

上のようにして求めた 2 つのベクトル $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}$ を利用し，より残差ノルムが小さく

$$(B^TB - \lambda I)\boldsymbol{z} = \boldsymbol{e}_k \tag{10}$$

を満たすようなベクトル $\boldsymbol{z}$ を計算する．

そのためには，行列 $B^TB - \lambda I$ が三重対角であることを利用する．つまり、ベクトル $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}$ の k 番目の要素が等しくなるようにスケーリングを行ない，ベクトル $\boldsymbol{z}$ の $k-1$ 番目より前の要素はベクトル $\boldsymbol{x}$ の要素と同じに， $k+1$ 番目より後の要素はベクトル $\boldsymbol{y}$ の要素と同じにとると，実数倍の違いはあるが，ベクトル $\boldsymbol{z}$ が (10) 式を満たすようになる．つまり

$$\boldsymbol{z} = [x_{(1)}, \cdots, x_{(k)}, \rho y_{(k+1)}, \cdots, \rho y_{(n)}]^T$$
$$\rho = x_{(k)}/y_{(k)}$$

ということである．

次に，添字 k の適切な値について考える．行列 $A = B^TB$ の真の固有値を $\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n$ とし，対応する真の固有ベクトルを $\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \cdots, \boldsymbol{v}_n$ とする．このとき，固有値 λ_i の近似値として $\tau = \lambda_i + \epsilon$ を与えて

$$(A - \tau I)\boldsymbol{z} = \boldsymbol{e}_k$$

となる近似固有ベクトル $\boldsymbol{z}$ が計算されたとする．ここで，ベクトル $\boldsymbol{e}_k$ が真の固有ベクトルの線形結合で

$$\boldsymbol{e}_k = \sum_{j=1}^{n} \gamma_j \boldsymbol{v}_j \tag{11}$$

と表せるとすると，ベクトル $\boldsymbol{z}$ は

$$\boldsymbol{z} = \sum_{j=1}^{n} \frac{\gamma_j}{\lambda_j - \tau} \cdot \boldsymbol{v}_j$$

となる．したがって，ベクトル $\boldsymbol{z}$ が真の固有ベクトル $\boldsymbol{v}_i$ の良い近似であるためには， γ_j $(j \neq i)$ が小さいことが必要である．(11) 式より， γ_j $(j \neq i)$ が小さいとき，ベクトル $\boldsymbol{v}_i$ はベクトル $\boldsymbol{e}_k$ に近ずく．以上の事柄より，真の固有ベクトルの k 番目の要素が他と比べて大きいとき，計算されたベクトルが真の固有ベクトルのより優れた近似となることがわかる．

7. 検　　討

Parlett 法は固有値が病的に近い場合でも，互いに直交する固有ベクトルを計算できる方法として提案されている．固有ベクトルが病的に近い場合，Wilkinson の例のように必ずしも副対角要素が 0 に近ずくとは限らないが，実際問題としてそのような行列が生じることはほとんどないだろう．Wilkinson の例は，正定値性を失っているので，Parlett 法を適用することはできない．つまり，Parlett 法の特徴を生かすことのできる行列は例外的であるといえる．仮にこのような行列が生じたとしても，Parlett 法の本質が逆反復法であることから明らかなように，Parlett 法で互いに

表 1　三重対角化の結果（一部）
Table 1　The result of tri-diagonalization

副対角要素	値
β_9	1.5×10^{-15}
β_{14}	9.6×10^{-16}
β_{15}	-6.9×10^{-17}

直交するベクトルが計算できるのであるならば，逆反復法で初期ベクトルとして異なるベクトルを用いることで，同等以上の結果が得られることが予想される．

互いに十分離れている固有値に対しても，途中で必要となる添字の選択という操作が問題となる．「真の固有ベクトルの k 番目の要素が他と比べて大きいときに残差ノルムが小さくなる」という選択基準が与えられてはいるが，真の固有ベクトルが明らかでない以上，$\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}$ の要素を手がかりにするしかない．また，選択基準自体が数学的に厳密ではないので，添字の選択にあいまいさが残る．

8. 数　値　例

実際問題では，行列を三重対角化したときに，固有値が重複していても計算誤差のために副対角要素が 0 にはならず，非常に小さな値をとることが多い．したがって，行列を直和に分解せず Parlett 法を用いることも可能であるが，種々の問題が発生する．その一例を取りあげる．

例．　矩形領域 $\Omega = [0,1] \times [0,1]$ において，二次元のヘルムホルツ方程式の境界値問題

$$-\frac{\partial^2 u(x,y)}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 u(x,y)}{\partial y^2} = \varphi^2 u(x,y)$$
$$u(x,y)|_{\partial\Omega} = 0$$

を，メッシュサイズ 4 × 4 の差分法で離散化する．こうして生じる 16 × 16 次の実対称行列を Givens 変換で三重対角化した．このとき，**表 1** の副対角要素が非常に小さな値となった．本来なら，ここで行列を直和に分解して先に進むべきだが，Parlett 法の数値的な振舞いを調べるために，分解を行なわずに先に進む．

この行列に対し，2 重に重複している固有値を与えて，第 6 節にしたがい 3 つのベクトル $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, \boldsymbol{z}$ を計算した．結果が表 2 である．表 2 の中で，$x_{(k)}$，$y_{(k)}$ はそれぞれベクトル $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}$ の k 番目の要素が全体に対して占めている割合を示している．空白は 0.00 を表す．「残差ノルム」は，添字を k にとったときのベクトル z の残差ノルムを示している．なお参考までに，直和に分解するべき位置を罫線で示しておく．

表 2 より，ベクトル $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}$ の要素が，添字の選択の手がかりになっていないことがわかる．これは，ベクトル $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}$ の中で，それぞれ最後と最初の位置にある小行列に対応する部分の要素のみが大きく出てきてしまうためである．今の場合，重複する固有値が 1 番目と 2 番目の小行列の中に分離されているので，ベクトル $\boldsymbol{x}$ の要素の割合がまったく意味をなさなくなっている．したがって，固有ベクトルの直交性の問題以前に，別の問題が生じてしまうことになる．

表 2　Parlett 法の結果
Table 2　The result of Parlett's method

k	$y_{(k)}$ (%)	$x_{(k)}$ (%)	残差ノルム
1	12.67		7.1×10^{-8}
2	20.03		4.5×10^{-8}
3	15.52		5.8×10^{-8}
4			1.4
5	15.22		5.9×10^{-8}
6	19.87		4.5×10^{-8}
7	12.97		6.9×10^{-8}
8	2.51		3.6×10^{-7}
9	1.20		7.5×10^{-7}
10			3.3×10^{-8}
11			3.2×10^{-8}
12			1.2×10^{-7}
13			2.0×10^{-6}
14			4.6×10^{-6}
15			2.2
16		100.00	2.2

9. ま　と　め

本稿では，逆反復法に代わる方法として提案された Parlett 法について述べた．

その有効性について検討した結果，Parlett 法は既存の逆反復法を越えるものではなく，逆反復法の方が，必要であれば途中で固有値を改善できるという点でも優れているといえる．

参　考　文　献

1) Beresford N. Parlett and K. Vince Fernando. *Parallel Differential qd for Singular Vectors.* Matrix Analysis and Parallel Computing. PCG'94. Keio University, 1994.
2) J. H. Wilkinson. *The Algebraic Eigenvalue Problem.* Clarendon Press, Oxford, 1965.
3) Gene H. Golub and Charles F. Van Loan. *Matrix Computations.* The Johns Hopkins University Press, 1989.