社団法人　情報処理学会　研究報告
IPSJ SIG Technical Report

2006－HPC－108（10）
2006／10／6

区間内での直交多項式展開による有理関数補間

村上 弘

首都大学東京 数理情報科学専攻

本報告では, 直交多項式基底の線型結合を分子分母の展開に用いた有理関数近似により区間内の選点での値から与えられた有理型関数を補間する手法を検討する. 例えば, 補間式からは有理型関数の極や零点の近似値を得ることができる.
この方法の応用例として, 帯行列係数の対称定値一般固有値問題 $Av=\lambda Bv$ の指定された区間内に固有値がある固有対を求める. 適切に選んだベクトル h に対し, 固有値は有理関数 $F(\mu)=h^T(A-\mu B)^{-1}h$ の極である. F を補間する有理関数を区間内の選点での値から構成し, その式の極として関数 F の区間内の極を近似する. 与えられた μ に対する $F(\mu)$ の値の計算には帯 LU-分解を用いることができる. 固有対を求めるには, 得られた固有値の近似値を初期値として Rayleigh 商反復法を適用する.

The Rational Function Interpolation by the Orthogonal Polynomial Expansions in the Interval

Murakami Hiroshi

Department of Mathematics and Information Sciences,
Tokyo Metropolitan University

In this report, a method which interpolates a given meromorphic function from the chosen abscissas in the given interval by the rational function approximation that the numerator and the denominator are the expansions of linear combination of the orthogonal polynomial basis is considered. The approximated values of the poles or the zeros of the meromorphic function, for example, can be obtained from the interpolation expression.
To demonstrate the application of this method, we solve the eigenpairs of the banded symmetric definite generalized eigenvalue problem $Av = \lambda Bv$ whose eigenvalues are in the specified real interval. The eigenvalues are the poles of the rational function $F(\mu) = h^T(A-\mu B)^{-1}h$ when the vector h is chosen suitably. The rational function expression of the interpolation of F is constructed from the values at the selected abscissas in the interval, then the poles of F in the interval are approximated by the poles of the expression. To evaluate the value of function $F(\mu)$ for a given μ, the banded LU-decomposition may be used. To solve the eigenpairs, the method of Rayleigh quotient inverse iterations is applied from the obtained approximated eigenvalues as the initial values.

1　有理関数補間と係数決定法

以下の定式化では区間内の (一般的な正値の重み関数に対する) 直交多項式を用いる. 応用上は特に「Chebyshev 多項式」が最も簡単で便利である. 以下では, 直交多項式は標準区間 $I=[-1,1]$ 内で定義されているとする.

指定された実区間 $\mu\in[\alpha,\beta]$ と μ の有理型関数 $F(\mu)$ に対して, 変数の線形変換 $\mu=\alpha+(\beta-\alpha)(1+t)/2$ により, 区間を標準区間 $t\in[-1,1]$ に移し,t の有理型関数 $f(t)\equiv F(\mu)$ を定義する.

標準区間 I での f の有理関数近似を $f(t)\approx U(t)/V(t)$ とする. 但し $U(t)=\sum_{\ell=0}^{m} a_\ell\phi_\ell(t)$, $V(t)=\sum_{\ell=0}^{n} b_\ell\phi_\ell(t)$ で, $\phi_\ell(t)$ は区間 I 内の ℓ 次の直交多項式とする. (展開基底に直交多項式をとるのは, 区間内で数値的な線型独立性が高く有利だからである.) いま $N\equiv m+n+1$ と置き,N 次の直交多項式 $\phi_N(t)$ の零点 $t_j,\ j=1,\cdots,N$ を補間点にとった時の関数 f の補間条件は $f(t_j)=\{\sum_{\ell=0}^{m} a_\ell\phi_\ell(t_j)\}\,/\,\{\sum_{k=0}^{n} b_k\phi_k(t_j)\},\ j=1,\cdots,N.$ 本節ではこの条件式の解法を説明する.

注: 最小自乗近似の考え方に従えば $N\neq m+n+1$ の

場合にも, 展開係数を QR-分解や特異値分解 (SVD) を用いて決めることが一応可能であるが, 省略する.

1.1 準備:行列の左零ベクトル

実数行列 C が $(N+1)\times N$ のとき,C の列交換を伴う QR-分解により, $g^TC=0$ となる非零ベクトル g つまり C の左零ベクトルを常に構成できる.

