数理解析研究所講究録
585巻 1986年 273-274

ＤＫＡ法による固有値計算の試み

日大・理工　戸川隼人　(Hayato Togawa)

要　約

高次代数方程式の解法として知られるＤＫＡ法を固有値の計算に応用することを考え、実験してみたところ、速度、精度の両面で成績がよく、実用解法として使えることがわかった。さらに、これを Lanczosの双直交化アルゴリズムと組合せると、非対称行列の固有値問題の解法として、きわめて有効であることがわかった。この方法はスパースな問題に適している。

１．　ＤＫＡ法

Durand　と Kerner は、代数方程式

$$f(z) = z^n + a(1) * z^{(n-1)} + a(2) * z^{(n-2)} + \cdots + a(n-1) * z + a(n) = 0$$

のｎ個の根を同時に求めるために

$$\text{新}\ z(i) = z(i) - \frac{f(\,z(i)\,)}{\prod_{i \neq j} (\,z(i)-z(j)\,)} \qquad (\, i=1,2,\cdots,n \,)$$

という反復式を提案した。この方法は大域的収束性を有し、また、全部が単根ならば最終局面では２次収束となるので、近年広く使われている。

２．　固有値計算への応用

行列の固有値問題

$$A\ x = \lambda\ x$$

を解くには、

$$\det(\lambda I - A) = 0$$

を解けばよいから、反復式は

$$\text{新}\lambda(i) = \lambda(i) - \frac{\det(\lambda(i) \cdot I - A\,)}{\prod_{i \neq j} (\lambda(i)-\lambda(j)\,)} \qquad (\, i=1,2,\cdots,n \,)$$

となる。ここで計算上の問題点として，行列式の値の計算におけるオーバーフローおよび精度低下が懸念されるかもしれないが、実験の結果ほとんど問題ないことがわかった。出発値としては、 Aberth の考え方を踏襲して、複素平面上で全部の固有値を含む円を描き、円周上のｎ等分点を出発値にするというのが１案であるが、Gerschgorin 円板を

用いる方が得策であろう。

3． 前処理

行列式の計算を能率よく行うために、あらかじめ相似変換によってAを３重対角化する。そのための算法としては、Lanczos 法が適している（３重対角化と同時に減次の効果があるため）。

[Lanczos 法による３重対角化]

２本の出発ベクトル

$$x(0)\quad,\quad y(0)$$ （カッコ内の数字は反復回数）

を適当に選び（ほとんど任意にとれる）、下記の手続きを反復する。

$$x(k+1)=Ax(k)-\alpha(k)\,x(k)-\beta(k-1)\,x(k-1)$$
$$y(k+1)=By(k)-\alpha(k)\,y(k)-\beta(k-1)\,y(k-1)$$

但し

$$B=\mathrm{transpose}(A)$$

$$\alpha(k)=\frac{(y(k),\,Ax(k))}{(y(k),\,x(k))}$$

$$\beta(k)=\frac{(x(k),\,y(k))}{(x(k-1),\,y(k-1))}$$

結果は次のような３重対角行列になる。

$$T=\begin{bmatrix}\alpha(1) & \beta(1) & & & \mathbf{O}\\ 1 & \alpha(2) & \beta(2) & & \\ & 1 & \alpha(3) & \beta(3) & \\ & & & \cdot\ \cdot\ \cdot & \cdot \\ \mathbf{O} & & & 1 & \alpha(n)\end{bmatrix}$$

4． 行列式の計算法

行列（$\lambda I-T$）の左上k行k列までの小行列式をd（k）とすれば、

$$d(k+1)=(\lambda-\alpha(k+1))\cdot d(k)+\beta(k)\,d(k-1)$$

であるから、$d(1)=(\lambda I-\alpha(1))$ から出発して、$k=1,2,3,\cdots$の順に計算すれば、

$$\det(\lambda I-T)\ =\ d(n)$$

が求められる。