

低次代数方程式の諸解法の比較 — 固有値問題を意識して —

聖徳学園女子短期大学 別府 良孝 (Yoshitaka Beppu)

聖徳学園女子短期大学 竹内 聖彦 (Kiyohiko Takeuchi)

n 次実対称行列 A の固有値・固有ベクトルを求める標準固有値問題

$$A v_i = e_i v_i$$

は, 固有値行列を E , 固有ベクトル行列を V で表せば,

$$A V = V E$$

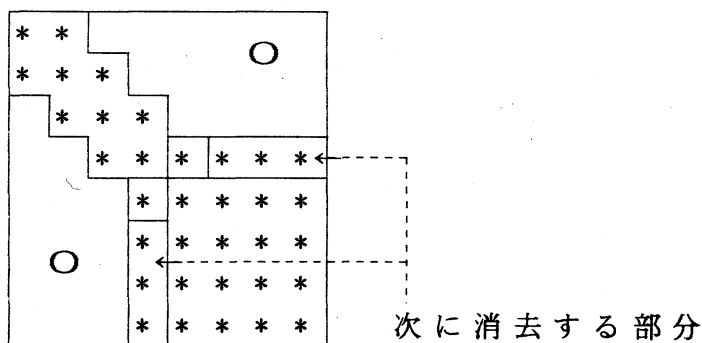
と, 行列形式で表現できる. 求める固有値, 固有ベクトルの数を m とすると, V は $n \times m$ 行列, E は m 次正方行列であり, $m = n$ のときは完全対角化, $m < n$ のときは部分対角化になる.

行列 A が密な場合には, Householder法により A を三重対角行列 T に変換して, T に関する固有値問題

$$T q_i = e_i q_i$$

を解き, その q_i を v_i に逆変換する方法がよく用いられる.

Householder法は, 鏡像変換法とも呼ばれ, 密な実対称行列 A の非対角要素を右のように逐次一列ずつ消去していく方法である.



個々の鏡像変換を表す行列を $P^{(1)}, P^{(2)}, \dots, P^{(n-2)}$ とおき,
 $P^{(1)} \cdot P^{(2)} \cdot \dots \cdot P^{(n-2)} = H = (\text{鏡像変換行列})$

とすれば, 対角化されるべき行列 A は

$$H^t A H = T = (\text{三重対角行列})$$

のように三重対角行列 T に変形できる.

一方, T を効率よく対角化する方法として, QR 法が知られている. QR 法は, 行列 A を直交行列 Q と右上三角行列 R とに

$$A = Q R$$

のごとく分解し, それを逆に掛けて新たな行列

$$B = R Q$$

を作るという操作 (QR 変換) を繰り返すことで, 対角化を行おうという方法である. より詳しく述べれば次のようになる. 行列 $A = A_1$ を直交行列 Q_1 と右上三角行列 R_1 とに分解

$$A_1 = Q_1 R_1$$

し, それを逆に掛けて得られる行列を

$$A_2 = R_1 Q_1$$

とする. この A_2 を再び直交行列 Q_2 と右上三角行列 R_2 とに分解

$$A_2 = Q_2 R_2$$

し, それを逆に掛けて得られる行列を

$$A_3 = R_2 Q_2$$

とする. このように QR 変換 (即ち, 分解と合成) を繰り返すと,

$$A = Q_1 A_2 Q_1^t = Q_1 Q_2 A_3 Q_2^t Q_1^t = \dots = Q_1 \dots Q_k A_{k+1} Q_k^t \dots Q_1^t$$

なので, 固有値行列 E , 固有ベクトル行列 V はそれぞれ, 極限

$$A_k \rightarrow E$$

$$Q_1 Q_2 \dots Q_k \rightarrow V$$

を近似値とすべきかが問題となる。

これまで、原点移動量 z としては、伝統的に、 T の (n, n) -要素 d_n (即ち、 T の右下 1×1 小行列の固有値)、または、 T の右下 2×2 小行列の固有値が用いられてきたが、我々は小行列の次元を少し大きくして、右下 3×3 小行列の固有値、右下 4×4 小行列の固有値を直接法・Newton 法で計算して z とする方法、あるいは更に大きくして、右下 20×20 小行列の固有値、 T そのものの固有値を無平方根 QR 法(後述)で計算して z とする方法などの性能を比較した。

比較した各種の方法を、まず列挙する。

- D 1 直接法で求めた右下 1×1 小行列の固有値を
 z として用いる

$$Z = D(N)$$

- D 2 直接法で求めた右下 2×2 小行列の固有値のうち、
 D 1 に代数的に近い根を z として用いる

$$\begin{aligned} Y &= 0.5 * (D(N-1) + D(N)) \\ R &= D(N) - Y \\ Z &= \text{SIGN}(\text{SQRT}(W(N-1)**2 + R**2), R) + Y \end{aligned}$$