いま C の列交換付き QR-分解を $C\Pi=QR$ とする. 但し Π は列の置換,Q は $(N+1)$-次の直交行列, R は $(N+1)\times N$ で,R の階数 $r\equiv\mathrm{rank}(C)\,(\le N)$ で, さらに $r'\equiv N+1-r\,(\ge 1)$ と置くと, R は最初の r 行目までは対角要素が非零の上三角形で, 残りの r' 個の行は全て零.

$$R=\left[\begin{array}{cccc} * & \cdots & \cdots & \cdots \\ & \ddots & \cdots & \cdots \\ & & * & \cdots \\ \hline & & 0 & \end{array}\right]$$

g が C の左零ベクトルのとき $g=Qw$ と置くと,w は R の左零ベクトル. 一方 R の左零ベクトル w は r' 個の任意定数 $\nu_1,\cdots,\nu_{r'}$ を用いて $w^T=[0,\cdots,0\,|\,\nu_1,\cdots,\nu_{r'}]$ と書けるので, 列ベクトル g は直交行列 Q の最後の r' 個の列の線型結合である.

C の列交換付き QR-分解の具体的な計算手順は, 列交換枢軸選択に続く左側からの Householder 直交変換を各段ごとに行なって行列 C を上三角化を進め, 新たに選択すべき列がなくなるか, 残りの全ての列が (実質的な) 零ベクトルになったら操作を終える [7, 4]. 変換操作の全段数 r は C と R の階数で,C の列の個数 N 以下である. 第 k 行目だけが 1 で他が 0 の単位列ベクトルを e_k とするとき, $e_{r+1},\cdots,e_{N+1}$ の各々に対して, 上三角化の際に用いた r 個の Householder 直交変換 $H_1,\cdots,H_r$ を逆順に全て適用すれば, Q の最後の r' 個の列 $q_{r+1},\cdots,q_{N+1}$ が得られる.

1.2 有理関数近似式の構成法 (その 1)

補間条件式の分母を払うと, 展開係数の線形関係式 $\sum_{\ell=0}^{m} a_\ell\phi_\ell(t_j)-\sum_{k=0}^{n} b_k\phi_k(t_j)f(t_j)=0,\ j=1,\cdots,N$ を得る. いま展開係数を並べたベクトルを $g^T=[-a_0,\cdots,-a_m,b_0,\cdots,b_n]$ と置いて, 条件式を行列形で $g^T\,C=\mathbf{0}$ と書く. 但し C は $(N+1)\times N$ 行列で, その最初の $m+1$ 個の行に $\phi_\ell(t_j)$ を, 残りの $n+1$ 個の行には $\phi_k(t_j)f(t_j)$ を入れて作る. $C\equiv\left[\begin{array}{c}\phi_\ell(t_j)\\ \hline \phi_k(t_j)\,f(t_j)\end{array}\right]$. (あるいは, 次数の小さい直交多項式の係数が g の小さい番号の行に並ぶように, g と C の行番号を付け替える.) 各々の引数に対する各次数の直交多項式の値は, 三項漸化式を利用して計算できる. 行列 C の左零ベクトル g は, 既述の方法で求められる.

$r=\mathrm{rank}(C)\,(\le N)$, $r'=N+1-r\,(\ge 1)$ とすると, $r'=1$ の時には係数ベクトル g の不定性は全体の定数倍のみで, $U(t)/V(t)$ の値は唯一に決まる. $r'>1$ ならば線形結合の $(r'-1)$ 個の余分な自由度を用いると, 原理的には分母分子の展開係数を高次側から消去して有理関数近似の次数を低下することが可能である (説明省略).

注: 一般的には, このように決定された係数を持つ多項式 $U(t)$,$V(t)$ は次数が高いとそれだけ多くの共通あるいは共通に極めて近い因子を持ち, $U(t)/V(t)$ は有理関数の表式として既約でない. そのため見掛けの極 (あるいは零点) が多数出現する傾向を持つ. 関数値は分子と分母の共通零点に於いてもその付近での $U(t)/V(t)$ の極限値として近似され得るが, 分子 $U(t)$, 分母 $V(t)$ の計算精度は零点の付近では桁落ちにより低下するので, 関数値を補間により求める場合には共通零点の存在は損である. (分子と分母が共通あるいは共通に極めて近い因子を持つ場合に得られた有理関数近似式の分子と分母の次数を共通因子の数だけ下げた近似を再度構成する処理は, 今回の応用例では必要がないので省略する.) 今回の応用例である区間内の関数 $f(t)$ の極の位置を数値的に推定する為には, $f(t)$ の (真の) 極の係数が微小でなければ良い.

