

行列のスペクトル分解アルゴリズム —最小多項式が複数の重複因子から成る場合—

飯塚 由貴恵

YUKIE IIZUKA

新潟大学大学院 自然科学研究科

GRADUATE SCHOOL OF SCIENCE AND TECHNOLOGY, NIIGATA UNIVERSITY

田島 慎一

SHINICHI TAJIMA

筑波大学大学院 数理物質科学研究科

GRADUATE SCHOOL OF PURE AND APPLIED SCIENCES, TSUKUBA UNIVERSITY

1 はじめに

論文 [4] において, レゾルベントの概念に基づくことで最小多項式 $\pi(\lambda)$ が重複因子を持たない行列に対し, そのスペクトル分解を求めるアルゴリズムを導出した. また論文 [1] においては, レゾルベントのローラン展開を用いることで最小多項式が重複因子を持つ場合 ($\pi(\lambda) = p(\lambda)^l$, l : 重複度, $l \leq 4$) に対してスペクトル分解を求めるアルゴリズムを導出した. そこで, 本論文では最小多項式が複数の重複因子を持つ場合 ($\pi(\lambda) = \prod_k p_k(\lambda)^{l_k}$, $l_k \leq 4$) に対しこれらのアルゴリズムを拡張し, 更に数式処理システム Risa/Asir に実装した.

2 行列のスペクトル分解

A を n 次正方行列, 行列 A の最小多項式を $\pi(\lambda)$ で表す. また, E を n 次単位行列とする. $\pi(\lambda) = 0$ の相異なる解を $\lambda = \alpha_j$ ($j = 1, 2, \dots, s$ ただし $s \leq n$) とおくと, レゾルベント $(\lambda E - A)^{-1}$ の極 α_j における 1 位の極の係数行列 $P(\alpha_j)$, 2 位の極の係数行列 $D(\alpha_j)$ は, 行列 A のスペクトル分解

$$\sum_{j=1}^s P(\alpha_j) = E, \quad \sum_{j=1}^s (\alpha_j P(\alpha_j) + D(\alpha_j)) = A \quad (1)$$

を与える.

3 計算方法

3.1 準備

最小多項式 $\pi(\lambda)$ に対して

$$\pi(x) - \pi(y) = q(x, y)(x - y) \quad (2)$$

を満たす多項式 $q(x, y)$ を考える. 式 (2) に $x = A$, $y = \lambda E$ を代入すると

$$\pi(A) - \pi(\lambda E) = q(A, \lambda E)(A - \lambda E) \quad (3)$$

を得る. 以下 $\psi(A, \lambda) = q(A, \lambda E)$ とする. $\pi(A) = 0$, $\pi(\lambda E) = \pi(\lambda)E$ より, 式 (3) は

$$\pi(\lambda)E = \psi(A, \lambda)(\lambda E - A) \quad (4)$$

となり, レゾルベント $(\lambda E - A)^{-1}$ は

$$(\lambda E - A)^{-1} = \frac{\psi(A, \lambda)}{\pi(\lambda)} \quad (5)$$

と表現できる. これによりレゾルベントを最小多項式を用いた式に直すことができる.

3.2 導出

2 節より, l_j を重複度とし, $\lambda = \alpha_j$ でレゾルベントをローラン展開すると

$$(\lambda E - A)^{-1} = \frac{P(\alpha_j)}{\lambda - \alpha_j} + \sum_{k=1}^{l_j-1} \frac{D(\alpha_j)^k}{(\lambda - \alpha_j)^{k+1}} + (\lambda \text{ について正則な部分}) \quad (6)$$

となる. なお今回は最小多項式 $\pi(\lambda)$ が複数の重複因子から成る場合を考えるため, 因子毎にスペクトル分解行列の計算を行う.

