卒業論文要旨

固有値分解のための超平面制約法に対する理論解析

(応用数学)　吉武 奈緒美

1　はじめに

行列の固有値分解の応用分野は多岐にわたるため，高速かつ高精度に固有値分解を求めるためのアルゴリズム開発は重要課題といえる．行列の固有値分解とは，$A\in\mathbb{C}^{n\times n}$ を正則行列 $P\in\mathbb{C}^{n\times n}$ と対角行列 $\Lambda\in\mathbb{C}^{n\times n}$ によって

$$A = P\Lambda P^{-1}$$

のように分解することを指す．このとき，P は成分に A の固有ベクトル $x_1,x_2,\ldots,x_n$ が，Λ は対角成分に A の固有値 $\lambda_1,\lambda_2,...,\lambda_n,$ が並ぶ．固有値 λ_k と固有ベクトル x_k の組 (λ_k,x_k) は A の固有対と呼ばれる．つまり，A の固有値分解 $P\Lambda P^{-1}$ と行列の固有対 (λ_k,x_k) を求めることは等価といえる．

行列の固有対を求めるためのアルゴリズムとして，ハウスホルダー QR 法，分割統治法，ヤコビ法などがあるが，応用分野の要求を完全には満たせていないのが現状である [1, 3]．[2] において高精度に固有対を求めるためのアルゴリズムとして超平面制約法が提案された．超平面制約法では，固有ベクトル x_k の存在範囲を超平面 $\mathbb{P}=\left\{x_k|x_k,z\in\mathbb{R}^N,(z,x_k)=C\right\}$ に制約して x_k に関する非線形 2 次方程式

$$F(x_k) = Ax_k-\lambda(x_k)x_k = 0 \tag{1.1}$$

を導き，それをニュートン型反復によって解く．[2] では超平面制約法を使うと高精度に固有対が求まることを数値的に示しているが，超平面制約法の性質に関する理論的な考察はなされていない．本研究では，超平面制約法におけるニュートン型反復について再検討し，有効なニュートン型反復の収束性について明らかにする．

2　有効なニュートン型反復の選択とアルゴリズムの収束性

超平面の制約条件と固有ベクトルに関する任意性を考慮すると，(1.1) の $\lambda(x)$，$F(x)$ 及び $F(x)$ のヤコビ行列 $J(x)$ の定め方には幾分自由度がある．本研究では，考え得る 5 つの $\lambda(x)$，$F(x)$ 及び $J(x)$ の定め方を検討して有効なニュートン型反復を明らかにする．5 つのうち 3 つは 2 度目の反復で原点に向かい，すべての固有対が求まらないため有効ではない．残り 2 つのニュートン型反復は有効であるが，本研究では [2] のニュートン型反復と一致した

$$\begin{cases} x^{(\ell+1)} = C\hat{x}^{(\ell+1)}/(z,\hat{x}^{(\ell+1)}), \quad \hat{x}^{(\ell+1)} = x^{(\ell)} - J(x^{(\ell)})^{-1}F(x^{(\ell)}), \quad \ell = 0.1.\ldots,\ell_{max}, \\ J(x^{(\ell)}) = A-\lambda(x^{(\ell)})I - x^{(\ell)}w^H/C, \quad \lambda(x^{(\ell)}) = (w,x^{(\ell)})/C \end{cases} \tag{2.1}$$

について解析する．ここで，上付き文字 ℓ は反復回数，I は $n\times n$ の単位行列である．適当な $x^{(0)}$ に対して，数列 $\{x^{(\ell)}\}_{\ell=0,1,\ldots}$ が $\ell\to\infty$ において収束するならば，$\lim_{\ell\to\infty}x^{(\ell)}$ は (1.1) の解，すなわち A の固有ベクトル x_k となる．

一般的に，ニュートン法に含まれるヤコビ行列が正則ならば，ニュートン法は 2 次収束することが知られている．ニュートン型反復が核となる超平面制約法は，ニュートン法と同様の収束性をもつことが予想される．そこで，まずは (2.1) に含まれるヤコビ行列の正則性に関する定理を導く．

定理 2.1　$(z,x_k)\neq 0$ とする．行列 A がすべて異なる 0 でない固有値をもつならば，ヤコビ行列 $J(x)$ は $x=\alpha_k x_k$ において正則である．

さらに，(2.1) における $x^{(\ell)}$ から $x^{(\ell+1)}$ への変換を 2 つの変換 Φ_1,Ψ_1 の合成変換 $\Psi_1\circ\Phi_1$ と捉えて，収束性に関する定理を導く．ここで，Φ_1,Ψ_1 は $\Phi_1(x)=x-(J(x))^{-1}F(x),\Psi_1(x)=Cx/(z,x)$ のように定義される．