1.3 有理関数近似式の構成法 (その 1')

一種の規格化として, 補間条件の j 番目の式に因子 $1/\sqrt{1+|f(t_j)|^2}$ を乗じると, $\sum_{\ell=0}^{m} a_\ell\phi_\ell(t_j)c_j-\sum_{k=0}^{n} b_k\phi_k(t_j)s_j=0,\ j=1,\cdots,N$ となる. 但し,$c_j\equiv 1/\sqrt{1+|f(t_j)|^2}$, $s_j\equiv f(t_j)/\sqrt{1+|f(t_j)|^2}$ と定義した. この規格化では補間点 t_j が関数 f の極に一致あるいは近接する場合にも $c_j\approx 0, |s_j|\approx 1$ であるから, 相対精度による閾値で QR-分解を制御するのに向くと思われる.)

対応する係数の関係式は $g^T\widetilde{C}=\mathbf{0}$. $\widetilde{C}$ は $(N+1)\times N$ 行列で, 最初の $m+1$ 行には $\phi_\ell(t_j)c_j$ を, 残りの $n+1$ 行に $\phi_k(t_j)s_j$ を入れる. $\widetilde{C}\equiv\left[\begin{array}{c}\phi_\ell(t_j)c_j\\ \hline \phi_k(t_j)s_j\end{array}\right]$. (あるいは, 低次多項式の係数が前に来るように g と $\widetilde{C}$ の行番号を付け替える.)

以前と同様に $\widetilde{C}$ の左零ベクトル g を求めると分子分母の展開係数を得る.

注: 今回の実験例では有理関数補間式の構成に, この方法 (その 1') を用いた.

1.4 有理関数近似式の構成法 (その 2)

直交多項式が持つ選点直交性を利用すると, 補間係数の線形関係式は分解し, 分母の係数だけの線形の関係式が得られる. その関係式を解いて得た分母の係数から分子の係数が容易に求まることが示せる.

いま直交多項式 $\phi_\ell(t)$ の満たす選点直交関係を $\sum_{j=1}^N w_j\phi_k(t_j)\,\phi_\ell(t_j) \;=\; \eta_\ell\,\delta_{\ell,k}, 0\le k<N, 0\le\ell<N$ とする [10].

分子と分母の補間係数を並べたベクトルを各々 $a^T = [a_0,\cdots,a_m]$, $b^T = [b_0,\cdots,b_n]$ とすると, $g^T = [-a^T|\; b^T]$ で, 関係式 $g^T C = \mathbf{0}$ は基底多項式の選点直交性から次の二組の式に分解する: $b^T K = \mathbf{0}$, $a^T D = b^T J$.
ここで行列 D は $(m+1)\times(m+1)$, 行列 J は $(n+1)\times(m+1)$, 行列 K は $(n+1)\times n$ で,

$$\begin{cases} D_{\ell,s} = \sum_{j=1}^N w_j\phi_\ell(t_j)\phi_s(t_j) = \eta_\ell\delta_{\ell,s}, \\ J_{k,s} = \sum_{j=1}^N w_j\phi_k(t_j)f(t_j)\phi_s(t_j), \\ \qquad\qquad 0\le k\le n,\ 0\le s\le m, \\ K_{k,t} = \sum_{j=1}^N w_j\phi_k(t_j)f(t_j)\phi_{m+1+t}(t_j), \\ \qquad\qquad 0\le k\le n,\ 0\le t\le n-1. \end{cases}$$

(直交多項式が Chebyshev 多項式ならば, 行列 J, K の構成には高速 Cosine 変換も利用可能である.)

以前と同様に,$(n+1)\times n$ の行列 K の左零ベクトル b が構成できる. b を求めた後に対角行列 D を係数とする方程式 $Da = J^T b$ を解いて a が求まる.

注: 補間点の幾つかが区間内の極に一致や近接するとき, 行列 J, K の値をこの方法で構成すると数値計算の誤差 (情報落ち) で精度が低下すると思われるので, 今回の実験例ではこの構成法 (その 2) は採用しなかった. 関数が区間内に極を持たない, あるいは補間点の近くに極が来ない場合の有理関数近似には有用であろう.

