

## 固有パスの複素分岐現象の解析

鈴木智博 †, 樋口健 †, 伊藤一帆 †, 鈴木嘉彦 †

† 山梨大学工学部      ‡ NTT 移動通信網株式会社

ホモトピー法の原理を用いて行列の固有値問題を解くことは、一次元の自由度を持つ解曲線を追跡することに他ならない。この解曲線は固有パスと呼ばれる。対象とする実数行列を  $A$  とし、固有値、固有ベクトルが既知な行列を  $D$  として  $A(t) = (1-t)D + tA$  なる行列を作る。本手法の原理は、この行列のパラメータ  $t$  を 0 から 1 まで連続的に変化させることによって  $A$  の固有値、固有ベクトルを求めようとするものである。

一般に  $A$  は複素固有値を持つためこのパスが実数空間から複素空間へ、またはその逆へと遷移する現象は避けられない。このような点は分岐点と呼ばれる。今回、この分岐点と固有値の重複度の関係から、パスの幾何学的な振舞いと固有値の代数的な性質の関連を明確にした。

### An Analysis of Complex Bifurcation Phenomenon of Eigenpath

Tomohiro SUZUKI†, Takeshi HIGUCHI†, Kazuho ITO†, Yoshihiko SUZUKI†

† Faculty of Engineering, Yamanashi University

‡ NTT Mobile Communications Network Inc.

By applying homotopy method, the eigenvalue problem for matrices reduces to the problem of tracing algebraic curves which are called eigenpaths. Let  $A(t)$  be defined by  $A(t) = (1-t)D + tA$ , where  $A$  is a real matrix and  $D$  is a real matrix of which eigenvalues and eigenvectors are known. The principle of this method is that the parameter  $t$  of  $A(t)$  is modified continuously in order to find the eigenvalues and the eigenvectors of  $A$ .

Since  $A$  generally has complex eigenvalues, the eigenpath transitions from the real space to the complex space vice versa. The transition point from real to complex or from complex to real is called the bifurcation point. We make clear the relations between the geometric behavior of the paths at the bifurcation points and the multiplicities of the eigenvalues of  $A(t)$ .

# 1 はじめに

本文は実数非対称行列の固有値、固有ベクトルを解くために Li 等によって提案された方程式系における複素分岐現象について議論する。一般に固有値問題は行列の変形を繰り返すことによって対角要素を固有値に収束させる反復解法がほとんどであるが、本手法は固有方程式を直接的に解いていくという特徴がある。

本手法による解法では固有方程式を解くことが、互いに依存性の無い解曲線を一本ずつ追跡していく問題となり、非常に粒度の大きい並列性を持っていることになる。

しかし、一般に実数非対称行列は複素固有値を持つため、解曲線の追跡の際にこれが実数空間から複素空間へ、またはその逆へと遷移する現象は避けられない。今回、Henderson 等の分岐理論を基に固有値の重複度と解曲線の特異解の関係を明確にした。これによって解曲線の振舞いの幾何学的なイメージと行列の固有値との対応が明確になる。

## 2 準備

まず、本文で用いる固有値、固有ベクトルの計算方法の概略を説明する。

いま、対象とする行列を  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  とする。この行列の固有値、固有ベクトルを求めるために解くべき方程式系をつぎに示す<sup>[1]</sup>。

$$F(w, t) = \begin{bmatrix} \{A(t) - \lambda I\}z \\ \frac{1}{2}(z^T z - 1) \end{bmatrix} = 0. \quad (2.1)$$

ここで、 $A(t) = (1-t)D + tA$ ,  $\lambda \in \mathbb{C}$  は  $A(t)$  の固有値、 $z = (z_1, \dots, z_n)^T \in \mathbb{C}^n$  は固有ベクトルである。また、 $D \in \mathbb{R}^{n \times n}$  はその固有値、固有ベクトルが既知であるような行列であり以後、初期行列と呼ぶ。(2.1) では  $w = (z_1, \dots, z_n, \lambda)^T$  とし、すべての変数を  $w$  とパラメータ  $t$  とに分けている。また  $n+1$  番目の式は固有ベクトル  $z$  の正規化条件である。

