

Lanczos 法による行列の固有多項式の厳密計算

東京都立短期大学 (昭島校舎) 村上 弘 (Hiroshi MURAKAMI)

概 要

厳密に計算すれば結果が整数もしくは有理数などのような離散的な数集合であることが保証されている問題があるときに、通常の数値計算で行われている算法つまり精度一定の浮動小数点数による計算を有限可変精度多倍長の浮動小数点数あるいは p -進数の近似である有限可変精度多倍長の p -進浮動小数点数の演算で行い、誤差の評価が事前もしくは計算中に行えるならば、有限精度による近似計算によっても正確な結果を導くことが可能であることは知られている。

行列要素が整数または有理数である非対称行列の固有多項式の係数は、整数、有理数となるので厳密に求めることを考える。数値計算分野で良く知られた算法である非対称 Lanczos 法は有理的演算だけで構成されているほか、その出力となる三重対角行列から固有多項式を求める演算も有理的演算で可能なので、非対称 Lanczos 法を経由して固有多項式を求めることは有理数演算のみで行える。ところが最終結果である固有値多項式の係数の桁数が小さい場合でも途中計算に現れる数の分母分子の桁数は巨大となる。

そこで、有理数の近似として有限可変精度多倍長の浮動小数点数あるいは p -進浮動小数点数を用いて近似演算に置き換え、誤差の評価を伴いながら計算し、必要な精度が得られるまで演算精度を高めていき、最終結果を有理数として回復すればよいであろう。 p -進浮動小数の場合は積み残し誤差や桁落ち誤差はあっても通常の浮動小数点数のような四捨五入の丸め誤差は無いので計算誤差の途中評価が簡単になると期待できる。

数値計算で通常行われている算法は、精度を固定した浮動小数点数を実数の近似的な表現として利用し、誤差の範囲内で目的値の近似値を求めることを主としている。

数式処理で通常行われている計算の多くは数の表現として、正確な整数値を基本とし誤差の入らない計算により目的の値を正確に計算することを狙ったものであるが、結果が途中の値に滑らかに依存するような算法を用いる場合は、途中の演算を近似的に行ない、結果の誤差評価を行い、必要に応じ誤差が減るように途中の演算の精度を上げるようにすれば、最終結果が整数などのように離散的な値を採ることが事前に知られている場合については正確な計算結果を近似的計算によって得ることもできる。近似や誤差を考えるとということは、計算を何らかの距離のもとで考察していることを意味するが、連続的”距離”としては実数/複素数の絶対値に基づく距離 ($\sim$ 有効数字)、離散的距離としては、多項式の次数に基づく距離、素数で割り切れる次数に基づく距離などがある。

具体的には、精度が制御された浮動小数点数、個数が制御された複数の素数を法とする Modular 演算法、計算に用いる最高次数について制御された多項式計算、展開次数が制御された形式巾級数、展開桁を制御された p -進展開、などそれぞれについて、徐々に制御された精度を高めてやり、誤差の範囲で結果の候補を分離するのに必要な精度まで高めるという方針をとる。

この原理に基づき、通常は固定精度で行なわれる浮動小数点演算による近似計算、つまり通常の意味での数値計算の算法を、任意可変精度で計算するか、あるいは誤差評価が容易になる離散距離を持つ環や体の演算として元の算法が読みかえられるならば、置換して同型あるいは準同型な演算として処理する。計算結果から距離について誤差での限界で分離される真の結果の回復が必要になる。

この方針での応用として、通常の数値計算でよく知られた非対称 Lanczos 法を考える。非対称 Lanczos 法は行列 A の要素と初期ベクトルについて、有理的演算のみで構成されている。例えば A が有理数の行列であれば、初期ベクトルの成分を有理数にすれば、計算は全て有理数として進行し、有理数を要素にもつ三重対角行列 T が求まる。

三重対角行列 T の固有多項式 $P(z)$ は $P_0(z) = 1$ と定義して、漸化式

$$\begin{aligned} P_1(z) &= (z - \alpha_1) \\ P_k(z) &= (z - \alpha_k)P_{k-1} - \beta_{k-1}P_{k-2}(z) \end{aligned}$$

による最後の多項式としてその係数を求めることができる。

非対称 Lanczos 法は固有多項式を得る計算過程が行列成分に関して有理的であるので、行列 A の成分が整数または有理数である場合には、計算を有理数の範囲内で実行できる。しかし小規模問題であっても有理数演算を忠実に実行すると、最終結果の固有多項式の係数の桁数に比べて、計算途中に現れる有理数の分子分母の桁数は巨大となり困難に遭遇する。