1.5 区間内での多項式の零点の求解

分母の n 次多項式を $V(t) = \sum_{\ell=0}^n b_\ell\,\phi_\ell(t)$, 但し $b_n\neq 0$ とする. V の区間 $I = [-1,1]$ 内の零点を求める一つの方法に「随伴行列法」がある. 例えば展開基底の直交多項式が Chebyshev 多項式であれば, 多項式 V の随伴行列 $\Gamma(V)$ は,V の展開係数 b_k $(k = 0,\cdots,n)$ から $2\gamma_j = \delta_{j,|n-2|} - (b_j/b_n)$ を作ると,

$$\Gamma(V) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & & & \\ 1/2 & 0 & 1/2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & 1/2 & 0 & 1/2 \\ \gamma_0 & \cdots & \gamma_{n-3} & \gamma_{n-2} & \gamma_{n-1} \end{bmatrix}.$$

となる [9, 11]. Chebyshev 多項式以外の一般的な直交多項式を基底とする展開の場合も, 対応する随伴行列 $\Gamma(V)$ は (直交多項式の三項漸化式に対応して) 同様の疎な Hessenberg 形を持つ [11].

行列 $\Gamma(V)$ の balancing 後に double-QR 法を適用し, 得られた n 個の (一般には複素数の) 固有値から区間 $[-1,1]$ 内 (あるいはそのごく近傍) のものを選び, 多項式 $V(t)$ の区間内の零点とする.

いま,$\hat{t}$ を $V(t)$ の区間内の単純零点とする. (今回は V が重複零点を持つ状況は考えない.) いま $\hat{t}$ が $U(t)/V(t)$ の真の極ならば $U(\hat{t})\neq 0$ で, $\hat{t}$ での $U(t)/V(t)$ の振舞は $\gamma = U(\hat{t})/V'(\hat{t})$ と置くと $\approx\gamma/(t-\hat{t})$. そこで $V(t)$ の零点 $\hat{t}$ に対し $|\gamma|$ の値が (あるいはより簡便には $|U(\hat{t})|$ の値が) 微小な閾値以下のとき,$\hat{t}$ は見掛けの極であるとして f の極の近似値の候補から除外する. (実験では $|U(\hat{t})|\le\sqrt{\epsilon_{\mathbf{mac}}}\,||b_\ell||_2$ のとき除外した.)

1.6 選点直交多項式を用いる場合

近似の特性を別とすれば, 有理関数近似の分子分母の展開に重みと (一般には複素数の) 選点を指定した「選点直交多項式」を用いても,「直交多項式」を用いた場合と同様の議論ができるが, 省略する.

2 応用例

(実あるいは Hermite) 対称な行列 A, B で,B が正定値の対称定値一般固有値問題 $Av = \lambda Bv$ の全ての固有値 λ は実数である. そこで, 固有値が指定した実区間内にある固有対を求めることにする.

固有対の解法には逆反復 (Inverse Iteration) を用いる. その前提として実数 μ と任意のベクトル h に対して, 線形方程式 $(A-\mu B)x = h$ の解が高速で高精度に求まる手段を仮定する. (例えば, 行列 $(A-\mu B)$ が帯幅の小さい帯行列ならば, 行交換枢軸選択を伴なう LU-分解 [3] が利用できる.)

Rayleigh 商反復法では,μ の初期値 $\mu^{(0)}$ を与え, 適当な初期ベクトル $x^{(0)}$ を右辺とする線形方程式を解いて $x^{(1)}$ とし,$\mu^{(0)}$ を Rayleigh 商で修正して $\mu^{(1)}$ とする. 以下この過程を反復する. (注: LU-分解を利用する場合, 収束性は悪くなるが新たな LU-分解の手間を節約して μ の修正をせずに固定して反復する方法もある.) (注: 但し重複や近接の固有値に対しては, このままだと収束は遅いか収束しない.)

初期値 $\mu^{(0)}$ として固有値あるいは固有値に極めて近い値を与えれば, 逆反復法は通常一回〜数回程度の反復回数で済む. 初期値が悪いと多数回の反復が

必要であったり別の固有解へ跳ぶことも起きる. つまり通常の Rayleigh 逆反復法で区間内にある複数個の固有値を正しく捉えるには, 各固有値の精度の良い初期値を与えることが重要になる.

今回の応用例は, 文献 [1, 2] の複素円周上の値から有理型関数の円周内部にある極を求める方法に類似しているが, 実数の極のみを持つ実数の有理形関数の指定された実区間上の値から区間内部にある極を求めるというものである.

区間内に於いて有理型関数 F の補間点での値から有理関数近似を構成し,F の極の位置を近似する方法を用いる. いま一般的なベクトル h を固定すると, 実数 μ の実関数 $F(\mu)\equiv h^T(A-\mu B)^{-1}h$ は有理関数で, (高々) 一位の極を固有値の位置に持つ [1, 2].