定理 2.2 $(z,x) \neq 0$ とする．$x^{(0)}$ が $\alpha_k x_k$ に十分近いならば，$x^{(\ell+1)} = \Phi_1(x^{(\ell)})$ によって生成される $\{x^{(\ell)}\}_{\ell=0,1,\ldots}$ は $\ell \to \infty$ において $\alpha_k x_k$ に 2 次収束する．また，$x^{(\ell+1)} = \Psi_1(\Phi_1(x^{(\ell)}))$ によって生成される $\{x^{(\ell)}\}_{\ell=0,1,\ldots}$ も $\ell \to \infty$ において $\alpha_k x_k$ に 2 次収束する．

3　規格化型アルゴリズムの収束性

初期ベクトル $x^{(0)}$ のとり方によって反復で得られる解 $\|x^{(\ell)}\|$ の値が計算機上でオーバーフロー，あるいはアンダーフローする可能性がある．(2.1) の反復の終了条件は極めて小さい値 ε_{itr} に対して

$$\|Ax^{(\ell)} - \lambda(x^{(\ell)})x^{(\ell)}\|_\infty < \varepsilon_{itr}\|x^{(\ell)}\|_2$$

となるため，正しく停止できる保証がない．そこで，反復の各ステップで $\|x^{(\ell)}\| = 1$ のような規格化をすると，終了条件は

$$\|Ax^{(\ell)} - \lambda(x^{(\ell)})x^{(\ell)}\|_\infty < \varepsilon_{itr}$$

となり，誤差の減少が期待される．そこで規格化条件を加えた超平面制約法のアルゴリズム

$$\begin{cases} x^{(\ell+1)} = \hat{x}^{(\ell+1)}/\|\hat{x}^{(\ell+1)}\|_2, \quad \hat{x}^{(\ell+1)} = x^{(\ell)} - (F'(x^{(\ell)}))^{-1}F(x^{(\ell)}), \quad \ell = 0.1.\ldots,\ell_{max}, \\ F'(x^{(\ell)}) = A - p(x^{(\ell)})I - x^{(\ell)}w^H/(z,x^{(\ell)}), \quad p(x^{(\ell)}) = (w,x^{(\ell)})/(z,x^{(\ell)}) \end{cases} \tag{3.1}$$

が提案されている．ここで，$F'(x)$ は擬似的なヤコビ行列であることに注意されたい．本来のヤコビ行列を用いると 2 節で有効ではないと判断した反復タイプとなるので，C を固定せずに $C = (z,x)$ とすると，結果的に (3.1) のように擬似的なヤコビ行列 $F'(x)$ を用いるとよいことがわかる．

さらに (2.1) と同様に (3.1) の $x^{(\ell)}$ から $x^{(\ell+1)}$ への変換を 2 つの変換 Φ_2, Ψ_2 の合成変換 $\Psi_2 \circ \Phi_2$ と捉えて，収束性に関する定理を導く．ここで，Φ_2, Ψ_2 は $\Phi_2(x) = x - (F'(x))^{-1}F(x), \Psi_2(x) = x/\|x\|_2$ のように定義される．

定理 3.1 $(z,x) \neq 0$ とする．$x^{(0)}$ が $\alpha_k x_k$ に十分近いならば，$x^{(\ell+1)} = \Phi_2(x^{(\ell)})$ によって生成される $\{x^{(\ell)}\}_{\ell=0,1,\ldots}$ は $\ell \to \infty$ において $\alpha_k x_k$ に一様に収束する．また，$x^{(\ell+1)} = \Psi_2(\Phi_2(x^{(\ell)}))$ によって生成される $\{x^{(\ell)}\}_{\ell=0,1,\ldots}$ も $\ell \to \infty$ において $\alpha_k x_k$ に一様に収束する．

4　まとめと今後の課題

本研究では，まず固有値分解のための超平面制約法の核となり得る 2 つのニュートン型反復タイプを明らかにした．1 つは [2] の超平面制約法に組み込まれたニュートン型反復であるが，これに現れるヤコビ行列の正則性を示して，2 次収束性も証明した．続いて，規格化型アルゴリズムの収束性についても明らかにした．

もう 1 つの有効なニュートン型反復タイプに関する解析は今後の課題である．

参考文献

[1] J. W. Demmel, Applied Numerical Linear Algebra, SIAM, Philadelphia, 1997.

[2] K. Kondo, S. Yasukouchi, M. Iwasaki, Eigendecomposition algorithms solving sequentially quadratic systems by Newton method, JSIAM Letters, **1** (2009), 40–43.

[3] LAPACK, http://www.netlib.org/lapack/.