ここからは, 因子 $p_1(\lambda)^{l_1}$ に注目した場合を考える. $p_1(\alpha) = 0$ のとき, レゾルベント $(\lambda E - A)^{-1}$ は $\lambda = \alpha$ で l_1 位の極を持っている. $\pi(\lambda)$ から $p_1(\lambda)^{l_1}$ を除いた残りの因子を $h_1(\lambda)$ とおくと, $\psi(x, \lambda)$ は

$$\begin{aligned} \psi(x, \lambda) &= \frac{\pi(x) - \pi(\lambda)}{x - \lambda} = \frac{p_1(x)^{l_1} h_1(x) - p_1(\lambda)^{l_1} h_1(\lambda)}{x - \lambda} \\ &= \frac{p_1(x)^{l_1} - p_1(\lambda)^{l_1}}{x - \lambda} h_1(x) + \frac{h_1(x) - h_1(\lambda)}{x - \lambda} p_1(\lambda)^{l_1} \end{aligned} \quad (7)$$

と分解できることから

$$\begin{aligned} \frac{\psi(x, \lambda)}{\pi(\lambda)} &= \frac{1}{p_1(\lambda)^{l_1} h_1(\lambda)} \left\{ \frac{p_1(x)^{l_1} - p_1(\lambda)^{l_1}}{x - \lambda} h_1(x) + \frac{h_1(x) - h_1(\lambda)}{x - \lambda} p_1(\lambda)^{l_1} \right\} \\ &= \frac{1}{p_1(\lambda)^{l_1}} \cdot \frac{p_1(x)^{l_1} - p_1(\lambda)^{l_1}}{x - \lambda} \cdot \frac{1}{h_1(\lambda)} \cdot h_1(x) + \frac{1}{p_1(\lambda)^{l_1}} \cdot \frac{h_1(x) - h_1(\lambda)}{x - \lambda} \cdot p_1(\lambda)^{l_1} \\ &= \frac{1}{p_1(\lambda)^{l_1}} \cdot \frac{\psi_1(x, \lambda)}{h_1(\lambda)} \cdot h_1(x) + \frac{1}{p_1(\lambda)^{l_1}} \cdot \frac{h_1(x) - h_1(\lambda)}{x - \lambda} \cdot p_1(\lambda)^{l_1} \end{aligned} \quad (8)$$

を得る. ここで $\psi_1(x, \lambda) = \frac{p_1(x)^{l_1} - p_1(\lambda)^{l_1}}{x - \lambda}$ であり, 最終的に変数 x には行列 A を代入する. また式 (8) の右辺第二項は $\lambda = \alpha$ で正則なので, 右辺第一項の $\lambda = \alpha$ でのローラン展開を考える. さらにこの項の $h_1(x)$ は x の多項式であり, スペクトル分解行列を求める際最終的に $x = A$ を代入することから定数行列となるため, $\frac{1}{p_1(\lambda)^{l_1}} \cdot \frac{\psi_1(x, \lambda)}{h_1(\lambda)}$ の部分を先に計算し $x = A$ を代入した後, $h_1(A)$ を掛けることで行列計算の回数を少なくし, 計算時間の短縮を図る.

$p_1(\lambda) = (\lambda - \alpha)g_1(\lambda)$ とおくと

$$\frac{1}{p_1(\lambda)^{l_1}} \cdot \frac{\psi_1(x, \lambda)}{h_1(\lambda)} = \frac{1}{(\lambda - \alpha)^{l_1}} \cdot \frac{\psi_1(x, \lambda)}{g_1(\lambda)^{l_1} h_1(\lambda)} \quad (9)$$

が成立する. さらに, $r_1(\lambda) = \frac{\psi_1(x, \lambda)}{g_1(\lambda)^{l_1} h_1(\lambda)}$ とおき, $r_1(\lambda)$ のテイラー展開

$$r_1(\lambda) = r_1(\alpha) + r_1'(\alpha)(\lambda - \alpha) + \frac{1}{2!} r_1''(\alpha)(\lambda - \alpha)^2 + \frac{1}{3!} r_1'''(\alpha)(\lambda - \alpha)^3 + \dots \quad (10)$$