固有値問題の 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-正規直交つまり ${v_\nu}^T B v_\rho = \delta_{\nu,\rho}$ と規格化されているとする. (右肩の T は実あるいは Hermite の転置を表す.) すると $(A-\mu B)^{-1} = \sum_\nu v_\nu(\lambda_\nu-\mu)^{-1}{v_\nu}^T$ である. 有理関数 F は $F(\mu) = h^T(A-\mu B)^{-1}h = \sum_\nu |{v_\nu}^T h|^2(\lambda_\nu-\mu)^{-1}$ となる. F の極 $\mu=\lambda_\nu$ の係数は $-|{v_\nu}^T h|^2$ で, 求めたい固有対の添字 ν に対してこの係数の値が微小でないことが極を数値的に推定する為に必要である. 選点 μ に対する $F(\mu)$ の値は, 右辺 h の逆反復法の線形方程式 $(A-\mu B)x=h$ を解いて内積 $h^T x$ により計算するが, いまは逆反復法の使用を前提としているのだからこれは当然実行可能である.

3 実験

対称帯行列 A,B の次数を K, 帯幅を W(値が $|i-j|>W$ では 0) とする. 直交多項式基底には Chebyshev 多項式を用いる. 分子分母の次数 m,n は等しくとり, 補間点の個数を $N=m+n+1$ とする. 区間内の極として求めた ℓ 番目の近似固有値 $\mu^{(\ell)}$ を初期値とし, 適当な初期ベクトルを右辺として逆反復の 1 回適用で得たベクトル $x^{(\ell)}$ の Rayleigh 商を $\widetilde{\mu^{(\ell)}}\equiv(x^{(\ell)},Ax^{(\ell)})/(x^{(\ell)},Bx^{(\ell)})$ とし, $\delta\mu_{\rm I} = \max_\ell|\widetilde{\mu^{(\ell)}}-\mu^{(\ell)}|$ とする. また近似固有対 $(\mu^{(\ell)},x^{(\ell)})$ に対して $r^{(\ell)}\equiv(A-\mu^{(\ell)}B)x^{(\ell)}$ と置き, $\mu^{(\ell)}$ に最も近い真の固有値までの距離の上限の式 $\sqrt{r^{(\ell)T}B^{-1}r^{(\ell)}}/\sqrt{x^{(\ell)T}Bx^{(\ell)}}$ の全ての ℓ についての最大値を $\delta e_{\rm I}$ とする. 同様に $x^{(\ell)}$ を右辺として $\widetilde{\mu^{(\ell)}}$ を用いた逆反復の一回適用で $\widetilde{x^{(\ell)}}$ を作り, その Rayleigh 商を $\widetilde{\widetilde{\mu^{(\ell)}}}$ とし,$\delta\mu_{\rm II} = \max_\ell|\widetilde{\widetilde{\mu^{(\ell)}}}-\widetilde{\mu^{(\ell)}}|$ とする. 近似固有対 $(\widetilde{\mu^{(\ell)}},\widetilde{x^{(\ell)}})$ に対し $\widetilde{\mu^{(\ell)}}$ に最も近い真の固有値との距離の上限式の全ての ℓ についての最大値を $\delta e_{\rm II}$ とする.

例: $K=10^5, W=15$, 帯内の行列要素は $a_{i,j}\equiv\max(i,j)-1$, $b_{i,j}\equiv1/(i+j-1)+\delta_{i,j}$ で, 固有値を求める区間は $[-50,50]$ とした. (この例題の固有値の分布は良く分離している.) $F(\mu)$ を定義するベクトル h は全成分を 1 にとった. その結果の概略を下の表に示す. 上半分は倍精度 (64bit), 下半分は四倍精度 (128bit) での計算例である. 倍精度では近似次数が 300 の場合は極の個数 188 が正しく出ていないが, その場合を除くと逆反復二回で固有対が高精度に得られたことが判る. (表は最大値を挙げているが, 倍精度の次数 300 と 400 の場合でも求まった固有対のうちで精度の極めて悪かったものはごく少数であった.)