本手法は  $t=0$  のときの (2.1) の既知な解から、 $\mathbb{C}^{n+1} \times [0, 1]$  で定義される空間内の (2.1) の解曲線 (固有パス) を  $t=1$  となるまで追跡することによって  $A$  の固有値、固有ベクトルを求めようとするものである。図 1 に解曲線の例を示す。

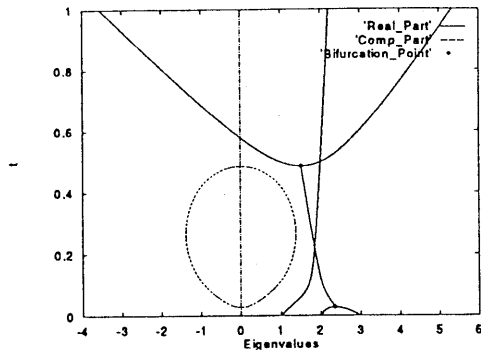


図 1: 解曲線の  $t-\lambda$  平面への射影

### 2.1 定義

つぎに以降の解析に用いられる幾つかの言葉の定義を示す<sup>[2]</sup>。ここで、 $F_w, F_t$  は  $F$  の  $w, t$  による偏微分であり以下のとおりである。

$$F_w = \begin{bmatrix} A(t) - \lambda I & -z \\ z^T & 0 \end{bmatrix}. \quad (2.2)$$

$$F_t = \begin{bmatrix} (A - D)z \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (2.3)$$

また、 $F_w^0 \equiv F_w(w^0, t^0)$ ,  $F_t^0 \equiv F_t(w^0, t^0)$  である。

#### 定義 2.1 (Regular Solution)

点  $(w^0, t^0)$  が (2.1) の解であり、かつ  $F_w^0$  が正則であるとき、(2.1) の正則解という。

#### 定義 2.2 (Simple Singular Solution)

点  $(w^0, t^0)$  が (2.1) の解であり、 $F_w^0$  は正則でなく、かつ、

$$\dim \mathcal{N}(F_w^0) = \text{codim} \mathcal{R}(F_w^0) = 1, \quad (2.4)$$

であるとき、(2.1) の単純特異解という。

#### 定義 2.3 (Simple Fold Point)

(2.1) の単純特異解  $(w^0, t^0)$  は、

$$F_t^0 \notin \mathcal{R}(F_w^0) \quad (2.5)$$

であるとき、(2.1) の単純ひだ点である。

**定義 2.4 (Simple Quadratic Fold)**

(2.1) の単純ひだ点  $(w^0, t^0)$  は,

$$\psi^T F_{ww}^0 \phi \phi \neq 0 \quad (2.6)$$

であるとき, (2.1) の単純二次ひだ点である. ここで,  $\phi \in \mathbb{R}^{n+1}$ ,  $\psi \in \mathbb{R}^{n+1}$  は次式を満たす非零ベクトルである.

$$\psi^T F_w^0 = 0^T \quad (2.7)$$

$$F_w^0 \phi = 0 \quad (2.8)$$

**2.2 定理**

以上で定義された点において以下の定理が成り立つ<sup>[2]</sup>.

**定理 2.1**

ある  $\delta > 0$  に対して, 各正則解  $(w^0, t^0)$  を通る解の一意なめらかなパス

$$\Gamma^0 : \{w(t), t\}, \quad |t - t^0| < \delta \quad (2.9)$$

が存在する.

上の定理は, 点  $(w^0, t^0)$  が (2.1) の正則解ならば, (2.1) の解曲線を  $t$  をパラメータとして決定できることを表わしている.