をとる. すると

$$\frac{r_1(\lambda)}{(\lambda - \alpha)^{l_1}} = \frac{r_1(\alpha)}{(\lambda - \alpha)^{l_1}} + \dots + \frac{1}{(l_1 - 2)!} \frac{r_1^{(l_1-2)}(\alpha)}{(\lambda - \alpha)^2} + \frac{1}{(l_1 - 1)!} \frac{r_1^{(l_1-1)}(\alpha)}{\lambda - \alpha} + (\lambda \text{ について正則な部分}) \quad (11)$$

となり, $\frac{r_1^{(l_1-1)}(\alpha)}{(l_1 - 1)!}$ が 1 位の極, $\frac{r_1^{(l_1-2)}(\alpha)}{(l_1 - 2)!}$ が 2 位の極にあたることから, $r_1^{(l_1-1)}(\alpha), r_1^{(l_1-2)}(\alpha)$ を求めることでスペクトル分解行列が表現できる.

さらに, $g_1(\alpha)$ を具体的に求めず, $p_1(\alpha), \psi_1(x, \alpha), h_1(\alpha)$ を用いて $r_1^{(l_1-1)}(\alpha), r_1^{(l_1-2)}(\alpha)$ を表現することを考える. そのため, 以下の 2 つの工夫を行う.

- 工夫 1

先ほど述べた等式 $p_1(\lambda) = (\lambda - \alpha)g_1(\lambda)$ の両辺を λ で微分すると

$$p_1'(\lambda) = g_1(\lambda) + (\lambda - \alpha)g_1'(\lambda) \quad (12)$$

となり

$$p_1(\alpha) = g_1(\alpha) \quad (13)$$

を得る. 以下同様に λ で微分していくと

$$p_1^{(m)}(\alpha) = m g_1^{(m-1)}(\alpha) \quad (14)$$

を得る. したがって, $g_1(\lambda)$ の $\lambda = \alpha$ における高階の微分係数は $p_1(\lambda)$ の $\lambda = \alpha$ における高階の微分係数を用いて表現できる.

- 工夫 2

$p_1(\lambda)$ と $p_1'(\lambda)$ は互いに素なので

$$a_1(\lambda)p_1(\lambda) + b_1(\lambda)p_1'(\lambda) = 1 \quad (15)$$

を満たす多項式 $b_1(\lambda)$ が存在する. さらに $p_1(\alpha) = 0$ と

$$a_1(\alpha)p_1(\alpha) + b_1(\alpha)p_1'(\alpha) = 1 \quad (16)$$

より,

$$\frac{1}{p_1'(\alpha)} = b_1(\alpha) \quad (17)$$

である. $p_1(\lambda)$ 以外の各因子に対しても同様に

$$a_k(\lambda)p_1(\lambda) + b_k(\lambda)p_k(\lambda) = 1 \quad (18)$$

なる多項式 $b_k(\lambda)$ をつくり,

$$\frac{1}{p_k(\alpha)} = b_k(\alpha) \quad (19)$$

を得る.

3.3 具体例

$\pi(\lambda) = p_1(\lambda)^2 p_2(\lambda)^{l_2} p_3(\lambda)^{l_3} p_4(\lambda)^{l_4}$, 因子 $p_1(\lambda)^2$ に注目する場合を説明する. この場合は $r_1(\alpha), r'_1(\alpha)$ を求めることになり, また $h_1(\lambda) = p_2(\lambda)^{l_2} p_3(\lambda)^{l_3} p_4(\lambda)^{l_4}$ である.