一個の極には位置と強度の二個の自由度があり, 区間外部にある極も F の関数値には影響するので, 補間点の個数は区間内の極の個数の二倍よりも (十分な割合で) 多くとる必要がある. この例の場合の補間点と極の個数の比は, $m=300$ のとき $N=601$ で約 3.2, $m=400$ のとき $N=801$ で約 4.3, $m=500$ のとき $N=1001$ で約 5.3, などである. (倍精度計算にとっては, この例は極の個数が多過ぎて近似が困難であったように思われる.)

m=n	極の個数	逆反復 1 回目		逆反復 2 回目	
		$\delta\mu_{\rm I}$	$\delta e_{\rm I}$	$\delta\mu_{\rm II}$	$\delta e_{\rm II}$
300	184	1.3E+0	5.7E+2	6.4E-1	8.9E-1
400	188	3.6E-7	3.6E-2	5.0E-9	5.0E-9
500	188	9.0E-9	8.9E-4	3.1E-12	2.7E-11
600	188	1.1E-11	9.5E-7	3.7E-13	2.7E-11
700	188	4.9E-10	4.8E-5	5.6E-13	2.8E-11
300	188	7.6E-15	8.4E-11	2.1E-26	2.1E-26
400	188	5.2E-26	5.1E-21	2.0E-30	2.7E-29
500	188	6.5E-27	6.4E-22	1.8E-30	2.6E-29

4 その他の考察

4.1 重複または近接する固有値への対処

F の全ての極は常に (高々) 一位である. 固有値が重複あるいは数値的に非常に近接した固有対に対応する F の極は一つに重なって見えるので, その様な状況にある固有対の一つだけを求めてその他を見過ごし兼ねない. もしも区間内の重複度を込めた固有値の全個数が予め判っていれば, 固有対の列挙もれ防止に有用である. (その他にも有理関数近似の必要

な次数を見積もったり, 固有値が多過ぎ近似が困難な場合に区間を再分割する判断にも利用できる. 区間内の重複度を込めた固有値の個数は, もしも改訂 Cholesky 分解 $(A-\mu B)=LDL^T$ が効率良く実施できれば, 二分法の原理である Sylvester の慣性則「μ より小さい固有値の個数は D の負の対角要素の個数に等しい」から求められる [8].)

固有値が重複や近接する分布状況にある固有対を逆反復法を用いて分離するには慎重な配慮が必要になる. 固有値の分布状況は通常の固有値解法 (QR 反復法, 二分法など) を用いて固有値を求める場合には良く判るが, 関数 F の極から直接固有値を求める場合には判らないので, 逆反復法の過程以降での工夫が必要になる.

もしも逆反復の過程で帯行列 $(A-\mu B)$ の上質な LU-分解が利用できれば, 原理的には固有値 μ に属する固有空間の次元が $(A-\mu B)$ の階数不足度として得られ [7], 固有値に重複がある場合には固有空間を張る一次独立なベクトルを構成することもでき, その後の固有対の品質改良には (B に関する) 再直交化あるいは部分空間法 (Subspace method) が使える.

重複あるいは近接が認識された固有値 μ に対する処方としては, 相互に微小にずらした値を近接グループ内の固有値の初期値として与え, 線形独立な初期ベクトルをグループ内の固有値の個数だけ用意し, 増幅されたベクトルには B-再直交化を施しながら遂次に逆反復する方法 (再直交化付き逆反復法) がある [6]. その他にも Rayleigh-Rits 法つき同時逆反復 [8] でグループ内の s 個の固有対を求める方法 (同時逆反復の毎に Rayleigh 商行列 $\alpha_{i,j}=v^{(i)T}Av^{(j)}$, $\beta_{i,j}=v^{(i)T}Bv^{(j)}$ を係数とする s 次元の一般固有値問題を解いて, 新しい固有値の近似値と s 個のベクトルの線形結合を作り直す. 部分空間法の一種) などがある.

4.2 $F(\mu)$ の減次の試み

既に求めた固有対 (の全部または一部) の添字の集合を Ω とする. 但し, 固有ベクトルは B-正規直交に規格化されているとする. 関数 $\widehat{F}$ を $\widehat{F}(\mu)=F(\mu)-\sum_{\omega\in\Omega}|h^Tv_\omega|^2(\lambda_\omega-\mu)^{-1}$ と定義すると, $\widehat{F}$ は F から Ω に属する添字の固有対の寄与だけを除いたものになる. これは一種の減次 (deflation) である.

$\widehat{F}(\mu)$ の値は同じ補間点 μ での $F(\mu)$ の値から数学的には簡単に計算できるが, もしも μ の値が F のどれかの極 λ_ω に一致すると引き算の結果は不定になり, 一致しなくても近接のときは値の相殺による桁落ちで相対精度が著しく低下するので, この定義による $\widehat{F}(\mu)$ の補間点に於ける値から極の近似値を求めることは数値的に困難と思われる. (但し, 寄与を除きたい全ての固有対の固有値が, いま考察している区間から離れていれば, 区間内の補間点との一致や近接は起こらないので, この減次により区間外部の隣接する既知の固有対からの影響が減るので, 有理関数近似式の精度を上げあるいは分子分母の次数を減らす用途には使えるであろう.)