**定理 2.2**

単純ひだ点  $(w^0, t^0)$  の近傍において解のなめらかな実数パス  $\Gamma^I$  が存在する.

$$\Gamma^I \{w(s), t(s)\}, \quad |s - s^0| < \delta \quad (2.10)$$

ここで  $s$  はパラメータであり,  $w(s^0) = w^0, t(s^0) = t^0$  であり,  $s \neq t$  である. さらに,

$$i(s^0) = \left. \frac{dt(s)}{ds} \right|_{s=s^0} = 0, \quad (2.11)$$

$$\dot{w}(s^0) = \left. \frac{dw(s)}{ds} \right|_{s=s^0} \in \mathcal{N}(F_w^0). \quad (2.12)$$

この定理はひだ点における実数パスの存在を示している.

**定理 2.3 (Complex Bifurcation) <sup>[1]</sup>**

単純二次ひだ点  $(w^0, t^0)$  において解のなめらかなパスは分岐する.  $\gamma$  を実数パス  $\Gamma^I$  の接線ベクトルとすると, 分岐枝  $\Gamma^{II}$  の接線ベクトルは  $i\gamma$  の方向にある. (図 2 参照)

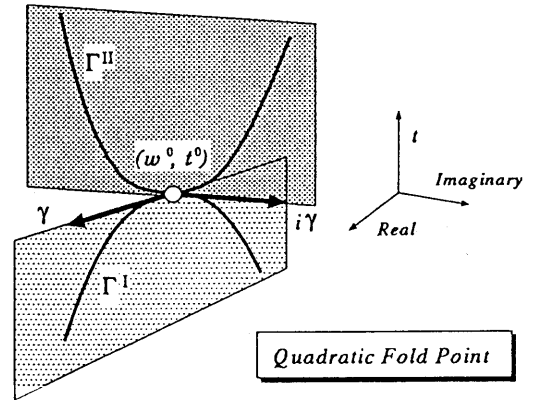


図 2: 複素分岐

**3 固有値の重複度**

固有値の重複度には代数的重複度と幾何学的重複度がある. 以下にそれぞれの重複度の定義を示す.

**定義 3.1 (Algebraic Multiplicity)**

行列  $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$  の固有値に重複がある場合を考慮すると, 一般にその特性多項式は

$$\det(sI - A) = (s - \lambda_1)^{m_1} (s - \lambda_2)^{m_2} \cdots (s - \lambda_\sigma)^{m_\sigma}$$

と表わせる. このとき指数  $m_i$  を固有値  $\lambda_i$  ( $i = 1, \dots, \sigma$ ) の代数的重複度という.

**定義 3.2 (Geometric Multiplicity)**

行列  $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$  が異なる固有値  $\lambda_1, \dots, \lambda_\sigma$  を持つものとする. このとき,

$$\alpha_i \equiv n - \text{rank}[A - \lambda_i I], \quad i = 1, 2, \dots, \sigma$$

により定まる自然数  $\alpha_i$  を固有値  $\lambda_i$  の幾何学的重複度という.

以下,  $m, \alpha$  をそれぞれ  $A(t^0)$  の固有値  $\lambda^0$  の代数的重複度, 幾何学的重複度とする.

### 3.1 $m = 1$ の固有値

固有値  $\lambda^0$  の代数的重複度が 1 の時, 点  $(w^0, t^0)$  は正則解となる.

(2.1) の解曲線のほとんどは正則解である.

### 3.2 $m = 2$ の重複固有値

固有値  $\lambda^0$  の代数的重複度が 2 以上では  $(w^0, t^0)$  は正則解にはならない.  $m = 2$  の場合, 幾何学的重複度は 1 または 2 となる. また,  $A$  が実数非対称行列であることから, この場合の固有値, 固有ベクトルはすべて実数であり,  $F^0, F_w^0, F_t^0$  もすべて実数空間内で考えればよい.

#### 3.2.1 $m = 2, \alpha = 1$ の場合

まず,  $\lambda^0$  の重複度が  $m = 2, \alpha = 1$  の場合, この点が単純特異解であることを示す.