まず $r_1(\alpha)$ について,

$$r_1(\lambda) = \frac{\psi_1(x, \lambda)}{g_1(\lambda)^2 h_1(\lambda)} \quad (20)$$

より,

$$r_1(\alpha) = \frac{\psi_1(x, \alpha)}{g_1(\alpha)^2 h_1(\alpha)} = \psi_1(x, \alpha) b_1(\alpha)^2 b_2(\alpha)^{l_2} b_3(\alpha)^{l_3} b_4(\alpha)^{l_4} \quad (21)$$

であることから, $r_1(\alpha)$ が求まる. 次に, 式 (20) の両辺を λ で微分すると

$$\begin{aligned} r'_1(\lambda) &= \left(\frac{\psi_1(x, \lambda)}{g_1(\lambda)^2 h_1(\lambda)} \right)' \\ &= \frac{\psi'_1(x, \lambda)}{g_1(\lambda)^2 p_2(\lambda)^{l_2} p_3(\lambda)^{l_3} p_4(\lambda)^{l_4}} - \psi_1(x, \lambda) \frac{(g_1(\lambda)^2 p_2(\lambda)^{l_2} p_3(\lambda)^{l_3} p_4(\lambda)^{l_4})'}{(g_1(\lambda)^2 p_2(\lambda)^{l_2} p_3(\lambda)^{l_3} p_4(\lambda)^{l_4})^2} \\ &= \frac{1}{g_1(\lambda)^2 p_2(\lambda)^{l_2} p_3(\lambda)^{l_3} p_4(\lambda)^{l_4}} \left(\psi'_1(x, \lambda) - \frac{\psi_1(x, \lambda) u(\lambda)}{g_1(\lambda) p_2(\lambda) p_3(\lambda) p_4(\lambda)} \right) \end{aligned} \quad (22)$$

となる. ここでは式 (22) 中の $u(\lambda)$ の詳細は省略する. したがって,

$$r'_1(\alpha) = b_1(\alpha)^2 b_2(\alpha)^{l_2} b_3(\alpha)^{l_3} b_4(\alpha)^{l_4} \{ \psi'_1(x, \alpha) - \psi_1(x, \alpha) u(\alpha) b_1(\alpha) b_2(\alpha) b_3(\alpha) b_4(\alpha) \} \quad (23)$$

となり, $r'_1(\alpha)$ が求まる.

ここで,

$$\begin{aligned} r_1(x, \lambda) &= r_1(\lambda) \bmod p_1(\lambda) \\ r'_1(x, \lambda) &= r'_1(\lambda) \bmod p_1(\lambda) \end{aligned} \quad (24)$$

とおく. このとき, $r_1(x, \lambda), r'_1(x, \lambda)$ は λ について高々 $\deg f(\lambda) - 1$ 次の多項式で表現できる. $p_1(\alpha) = 0$ より, $r_1(\alpha) = r_1(x, \alpha)$, $r'_1(\alpha) = r'_1(x, \alpha)$ が成り立つことから, $r_1(x, \alpha), r'_1(x, \alpha)$ に $x = A$, $\alpha = \alpha_{1j}$ ($p_1(\lambda) = 0$ の解) を代入した $r_1(A, \alpha_{1j}), r'_1(A, \alpha_{1j})$ を求めればよいことがわかる. なお, 実際には作成したプログラムの出力ではスペクトル分解行列が固有値の多項式として表現できることに注目し, 固有値 α_{1j} の代わりに不定文字 λ を用いている.

重複度が 3, 4, ... の場合も同様な議論を繰り返すことにより, スペクトル分解行列を求めるアルゴリズムを導出することができる. しかし, 実際には重複度が 4 の場合で既に, アルゴリズムに用いる公式自体かなり複雑なものとなることを注意しておく.