そこでいま別の減次の方法を試みる. 任意ベクトル h から新しいベクトル $\widehat{h}=h-B\sum_{\omega\in\Omega}v_\omega(v_\omega^Th)$ を作ると $\widehat{h}$ は添字 ω が Ω に属する固有対とは直交 ${v_\omega}^T\widehat{h}=0$ だが, 添字が Ω に属さない固有対との内積は h と同じである. そのとき $\widehat{F}(\mu)=\widehat{h}^T(A-\mu B)^{-1}\widehat{h}$ によっても関数 F の減次 $\widehat{F}$ が定義できて, 添字が Ω に属する固有対の寄与だけを F から除去したものになる. $\widehat{F}(\mu)$ の計算には, 既に同じ補間点 μ で $F(\mu)$ を計算した際に構成した $(A-\mu B)$ の LU-分解が再利用できる.

固有値が重複や高度に近接している場合でも, 減次操作により, 既に求めた固有対の寄与を除いていけば, 原理的には固有対の段階的な分離が可能であろう. 但し, 固有ベクトルを求めるための逆反復の過程では, 重複や高度に近接している固有値を持つ固有対の固有ベクトルとの間に B-直交化が必要である. (任意のベクトル r からベクトル $\widehat{r}$ を $\widehat{r}=r-\sum_{\omega\in\Omega}v_\omega({v_\omega}^TBr)$ により作ると, $\widehat{r}$ は Ω に属する添字 ω を持つ固有対と B-直交 ${v_\omega}^TB\widehat{r}=0$ になる.)

4.3 ベクトル h の選択について

$F(\mu)$ を定義するベクトル h は, 固有値が区間内にある全ての固有対に対して, 固有ベクトルと関数 F の定義に用いる h の内積 ${v_\omega}^Th$ が微小にならないことが望ましい. ベクトル h を無作為にとった場合に, h との内積が偶然に微小となった固有ベクトルの固有対は F の極へ寄与しないので F の値からは検出できない. その場合にも無作為に新たなベクトル h を採り直せば, 新しい内積は微小とならずに検出できる可能性が高い. また r 個の無作為なベクトル $h^{(e)}$, $e=1,\cdots,r$ を選び, $h^{(e)}$ に対応する F の和を作ると, $F(\mu)=\sum_{e=1}^r h^{(e)T}(A-\mu B)^{-1}h^{(e)}=\sum_\nu(\sum_{e=1}^r|{v_\nu}^Th^{(e)}|^2)/(\lambda_\nu-\mu)$ となり, F は有理関数で全ての極は (高々) 一位で固有値に等しく, 添字 ω を持つ固有対の極 λ_ω に対する寄与は r 個の内積の自乗和 $\sum_{e=1}^r|v_\omega^Th^{(e)}|^2$ になる. 無作為に採った r 個のベクトルと固有ベクトル v_ω の r 個の内積 ${v_\omega}^Th^{(e)}$ が全て微小になることは極めて稀なことであろう.

あるいは「微小でない」とは値が各種の計算誤差との関係で決まる閾値よりも十分に大きいことだから, もしも利用する演算精度 (浮動小数点数の有効桁数) を増やせれば「適切な閾値」は小さくなり, 無作為にとったベクトル h が固有ベクトルとの内積を微小にしない条件を満し易くなり, 固有値の検出を失敗する可能性は減る.

4.4 固有値が区間内の固有対成分の濃縮

$(A-\mu B)^{-1}=\sum_\nu v_\nu {v_\nu}^T/(\lambda_\nu-\mu)$ だから, 任意の μ_i, μ_j に対し $B(A-\mu_i B)^{-1}$ と $B(A-\mu_j B)^{-1}$ は可換. いま μ_i, $i=1,\cdots,k$ を全ての零点とする k 次の主係数 1 の多項式 $\varphi_k(\lambda)=\prod_i(\lambda-\mu_i)$ を定義すると, $\prod_i\{B(A-\mu_i B)^{-1}\}=B\sum_\nu v_\nu {v_\nu}^T/\prod_i(\lambda_\nu-\mu_i)=B\sum_\nu v_\nu {v_\nu}^T/\varphi_k(\lambda_\nu)$. この式を任意のベクトル r に作用させてベクトル h を定義する. $h=[\prod_{i=1}^k\{B(A-\mu_i B)^{-1}\}]r=B\sum_\nu v_\nu({v_\nu}^T r)/\varphi_k(\lambda_\nu)$. すると $|{v_\omega}^T h|/|{v_\omega}^T r|=|\varphi_k(\lambda_\omega)|^{-1}$.