幾何学的重複度の定義より,

$$\text{rank}[A(t^0) - \lambda^0 I] = n - 1$$

である. また, 他の固有値の重複度はすべて 1 であるとすれば, ある正則行列  $P$  を用いて行列  $A(t^0) - \lambda^0 I$  の Jordan 標準形は以下ようになる.

$$P^{-1}[A(t^0) - \lambda^0 I]P = \begin{bmatrix} 0 & 1 & & 0 \\ & 0 & & \\ & & J_2 & \\ 0 & & & \ddots \\ & & & & J_{n-1} \end{bmatrix} \quad (3.1)$$

ここで,  $J_i$  ( $i = 2, \dots, n-1$ ) は他の固有値の Jordan 細胞である.

$F_w^0$  のランクを調べるためにまず, 行列  $[A(t^0) - \lambda^0 I, z^0]$  のランクを調べる. 行列  $A(t^0) - \lambda^0 I$  と行列  $[A(t^0) - \lambda^0 I, z^0]$  のランクが同じならば, 次式を満すような非零ベクトル  $x \in \mathbf{R}^n$  が存在する.

$$\{A(t^0) - \lambda^0 I\}x = z^0. \quad (3.2)$$

行列  $P$  を用いて上式を満すような非零ベクトル  $x$  が存在することは明らかである. したがって,

$\text{rank}[A(t^0) - \lambda^0 I, z^0] = n - 1$ . また  $z^0$  は固有値  $\lambda^0$  に対応する固有ベクトルであることから, 結局,

$$\text{rank} F_w^0 = \text{rank} \begin{bmatrix} A(t^0) - \lambda^0 I & -z^0 \\ z^{0T} & 0 \end{bmatrix} = n. \quad (3.3)$$

(3.3) より,  $m = 2, \alpha = 1$  の固有値  $\lambda^0$  の点  $(w^0, t^0)$  は単純特異解である.

つぎにこの点が単純ひだ点であると仮定したとき, 単純二次ひだ点であることを示す.

(2.7), (2.8) の  $\psi, \phi$  を,

$$\psi = \begin{bmatrix} g \\ \mu \end{bmatrix}, \quad \phi = \begin{bmatrix} h \\ \nu \end{bmatrix}, \quad g, h \in \mathbf{R}^n, \quad \mu, \nu \in \mathbf{R} \quad (3.4)$$

と表わす. このとき  $\mu = 0$  は明かなので, (2.6) の左辺は,

$$\psi^T F_{ww}^0 \phi = -2\nu g^T h. \quad (3.5)$$

上式から, 点  $(w^0, t^0)$  が単純二次ひだ点となるためには,

$$\nu \neq 0 \quad \text{and} \quad g^T h \neq 0, \quad (3.6)$$

でなければならない.

$\nu \neq 0$  を示す. (2.8) より,

$$F_w^0 \phi = \begin{bmatrix} \{A(t^0) - \lambda^0 I\}h - \nu z^0 \\ z^{0T} h \end{bmatrix} = 0, \quad (3.7)$$

であるから,  $\nu = 0$  であるならば  $h$  は固有値  $\lambda^0$  に対応する固有ベクトルである.  $\lambda^0$  の幾何学的重複度は 1 であるから,  $h = cz^0$  ( $c \in \mathbf{R}, c \neq 0$ ) である. しかしこれは,  $z^{0T} h = c(z_1^{02} + \dots + z_n^{02}) = c = 0$  という矛盾を導く. よって,  $\nu \neq 0$  である.

つぎに  $g^T h \neq 0$  を示す. (2.7) に右から  $P$  をかけて次式を得る.

$$g^T P = [0, 1, 0, \dots, 0]. \quad (3.8)$$

また,  $\{A(t^0) - \lambda^0 I\}z^0 = 0$  に左から  $P^{-1}$  をかけて次式を得る.

$$P^{-1}z^0 = [1, 0, \dots, 0]^T. \quad (3.9)$$

(2.8) に左から  $P^{-1}$  をかけたものと (3.9) から次式を得る.

$$P^{-1}h = [* , \nu, 0, \dots, 0]^T. \quad (3.10)$$

結局, (3.8), (3.10) から,

$$g^T h = (g^T P)(P^{-1}h) = \nu \neq 0. \quad (3.11)$$

以上より,  $m = 2, \alpha = 1$  の固有値  $\lambda^0$  の点  $(w^0, t^0)$  は単純二次ひだ点である.