固有多項式 $P(z)$ の係数は、行列 A の成分が整数ならば整数であり、その場合が最も簡単だが、成分が有理数の場合でも共通分母 m を乗じた行列 mA を考えるならば、その行列の固有多項式である $P(mz)$ の係数は整数となるので、 $P(z)$ の係数に現れる分母の大きさの上限を抑えることができる。そこで

- 有限精度多倍長浮動小数点数演算 (誤差評価を加える) により、十分な精度を持つ最終結果の近似実数を連分数展開して本来の整数または有理数である係数を回復する。
- 素数を多数個採りそれを法とする Modular 演算を使う。複数の結果から整数または有理数である係数を回復する。
- 適当な素数を選んで有限精度 p -進体の演算 (付値による誤差評価を加える) で計算を行う。途中計算が厳密に零であるかどうかを判定するのは十分な精度を持つ最終結果の近似 p -進浮動小数点数値を付値に基づき連分数展開して有理数を回復する。

の各方法により最終的な固有多項式の係数を整数もしくは有理数として正確に求めることが原理的には可能である。固定精度の浮動小数演算であると、途中計算の精度低下は甚だしいので、行列がそれほど大きくない場合であっても正確な結果は回復出来ない。

非対称 Lanczos 法は行列 A が密のときは中間の計算を有理的演算回数で数えるならば $O(n^3)$ であるが、 A が極めて疎の場合は Gauss 法や Householder 法、Givens 法のような消

去法算法により, 行列自身を逐次変形して Hessenberg 形あるいは三重対角化するのに比べて A の零要素が書換えにより次第に非零化する fill in は起きないので, 大規模問題に於いては消去法算法に比べ, 記憶容量の面では (通常の固定精度の数値計算の時とまったく同様に) 有利であろうと思われる. また特に行列が対称な場合には, 算法の構成が行列 A にベクトルを乗じる計算を主としているので, 行列 A 自身が成分要素の値として具体的に与えられるのではなくてベクトル空間に作用する線形作用素として演算手順としてだけ与えられている場合は, その行列成分を全て求めることが演算量的に困難か, 全要素を生成すると保持が記憶容量的に適当ではないような大規模問題に於いて, 利点があると (これも通常の固定精度の数値計算の時と同様に) 考えられる.

非対称 Lanczos 法のベクトル列 $\{x_k\}, \{y_k\}$ は双直交列, 即ち $i = j$ の場合のみ内積 $\{x_i, y_j\}$ が零でない. さらに元の行列 A が対称なら, 独立な初期値ベクトル x, y を同一に採れば対称性から算法が縮退して計算の手間をほぼ半減できる.

係数行列 A に両側からベクトルを乗じる反復は高々 n 回で停止し, もっとも一般的な初期値から開始するならば, n 回で停止するが, 初期値によっては n 回よりも少ない反復回数 r で停止することがある. その場合も, 中断した三重対角行列 T の固有値は全て A の固有値となっている. (A の固有多項式が K 上既約となるなら, 直交しない K 上の二つの初期値ベクトル x, y から開始すると, 反復は丁度 n 回まで続くことも容易にわかる.) 途中で x_{k+1} が零となり, 反復が停止する場合には, y_{k+1} が同時に零でなければそれまでの $\{y_k\}$ と直行する新たなベクトルをとって x_{k+1} と置き, なるべく計算を継続するようにし全ての固有値が求められるようにできることは行列固有値計算の古典的教科書 [1] にも注意されているが, なるべく初期値を選んで途中で停止しないようにするのが簡明と思われる.

疑問な点: 数式処理の場合に, 仮に行列 A が相当に疎であるとしても, Lanczos 法により固有多項式を求める上記で考察した方法が, z を変数として $\det(zE - A)$ を行列式の計算により直接に変数 z を入れたままで行列の特徴をなるべく利用した消去法で求める, あるいは変数 z に n 個の異なる値を与えて行列の特徴をなるべく利用するような Gauss 消去法等で行列式を計算し, n 個の行列式の値から補間法にて固有値多項式を求める方法 (これは A が密行列の場合には有理的演算を単位として数えたと行列の高速乗算法を用いないならば $O(n^4)$ となるであろう) などと比べ, 実際の計算時間的に十分有利であるかどうかは「甚だ疑問」で, 上記の実数や p -進実数の近似による可変多倍長演算を用いる方法の実装とともに, 比較検討すべきであろう.

参 考 文 献

- [1] J.H.Wilkinson: "The Algebraic Eigenvalue Problem", Oxford University Press, Oxford(1965), Chapter 6, section 35-41.