

QDアルゴリズムによる固有ベクトルの計算法*

1U-2

津野 直人 野寺 隆†

慶應義塾大学理工学部

概要

三重対角対称行列の固有値が計算されているとき、それに対応する固有ベクトルを、QDアルゴリズムを利用して近似計算する新しい方法が、Parlettによって提案されている。具体的には、 $(A-\lambda I)x=e_1$, $(A-\lambda I)y=e_n$ という2つの近似固有ベクトルを計算し、その2つのベクトルから、より優れた近似固有ベクトル z （ただし、 $(A-\lambda I)z=e_k$, $k \in \{2, 3, \dots, n-1\}$ ）を合成するものである。詳細な数値実験を行なったので、その結果を報告する。

1 はじめに

三重対角対称行列の固有値が二分法などで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できる。しかし、固有値が隣接しているときや縮退しているときには、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である。

この逆反復法の欠点を補う固有ベクトルの計算法が、Parlett[1]によって提案されている。この方法は、まず2つの基本固有ベクトル x と y を計算し、これを利用してより優れた固有ベクトルを求めるものである。

2 準備

問題となる三重対角対称行列 A を対角要素が

$$B = \begin{Bmatrix} & b_1 & & & b_{n-1} \\ a_1 & & a_2 & & \\ & & & & \\ & & & & \\ & & & & a_n \end{Bmatrix}$$

であるような上二重対角行列の積の形 $(B^T B)$ に分解する。以下、この形を使うことにする。

また、次のような二重対角行列を別に定義しておく。

$$L = \begin{Bmatrix} 1 & & & & 1 \\ & e_1 & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & e_{n-1} & \\ & & & & 1 \end{Bmatrix}$$

$$U = \begin{Bmatrix} & & & & 1 \\ & 1 & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & \ddots & \\ q_1 & & q_2 & & q_n \end{Bmatrix}$$

\hat{L} と \hat{U} も同様な行列とする。

3 基本固有ベクトルの解法

3.1 第 n 基本固有ベクトル

$(B^T B - \lambda I)y = e_n$ を満たすベクトル y を第 n 基本固有ベクトルと呼ぶ。

まず、 $\pi_k = a_k b_k$ と置いて、対角要素が

$$\{1, \pi_1, \pi_1 \pi_2, \dots, \pi_1 \dots \pi_{n-1}\}$$

であるような対角行列 D を考える。ここで用いる以下のQDアルゴリズムは、 $D(B^T B - \lambda I)D^{-1}$ を LU の形に分解するアルゴリズムである。

$$q_1 := a_1^2 - \lambda$$

for $k = 1$ step 1 until $n - 1$ do

begin

$$e_k := b_k^2 * a_k^2 / q_k$$

$$q_{k+1} := a_{k+1}^2 - \lambda - e_k + b_k^2$$

end

さて、

$$c = [1, -q_1, q_1 q_2, \dots, (-1)^{n-1} q_1 \dots q_{n-1}]^T$$

というベクトルを考えると、

$$D^{-1} L U c = (-1)^{n-1} \frac{q_1 \dots q_n}{a_1 b_1 \dots a_{n-1} b_{n-1}} e_n \quad (1)$$

となるので、定数倍の自由度により $y = D^{-1} c$ 、つまり

$$y_{(1)} = 1, \quad y_{(k)} = -\frac{q_{k-1}}{a_{k-1} b_{k-1}} \cdot y_{(k-1)}$$

という漸化式で解が求められる。

*The computation of eigenvector using the QD algorithm

†Naoto Tsuno and Takashi Nodera

Faculty of Science and Technology, Keio University
3-14-1 Hiyoshi, Kohoku, Yokohama 223, Japan

3.2 第1基本固有ベクトル

$(B^T B - \lambda I)x = e_1$ を満たすベクトル x を第1基本固有ベクトルと呼ぶ。第3.1小節と似たことを行なうので、詳細は省略する。

まず、 D の代わりに対角要素が

$$\{\pi_1 \cdots \pi_{n-1}, \dots, \pi_{n-2} \pi_{n-1}, \pi_{n-1}, 1\}$$

であるような対角行列 \hat{D} を考えて、 $\hat{D}(B^T B - \lambda I)\hat{D}^{-1} = \hat{L}^T \hat{U}^T$ という分解をする。そして、

$$\hat{c} = [(-1)^{n-1} \hat{q}_2 \cdots \hat{q}_n, \dots, \hat{q}_{n-1} \hat{q}_n, -\hat{q}_n, 1]^T$$

というベクトルを考えればよい。

4 最終的な固有ベクトルの合成

第3節で求めた2つの基本固有ベクトル x と y を利用し、より残差ノルムが小さく、 $(B^T B - \lambda I)z = e_k$ を満たすようなベクトル z を合成する。

そのためには、 $\rho = y_{(k)}/x_{(k)}$ として、

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

とする。 $(B^T B - \lambda I)z$ を計算すると、 k 番目の要素以外は0になる。

真の固有ベクトルの中で、第 k 要素の占める割合が大きいとき、残差ノルムは小さくなる。また、固有値が縮退しているときには、複数の位置で z を合成すればよい。

5 数値例

[例1] 一次元ヘルムホルツ方程式

$$u'' + k^2 u = 0, \quad 0 < x < 1$$

$$u(0) = u(1) = 0$$

を差分法で離散化すると三重対角行列の固有値問題になる。この行列の次元を1024とし、最小固有値を用いて、合成位置と残差ノルムの関係を調べた。結果は表1の通りである。またこの問題を逆反復法で解くと、2回の反復で残差ノルム 8.7×10^{-8} のベクトルが得られた。

[例2] 二次元ヘルムホルツ方程式

$$u_{xx} + u_{yy} + k^2 u = 0, \quad u \in [0, 1] \times [0, 1]$$

表1 合成位置と残差ノルムの関係

合成位置	$x_{(k)}(\%)$	$y_{(k)}(\%)$	残差ノルム
405	0.15	0.15	1.3×10^{-7}
412	0.15	0.15	1.3×10^{-7}
⋮			
1023	0.00	0.00	1.4×10^{-5}
1024	0.00	0.00	2.9×10^{-5}

表2 合成位置と直交性の関係

合成位置	2	49	50
1	1.0×10^0	1.6×10^{-1}	1.6×10^{-1}
2		1.6×10^{-1}	1.6×10^{-1}
49			1.0×10^0

$$u(0, y) = u(x, 0) = 0$$

をメッシュ 16×16 の差分法で離散化し、その行列を三重対角化する。この行列の縮退している固有値を用いて、残差ノルムが小さいベクトルで互いの内積を計算して直交性を調べた。結果は表2の通りである。

6 まとめ

固有値が縮退していないとき、逆反復法よりも残差ノルムが小さくなるということはない。一方、縮退しているときには、最終的な合成の仕方によって、ある程度直交しているベクトルが得られた。精度の面では逆反復法の方が優れているので、ここで得られたベクトルを、逆反復法の初期ベクトルとして用いれば、直交性を保ったまま、さらに精度が良くなることが期待できる。

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] Gene H. Golub and Charles F. Van Loan. *Matrix Computations*. The Johns Hopkins University Press, 1989.