### 3.2.2 $m = 2, \alpha = 2$ の場合

$\lambda^0$  の重複度が  $m = 2, \alpha = 2$  の場合, この点が単純特異解であることを示す.

幾何学的重複度の定義より,

$$\text{rank}[A(t^0) - \lambda^0 I] = n - 2$$

である. 上式から固有値  $\lambda^0$  に対応する固有ベクトルは  $z_1^0, z_2^0$  の 2 つが存在することが分る. ある正則行列  $P$  を用いて行列  $A(t^0) - \lambda^0 I$  の Jordan 標準形は以下ようになる.

$$P^{-1}[A(t^0) - \lambda^0 I]P = \begin{bmatrix} 0 & & & & 0 \\ & 0 & & & \\ & & J_2 & & \\ 0 & & & \ddots & \\ & & & & J_{n-1} \end{bmatrix} \quad (3.12)$$

$F_w^0$  のランクを調べるために行列  $[A(t^0) - \lambda^0 I, z^0]$  のランクを調べる. ここで,  $z^0 = az_1^0 + bz_2^0$  ( $a, b \in \mathbb{R}$ ) とする. 行列  $P$  を用いて (3.2) を満たすような非零ベクトル  $x \in \mathbb{R}^n$  が存在しないことが言えるので,  $\text{rank}[A(t^0) - \lambda^0 I, z^0] = n - 1$  である. また  $z^0$  は固有値  $\lambda^0$  に対応する固有ベクトルであることから, 結局,

$$\text{rank} F_w^0 = \text{rank} \begin{bmatrix} A(t^0) - \lambda^0 I & -z^0 \\ z^{0T} & 0 \end{bmatrix} = n. \quad (3.13)$$

上式より,  $m = 2, \alpha = 2$  の固有値  $\lambda^0$  の点  $(w^0, t^0)$  は単純特異解である.

## 4 解曲線の追跡

行列  $A$  の固有値, 固有ベクトルを求めるためには (2.1) の解曲線を  $t = 0$  から  $t = 1$  まで追跡する必要がある. 今回, 解曲線の追跡方法として球面法<sup>[3]</sup>を用いた.

### 4.1 球面法

球面法は (2.1) につきの球面を表す式を連立させ, これを Newton 法で収束させるものである. (図 3 参照)

$$(z_1 - c_1)^2 + \cdots + (z_n - c_n)^2 + (\lambda - c_{n+1})^2 + (t - c_{n+2})^2 = r^2 \quad (4.1)$$

(2.1) と (4.1) の交点を求め,  $(c_1, \dots, c_{n+1})$  とこの交点を結ぶ直線上に予測点を置き, 交点を中心に置き換え Newton 法で解曲線と球の交点を求めるという動作を繰り返すことにより解曲線を追跡するというのが球面法の原理である.

球面法の特徴として, 収束性がよいこと, 逆戻りや他の解曲線への乗り移りの危険性が少ないことが挙げられる.

また, 変曲点近傍以外では Newton 法の反復回数は少なくなるが, この場合, 球の半径を表わす  $r$  を大きくすることにより解曲線追跡の全体的な効率を上げることが出来る.

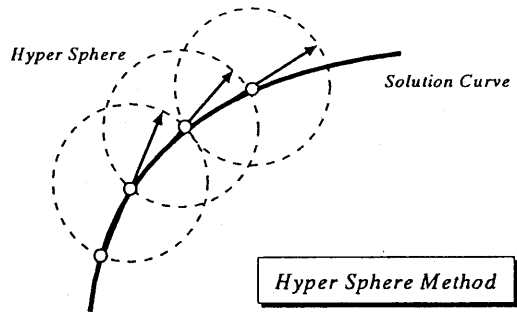


図 3: 球面法

### 4.2 分岐点の探索

$m = 2, \alpha = 1$  の重複固有値の点は単純二次ひだ点であり, この点において解曲線が複素分岐をすることはすでに述べた.