いま区間内での $|\varphi_k(\mu)|$ の最大値を M とすると, 区間内に固有値を持つ固有対の添字 ω に対して, $|{v_\omega}^T h|/|{v_\omega}^T r|\geq M^{-1}$. 固有値が区間から離れた固有対の添字 η については $|{v_\eta}^T h|/|{v_\eta}^T r|$ は $\lambda=\lambda_\eta$ と区間との為す形状比 $t=\frac{\lambda-(\alpha+\beta)/2}{(\beta-\alpha)/2}$ に関して漸近的に $|t|$ の逆 k 乗で減衰する.

例えば $\varphi_k(\lambda)$ として区間 $[\alpha,\beta]$ に於ける k 次 ($k\geq 1$) の主係数 1 に規格化した Chebyshev 多項式 $T_k(t)/2^{k-1}$ をとれば $M^{-1}=2^{k-1}(\frac{\beta-\alpha}{2})^{-k}$ である. また固有値が区間外側にある固有対の添字を ρ とすれば, $T_k(|t|)=\cosh(k\cosh^{-1}(|t|))$ で, $|v_\rho^T h|/|v_\rho^T r|=2^{k-1}(\frac{\beta-\alpha}{2})^{-k}/T_k(|t|)$. 区間から離れた (つまり $|t|\gg 1$ の) 固有値を持つ固有対の添字 ρ に対して $|{v_\rho}^T h|/|{v_\rho}^T r|$ の値は漸近的に $2^{k-1}(\frac{\beta-\alpha}{2})^{-k}|t|^{-k}=O(|t|^{-k})$ のように減衰する. よって相対的に, 区間内に固有値を持つ固有対の成分が強められ, 区間から離れた固有値を持つ固有対の成分は弱まる.

あるいは, 区間内で固有対に対する特性が均一に近くなるよう, 形状比の多項式 $1+\varepsilon T_k^2(t)$(但し $\varepsilon>0$) の零点から $\varphi_{2k}(\lambda)$ を作ることも考えられるが, 零点は複素数になる.

注意: いま μ_j に重複がないとき, 恒等式 $1/\varphi_k(\lambda)=\sum_{i=1}^k\gamma_i/(\lambda-\mu_i)$, 但し $\gamma_i\equiv 1/\varphi_k'(\mu_i)$ を用いると, $\prod_i\{B(A-\mu_i B)^{-1}\}=B\sum_\nu v_\nu {v_\nu}^T/\varphi_k(\lambda_\nu)=B\sum_\nu v_\nu {v_\nu}^T\sum_i\gamma_i/(\lambda_\nu-\mu_i)$. 総和の順序を交換して $=\sum_i\gamma_i B\sum_\nu v_\nu {v_\nu}^T/(\lambda_\nu-\mu_i)=\sum_i\gamma_i\{B(A-\mu_i B)^{-1}\}$. よって, ベクトル r に異なる因子 $B(A-\mu_i B)^{-1}$ を逐次的に k 回作用させた結果は, ベクトル r に異なる因子を一回作用させた結果を k 個集めて重み γ_i で合計したものに等しい.

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] Martin R.S. and Wilkinson J.H.: ”Solution of Symmetric and Unsymmetric Band Equations and the Calculations of Eigenvectors of Band Matrices”, Numer. Math. **v9** (1967),pp.279-301. *Also collected in* Wilkinson J. H. and Reinsch C.: *Handbook for Automatic Computation, Vol.II, Linear Algebra*, Springer-Verlag (1971), pp.70-92.

[4] Golub G. H. and Van Loan C. F.: *Matrix Computations*, 3rd Ed., John Hopkins Univ. Press (1996).

[5] 二宮 市三 監修: *NUMPAC(名古屋大学数学パッケージ)*, 「ライブラリ・プログラム利用の手引 (数値計算編)」,Vol.1-3, 名古屋大学大型計算機センター (1991).

[6] 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).

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

[8] 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)

[9] 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.

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

[11] 村上 弘: 「代数方程式の多項式基底展開と行列固有値解法」, 情報処理学会研究報告 2006-HPC-106 (2006 年 6 月), pp.13-18.

[12] 石岡 圭一: 「スペクトル法による数値計算入門」, 東京大学出版会 (2004 年)