3.4 まとめ

$p_k(\lambda) = 0$ の解を α_{kj} とする ($1 \leq j \leq \deg p_k(\lambda)$). $\lambda = \alpha_{kj}$ におけるスペクトル分解行列は

$$\begin{aligned} P_k(\lambda) &= \frac{1}{(l_k - 1)!} r_k^{(l_k - 1)}(A, \lambda) h_k(A) \\ D_k(\lambda) &= \frac{1}{(l_k - 2)!} r_k^{(l_k - 2)}(A, \lambda) h_k(A) \end{aligned} \quad (25)$$

に $\lambda = \alpha_{kj}$ を代入したものとして与えられる. すなわち, $P_k(\alpha_{kj}), D_k(\alpha_{kj})$ は次を満たす.

$$\sum_k \left(\sum_j P_k(\alpha_{kj}) \right) = E, \quad \sum_k \left\{ \sum_j (\alpha_{kj} P_k(\alpha_{kj}) + D_k(\alpha_{kj})) \right\} = A. \quad (26)$$

4 スペクトル分解の任意の1列を求める場合

スペクトル分解行列のうち、任意の1列を求めることも可能である。

計算方法の概略

例： $P_k(\alpha_{kj})$ の1列目を求める場合

1. $\frac{1}{(l_k - 1)!} r_k^{(l_k - 1)}(A, \lambda) e_1$ を求める (λ : 不定文字, e_1 : 単位ベクトル)。

まず $\frac{1}{(l_k - 1)!} r_k^{(l_k - 1)}(x, \lambda) e_1$ を求める。次にホーナー法を用いて $x = A$ を代入しながら、右から e_1 を掛けていくことで行列とベクトルの積計算になり、計算時間が短縮できる。

2. 1. の結果に左から $h_k(A)$ を掛ける。
3. $\lambda = \alpha_{k,j}$ を代入することで値が exact に求まる。

また、任意の1列を計算可能であるということは、スペクトル分解アルゴリズムが並列化可能であることを意味している。

5 アルゴリズムの仕様

- 数式処理システム Risa/Asir で動作するプログラム
 - 機能：重複度 $l_k \leq 4$ の場合に対して、(a) 行列のスペクトル分解または (b) スペクトル分解のあらかじめ指定された1列を計算
 - 呼出し形式：
 - (a) …関数名 (Mat, Mpoly)
 - (b) …関数名 (Mat, Mpoly, Col)
 - 入力：
 - Mat $\leftarrow n$ 次正方行列
 - Mpoly $\leftarrow$ Mat の最小多項式を因数分解したもの
 - Col $\leftarrow$ 列番号 ((b) の場合)
 - 出力：
 - (a) …[[[$p_1(\lambda)$, l_1], [[分母, $D_1(\lambda)$ の整数部行列], [分母, $P_1(\lambda)$ の整数部行列]]], ...]
 - (b) …[[[$p_1(\lambda)$, l_1], [[分母, $D_1(\lambda)$ の整数部ベクトル], [分母, $P_1(\lambda)$ の整数部ベクトル]]], ...]
 - 固有値の多項式として計算結果を表示
1. 因子数分の $h_k(A)$ を計算

2. 最小多項式の各因子 $p_k(\lambda)$ 毎にスペクトル分解行列 $P_k(\lambda)$, $D_k(\lambda)$ を計算

- $l_k \geq 5$ ならば計算を行わない旨のメッセージのみを表示
- $l_k \leq 4$ ならば計算を行う

6 CPU 時間の測定

行列のスペクトル分解あるいは任意の 1 列を求めるプログラムの CPU 時間を測定した。

6.1 測定環境

- 使用ソフト … 数式処理システム Risa/Asir
- 実験で使用したコンピュータ
 - OS … Windows Vista Ultimate
 - CPU … Intel Core2 Quad CPU Q9550 @2.83GHz
 - メモリ … 8.00GB
 - 64 ビットオペレーティングシステム

6.2 測定方法

- n 次正方行列に対する最小多項式の各因子 $p_k(\lambda)$ の係数は, -65536~65535 の範囲の整数 (最高次を除く)
- 測定に使用する行列は, 要素が-65536~65535 の範囲の行列を 10 回作成してビット長の平均を取り, それとの誤差が $\pm 10\%$ となるように作成
- 任意の 1 列を計算する場合, ビット長が 1 列平均に最も近い列を選択
- CPU 時間は Asir の `time()` で取得
- Asir の設定はデフォルト
- 測定回数は 1 回

