数理解析研究所講究録
944 巻 1996 年 105-111

ホモトピー法に基づく２固有値問題の数値解法の収束性解析

九州大学大型計算機センター　島崎　眞昭 (Masaaki Shimasaki)

1.　はじめに

常微分方程式の３点境界値問題や Helmholtz 方程式の境界値問題等に関連して、行列の２固有値問題が古くから研究されてきたが [1]、必ずしも決定的な方法はないと言える。最近、 Ji[2] は２固有値問題に対する２次元の２分法を提案したが、２次元空間を２分法で探索するには相当の計算時間を必要とする。本稿では、すでに与えた２固有値問題に対するホモトピー法 [6] に基づく数値解法を提案する。２固有値問題に対して、ホモトピー曲線の追跡のための予測子・修正子法を与える。予測子・修正子の反復過程は少なくとも２次の収束性を持つことを示すことができる。

2.　２固有値問題

T_i $(i=1,2)$ は $n\times n$ の irreducible 実対称三重対角行列とする。また B_2, C_1 は正則で対角要素の符号が一定である実対角行列とする。すなわち $B_2 = diag(b_{2j}), C_1 = diag(c_{1j})$ 　$j=1,2,...,n$ としたとき、$sign(b_{21}) = sign(b_{22}) = ... = sign(b_{2n}), sign(c_{11}) = sign(c_{12}) = ... = sign(c_{1n})$ とする。本論文では次の２固有値問題を考察する。

$$T_1x_1 = \lambda x_1 + \mu C_1 x_1, \tag{2.1}$$

$$T_2x_2 = \lambda B_2 x_2 + \mu x_2. \tag{2.2}$$

ここで λ, μ は求める固有値、x_1, x_2 はそれぞれ対応する固有ベクトルである。ただし、${x_1}^t x_1 = {x_2}^t x_2 = 1$ とする。

前論文 [6] で扱った問題は簡単な前処理により、本論文の問題に帰着できることを述べておく。

前論文で導入した確定条件は次式で与えられる。

$$1-({x_1}^t C_1 x_1)({x_2}^t B_2 x_2) > 0. \tag{2.3}$$

3.　数値解法

前節において、２固有値問題がホモトピー曲線の追跡問題に帰着できることを述べた。すなわち問題は常微分方程式の初期値問題に帰着される。常微分方程式の初期値問題の数値解法としては種々のものが利用できるが、最初の問題が行列の固有値に関連しているという性質を活用することが考えられる。ホモトピー曲線の追跡は次のように行なう。$t_0 = 0 < t_1 < t_2 < ... < t_{s-1} < t_s$ における２固有値問題の固有値、固有ベクトルが既に計算されているとする、$t = t_{s+1} > t_s$ に対する２固有値問題の解を次の予測ステップ、修正ステップを用いて求める。$t=1$ になれば、求めるもとの２固有値問題の解が得られる。

1. 予測ステップ：
$t=t_1$ のときは、オイラー法またはルンゲ・クッタ法で $t=t_2$ における固有値 λ,μ の予測値を求める。$t=t_s>t_1$ のときは、$\{\lambda(t_{s-1}),\lambda'(t_{s-1}),\lambda(t_s),\lambda'(t_s)\}$ を用い、Hermite 補間公式により $t=t_{s+1}$ における固有値 λ の予測値 λ_p を求める。同様に $\{\mu(t_{s-1}),\mu'(t_{s-1}),\mu(t_s),\mu'(t_s)\}$ より、Hermite の補間公式を用いて、$t=t_{s+1}$ における固有値 μ の予測値 μ_p を求める。

   次に固有ベクトルの予測値を逆反復法で計算する。
行列 $A_p=T_1-\mu_p C_1$ を考える。行列 A_p は対称行列で、その通常の固有値問題を考えたとき、λ_p は一つの固有値の近似値で、対応する固有ベクトルは通常の逆反復法により計算することができる。計算された固有ベクトル x_{1p} は $t=t_{s+1}$ における2固有値問題の固有ベクトル $x_1(t_{s+1})$ の予測値となる。同様にして、$t=t_{s+1}$ における2固有値問題の固有ベクトル $x_2(t_{s+1})$ の予測値を計算し、x_{2p} とする。

2. 修正ステップ：
固有ベクトルの予測値 x_{1p},x_{2p} が計算されているとき、固有値の修正値 $\{\lambda_c,\mu_c\}$ を次の連立一次方程式により求める。

$$\lambda_c+({x_{1p}}^tC_1x_{1p})\mu_c = {x_{1p}}^tT_1x_{1p}, \tag{3.1}$$
$$({x_{2p}}^tB_2x_{2p})\lambda_c+\mu_c = {x_{2p}}^tT_2x_{2p}. \tag{3.2}$$