- N 3 D 2 を初期値にして Newton 反復で求めた、
 右下 3×3 小行列の固有値を z として用いる

$$\begin{aligned} Y &= 0.5 * (D(N-1) + D(N)) \\ R &= D(N) - Y \\ Z &= \text{SIGN}(\text{SQRT}(W(N-1)**2 + R**2), R) + Y \\ H &= W(N-2)**2 \\ \text{DENO} &= (Z - D(N-2)) * (Z - Y) * 2. - H \\ \text{IF}(\text{ABS}(\text{DENO}).\text{LT}.1.D-10) \text{ GO TO } 10 \\ Z &= (Z - D(N)) * H / \text{DENO} + Z \\ 10 \text{ CONTINUE} \end{aligned}$$

- D 3 直接法で求めた右下 3×3 小行列の固有値のうち、
 D.2 に代数的に近い根を z として用いる

- N 4 N 3 を初期値にして Newton 反復で求めた,
右下 4×4 小行列の固有値を z として用いる
- D 4 直接法で求めた右下 4×4 小行列の固有値のうち,
D 2 に代数的に近い根を z として用いる
- Q 20 N 3 を初期値にして無平方根 QR 法で求めた
右下 20×20 小行列の固有値を z として用いる
- Q N N 3 を初期値にして無平方根 QR 法で求めた
 $n \times n$ 行列の固有値を z として用いる
- N N N 3 を初期値にして Newton 反復で求めた
 $n \times n$ 行列の固有値を z として用いる
- Q N O 無平方根 QR 法で $n \times n$ 行列の固有値をすべて事前に
求めておき, それらを z として用いる
(平面回転の積算を行なう“平方根付き QR ループ”の
外で, “無平方根 QR 法”で固有値をすべて求めて,
その値を z として使う)

ここで, 上記の“無平方根 QR 法”と“平方根付き QR 法”について, その違いと特性を述べておかねばならない.

QR 法は, 元来, 平面回転の一種である Givens 回転の繰り返しにより, 行列 A の非対角要素を消去していく方法である. 従って, それら平面回転の回転角 θ (あるいは $\sin \theta$, $\cos \theta$) を次式のごとく計算する必要がある.

$$\sin \theta = \frac{A_{ji}}{\sqrt{A_{ii}^2 + A_{jj}^2}} \quad \cos \theta = \frac{A_{jj}}{\sqrt{A_{ii}^2 + A_{jj}^2}}$$

一般に開平計算は時間を要するので, それを避けるために, $\sin \theta$, $\cos \theta$ の代わりに $\sin^2 \theta$, $\cos^2 \theta$ を用いて, 諸量を計算する工夫がな

されており、それが無平方根QR法(Shimasaki, 1968)である。これに対し、通常のQR法は平方根付きQR法と呼ばれる。平方根付きQR法では、固有ベクトルを固有値と同時に求めることが可能だが、無平方根QR法では、固有ベクトルは求められない。従って、固有ベクトルをも必要とする場合には、平方根付きQR法を用いるのがよく、固有値のみを速く求めたい場合には、無平方根QR法が優れている。

この無平方根QR法により、大きなサイズの小行列（あるいは元の行列そのもの）の固有値を求めて、それらを平方根付きQR法の個々のQRループでの原点移動量 z として採用したものが、上記の $Q20$, QN , QNO の方法である。

さて、上記10種類の方法の内、 QNO 以外は以下のごとくコーディングできる。

```

      DO 100 K=N, 2, -1
      Z=(*****)          ←原点移動量 z を計算する
      DO 200 I=1, N
200  V(I,J)=              ←固有ベクトルを求める
100  CONTINUE

```

このコードの原点移動量 z を計算する段階

```

      Z=(*****)

```

で $D1 \sim NN$ の各種の方法を用いたものを比較することになる。

また、 QNO は以下のごとくコーディングできる。

```

      無平方根QR法で  $n \times n$  行列の全ての固有値
       $e_1 < e_2 < \dots < e_n$  を求める
      DO 100 K=N, 2, -1
      Z= $e_K$               ←原点移動量 z に代入する
      DO 200 I=1, N
200  V(I,J)=              ←固有ベクトルを求める
100  CONTINUE

```

この方法と QN との違いは、いつ、どの固有値を無平方根QR法で

求めるかにある。QNOでは、QRループ

```
DO 100 K=N,2,-1
*****
100 CONTINUE
```

に入る前に、一度だけ無平方根完全QR法を用いて、すべての固有値を求めている。他方、QNでは、QRループの内部で、ループを回るたびに無平方根部分QR法を用いて、N3に近い固有値のみを求めている。

以上10種類の方法の優劣を調べるために、いくつかのテスト行列を用いて、完全対角化に要するCPU時間を測定した。テスト行列として用いたものは、次に述べるFrank行列F、三重ブロック対角行列B、Huckel行列H、乱数行列Rの4種類である。

Frank 行列 F :

$$F_{ij} = n + 1 - \max(i, j)$$

三重ブロック対角行列 B :

$$B = \begin{array}{|c|c|c|c|c|c|c|} \hline D & S & & & & & \\ \hline S & D & S & & & & \\ \hline & S & D & S & & & \\ \hline & & S & D & S & & \\ \hline & & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ \hline & & & & S & D & S \\ \hline & & & & & S & D \\ \hline \end{array}$$