6.3 測定結果

測定結果は以下の通りである。ここで、 $\pi(\lambda)$ および $\tilde{\pi}(\lambda)$ は

$$\pi(\lambda) = p_1(\lambda)p_2(\lambda)^2p_3(\lambda)^3p_4(\lambda)^4 \quad (27)$$

$$\tilde{\pi}(\lambda) = \tilde{p}_1(\lambda)\tilde{p}_2(\lambda)\tilde{p}_3(\lambda)^2\tilde{p}_4(\lambda)^2\tilde{p}_5(\lambda)^3\tilde{p}_6(\lambda)^3\tilde{p}_7(\lambda)^4\tilde{p}_8(\lambda)^4 \quad (28)$$

を表し、 $p_k(\lambda)$, $\tilde{p}_k(\lambda)$ はそれぞれ同次数である。

表1：行列と任意の1列で比較
($\pi(\lambda)$ の場合)

n	CPU 時間 (sec)	
	行列	任意の1列
20	0.14	—
40	9.78	0.59
60	144.36	—
80	958.02	18.75
120	—	141.99
160	—	599.43
200	—	1595.94
240	—	4130.39

表2： $\pi(\lambda)$ と $\tilde{\pi}(\lambda)$ で比較
(行列の場合)

n	CPU 時間 (sec)	
	$\pi(\lambda)$	$\tilde{\pi}(\lambda)$
40	9.78	3.65
80	958.02	399.85

表3： $\pi(\lambda)$ と $\tilde{\pi}(\lambda)$ で比較
(任意の1列の場合)

n	CPU 時間 (sec)	
	$\pi(\lambda)$	$\tilde{\pi}(\lambda)$
80	18.75	14.79
160	599.43	380.51

表1より、任意の1列の場合の計算時間は行列の場合の計算時間の $\frac{1}{n}$ にはなっていないことがわかる。これは $r_k^{(l_k-1)}(A, \lambda)$ など、行列の場合と共通している点が多いためである。また表2・表3から、行列のサイズが同じ場合は、因子数が多くても因子の次数が低い方が計算時間が短かった。これは因子の次数が高くなると $r_k^{(l_k-1)}(A, \lambda)$ の計算時間が急激に増加するためであると推測される。

7 まとめ

最小多項式が複数の因子を持ち、各々の因子の重複度が4以下の場合について、スペクトル分解表現が可能となった。また、スペクトル分解表現の任意の1列を求めることが可能であることも述べた。これにより、本アルゴリズムが並列化可能であることを示した。今後は重複度を一般化したアルゴリズムを考案していきたい。最後に、論文[2]で述べられている最小多項式計算アルゴリズムと本アルゴリズムを比較すると行列計算など重複した計算が多いことから、双方のアルゴリズムを組み合わせることも行っていく。

参考文献

- [1] 飯塚由貴恵, 田島慎一：行列のスペクトル分解アルゴリズム—最小多項式が重複因子を持つ場合—, 数式処理 第16巻 第2号 (2009).
- [2] 奈良洗平, 田島慎一, 小原功任：行列の最小多項式の計算について—計算の効率化と並列化可能性について—, 本講究録掲載予定.

- [3] 小原功任, 田島慎一: 行列のスペクトル分解・固有ベクトルの分散計算, 京都大学数理解析研究所講究録 1666 「Computer Algebra - Design of Algorithms, Implementations and Applications」 (2008), pp.65-68.
- [4] 田島慎一, 飯塚由貴恵: 行列のスペクトル分解アルゴリズムについて, 京都大学数理解析研究所講究録 1666 「Computer Algebra - Design of Algorithms, Implementations and Applications」 (2008), pp.49-56.