解曲線は離散的に追跡されるため, 分岐点を見付けるための手続きを設けなければ追跡の際にこの点を通り過ぎてしまう. 分岐点は特異解であるため厳密に探索することは難しいが, ある程度厳密

に探索しておかなければ実数固有パスが複素固有パスに分岐する際、複素分岐枝上に解を見付けることは困難となる。現在、有力な分岐点探索のアルゴリズムは開発されていない。

## 5 簡単な例

図1はつぎの  $A, D$  を用いて得られた解曲線の固有値  $\lambda$  とパラメータ  $t$  のみをプロットしたものである。

$$A = \begin{bmatrix} 9 & 12 & 18 \\ 2 & 6 & 6 \\ -4 & -8 & -11 \end{bmatrix}$$

$$D = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{bmatrix}$$

図1の  $\circ$  で示された点に分岐点である。 $D$  の固有値 2, 3 から出発した実数固有パスは  $t = 0.03$  付近で複素固有パスに分岐し、 $t = 0.48$  付近で再び実数固有パスに分岐している。これらの点の近傍において数値的に (2.5), (2.11), (2.12) が成り立つことを確認した。

行列  $A(t)$  は  $t = 0.5$  で  $m = 2, \alpha = 2$  の重複固有値を持つ。 $D$  の固有値 1 から出発した実数固有パスと  $t = 0.48$  で分岐した実数固有パスが  $t = 0.5$  で交差している。

この点において  $\text{rank} F_w, \text{rank}[F_w, F_t]$  を調べるとどちらも 3 となり (2.5) が成り立たない、つまり単純ひだ点でないことが分る。また、この点も特異解であるから Newton 法では探索できないはずであるが解曲線は離散的に追跡されるためこの点を通過し延長されている。

## 6 まとめ

今回、固有値の重複度に注目して (2.1) の解曲線の特異解の解析を行なった。特に実用上問題となる代数的重複度が 2 の固有値について、幾何学的重複度が 1 の場合と 2 の場合について Jordan 標準形を用いた簡単な変形で特異解であることを示した。これによって、Henderson 等の複素分岐理論と Li 等の固有値問題の解法における分岐現象の対応がより明確になったと言える。

代数的重複度が 3 以上の固有値に関する解析は実用上あまり意味がないが、同様の解析で比較的容易に分岐の条件や分岐枝の方向などを知らることが出来るはずである。

また  $m = 2, \alpha = 2$  の固有値の特異解は分岐点ではないという意味では解曲線の追跡の際には意味が無いが、この点の近傍においては Jacobian が非常に小さくなっているため球面法の収束性が悪くなる。しかし、解曲線を離散的に追跡していることと、この特異解が解曲線上に発生すると自体が極めて少ないことから、この点に関する特別なアルゴリズムは設けていない。

本手法は、一般的に固有値問題の解法に用いられる QR 法に比べて大きな粒度の並列性を持つという点で興味深い。QR 法に比べると明らかに効率が悪いが、キングサイズの行列に適用した場合に解曲線の振舞いによってはいくつかの固有値を高速に計算出来る可能性がある。

分岐点探索のアルゴリズムの開発、複素固有パスの追跡方法の改善、初期行列の選び方などが本手法の今後の課題である。

## 参考文献

- [1] T. Y. Li, Zhonggang Zeng and Luan Cong, *Solving Eigenvalue Problems of Real Nonsymmetric Matrices with Real Homotopies*, SIAM J. Numer. Anal., 29 (1992), pp 229-248
- [2] M. E. Henderson and H. B. Keller, *Complex Bifurcation from Real Paths*, SIAM J. Appl. Math., 50 (1990), pp 460-482
- [3] Kiyotaka Yamamura, *Simple Algorithms for Tracing Solution Curves*, IEEE Trans. Circuits Syst., 40 (1993), pp 537-541