B は, $n \times n$ 行列

D, S は, $r \times r$ 行列

但し, $n = r^2$

$$D = \begin{array}{|c|c|c|c|c|c|} \hline 4 & & & & & \\ \hline & 4 & & & & \\ \hline & & 4 & & & \\ \hline & & & \ddots & & \\ \hline & & & & 4 & \\ \hline & & & & & 4 \\ \hline \end{array}$$

$$S = \begin{array}{|c|c|c|c|c|c|} \hline & -1 & & & & \\ \hline -1 & & -1 & & & \\ \hline & -1 & & -1 & & \\ \hline & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ \hline & & & -1 & & -1 \\ \hline & & & & -1 & \\ \hline \end{array}$$

$r \times r$ 行列

Huckel 行列 H :

$$H_{ii} = -7.2$$

$$H_{ij} = \frac{-3.0}{(i-j)^2}$$

乱数行列 R :

$$-32768 < R_{ij} < +32768$$

行列の次元を 100として, これらのテスト行列を Householder変換して得られる三重対角行列を, 完全対角化するのに要した CPU 時間の測定結果と, そのために要した平面回転数の測定結果を以下に示す.

表 1 100次元の三重対角行列の完全対角化に要した CPU 時間

	F 行列	B 行列	R 行列	H 行列
D 1	0.439	0.708	0.919	0.745
D 2	0.365	0.523	0.711	0.589
N 3	0.348	0.469	0.659	0.520
D 3	0.359	0.461	0.647	0.529
N 4	0.347	0.473	0.655	0.496
D 4	0.401	0.492	0.659	0.558
Q 20	0.341	0.376	0.490	0.415
Q N	0.339	0.380	0.400	0.389
N N	0.339	0.496	0.460	0.389
Q N O	0.354	0.389	0.370	0.365

by FACOM-VP-200 on Jan, 1991 (VP=OFF, OPT(3))

表 1 の CPU 時間 (秒単位) には, それぞれのテスト行列を三重対角行列に変形するための時間は, 含んでいない. Householder法で三重対角行列に変形した後に, その三重対角行列を完全対角化するのに要した時間 (z を求めるための時間を含む) である.

表 2 完全対角化に要した平面回転数

	行数	一回当りの C P U 時間 (マイクロ秒)	F 行列	H 行列
D 1	1	0	5951	10163
D 2	3	37	5133	8334
N 3	8	38	4898	7339
D 3	91	100	4980	7349
N 4	17	42	4898	6980
D 4	152	143	5285	7388
Q 20	46	249	4645	5704
Q N	44	1043	4469	4954
N N	49	1251	4465	4855
Q N O	39	*	4859	4950

by FACOM-VP-200 on Jan, 1991 (VP=OFF, OPT(3))

表 2 における「行数」は、原点移動量 z を計算するのに必要なソースステートメントの行数であり、「一回当りの C P U 時間」は、その計算処理に要する C P U 時間である。Q N O では、「一回当りの C P U 時間」が考えられないので、* とした。

原点移動量 z として、より大きな小行列の固有値を用いる方が、C P U 時間が少ないことが、表 1 から明瞭に読み取れる。

また、今回の主眼であった、低次代数方程式を直接法で解くことにより、 3×3 小行列・ 4×4 小行列の固有値を求めて、原点移動量 z とする方法 (D 3, D 4) は、加速が期待されず (表 1), 平面回転数もかなり多い (表 2) 上、処理が複雑なため数値的不安定に陥り易く、有望でないことが分かった。回転数が多いのは、三重対角行列の $(n, n-1)$ -要素が 0 に近づいたとき、小行列の固有値の計算誤差

が無視できなくなることが原因と考えられる。

以上の結果をまとめると次のようになる。

平方根付きQR法のループの中の原点移動量 z として

1. 右下 2×2 小行列の固有値を用いる方法は最善でない。
2. $2N$ 次元の作業用配列を用意できれば、「ループ内高次シフト法」のQNまたは「ループ外高次シフト法」のQNOを用いると良い。

謝辞：電算機を利用して頂いた名大・東大・分子研の計算センターに深謝する。

参考文献：

- 1: Y. Beppu & I. Ninomiya, "NICER---- Fast Eigenvalue Routines",
Comput. Phys. Commun. Vol. 23(1981)123.
- 2: 別府良孝, "スーパーコンピュータに適した固有値ルーチン",
bit臨時増刊(名取 亮・野寺 隆 編)共立出版(1987)
- 3: 別府良孝, "固有値問題の高速算法", (財)日本情報処理開発協会
中央情報教育研究所 講義テキスト(1987)
- 4: Y. Saad, "Shifts of Origin for the QR Algorithm", Proc. IFEP
Congress: Toronto(1974)
- 5: B. N. Parlett, "The Symmetric Eigenvalue Problem", Prentice-
Hall(1980).