   確定条件 (2.3) が成立するとき、係数行列は正則で、解は次式で与えられる。

$$\lambda_c = \{{x_{1p}}^tT_1x_{1p}-({x_{1p}}^tC_1x_{1p})({x_{2p}}^tT_2x_{2p})\}/D, \tag{3.3}$$
$$\mu_c = \{{x_{2p}}^tT_2x_{2p}-({x_{2p}}^tB_2x_{2p})({x_{1p}}^tT_1x_{1p})\}/D, \tag{3.4}$$

   ただし、

$$D=1-({x_{1p}}^tC_1x_{1p})({x_{2p}}^tB_2x_{2p}). \tag{3.5}$$

   固有値の修正値が求まれば、それにより対応する固有ベクトルを逆反復法で計算する。修正ステップでは計算された固有ベクトルを固有ベクトルの予測値として、さらに修正ステップを繰り返すことができる。固有値が収束すれば、修正ステップを停止する。$t=1$ に対する固有値、固有ベクトルが求まれば、全体の反復過程を停止し、2固有値問題の解とする。$t<1$ ならば、t を増加させ、予測ステップに戻る。

2固有値問題に対する2分法で随時、ホモトピー曲線から離脱していないか検査する。

4. 数値解法の収束性の解析

4..1 予測固有値に対する固有ベクトルの摂動解析

2固有値問題の一つの解の固有値を (λ_1,μ_1) とし、対応する長さ1の固有ベクトルを (u_1,v_1) とする。前節に述べたように数値解法において、、固有値 (λ_1,μ_1) の予測値を (λ_{1p},μ_{1p}) とするとき、対応する固有ベクトルの予測値は逆反復法で計算する。本節では、固有値の予測値が解からずれたとき、計算される固有ベクトルがどれだけずれるかを調べることにする。

ベクトル u_1 については、固有値の近似値として λ_{1p} を用いて、行列 $T_1-\mu_{1p}C_1$ に対し通常の逆反復法を適用して固有ベクトル計算を行なう。摂動解析のため、行列 $T_1-\mu_1C_1$

をとり、その通常の意味での固有値問題を考える。行列は対称三重対角行列で、λ_1, u_1 は一つの固有値、固有ベクトルであり、他の固有値を $\lambda_2, ..., \lambda_n$ とし、対応する長さ１の固有ベクトルを $u_2, ..., u_n$ とする。行列 $T_1 - \mu_1 C_1$ は非零の副対角要素を持つ実対称三重対角行列であるから、固有値 λ_i はすべて異なり、固有ベクトルは直交する。したがって、次式が成立する。

$$(T_1 - \mu_1 C_1)u_i = \lambda_i u_i, \quad i = 1, 2, ..., n, \tag{4.1}$$
$$u_i{}^t u_j = \delta_{ij}, \tag{4.2}$$

ここで、

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{for } i = j \\ 0, & \text{for } i \neq j \end{cases} \tag{4.3}$$

同様に、行列 $T_2 - \lambda_1 B_2$ の固有値を $\mu_1, ..., \mu_n$ とし、対応する長さ１の固有ベクトルを $v_1, ..., v_n$ とすると、次式を得る。

$$(T_2 - \lambda_1 B_2)v_i = \mu_i v_i, \quad i = 1, 2, ..., n, \tag{4.4}$$
$$v_i{}^t v_j = \delta_{ij}. \tag{4.5}$$

ここで、(λ_1, μ_1) は２固有値問題の解であるが、$\lambda_2, ..., \lambda_n, \mu_2, ..., \mu_n$ は２固有値問題の解ではないことを注意しておく。

h を微小量として、行列 $T_1 - (\mu_1 + h)C_1$ の固有値を $\lambda(h)$、長さ１の固有ベクトルを $y_1(h)$ とすると、定義より次式を得る。

$$\{T_1 - (\mu_1 + h)C_1\}y_1(h) = \lambda(h)y_1(h), \tag{4.6}$$
$$\lambda(0) = \lambda_1, \tag{4.7}$$
$$y_1(0) = u_1. \tag{4.8}$$

式 (4.6) を h で微分して、$h = 0$ とおくと、次式を得る。

$$(T_1 - \mu_1 C_1 - \lambda_1 I)\dot{y}_1(0) = \dot{\lambda}(0)u_1 + C_1 u_1. \tag{4.9}$$

$y_1{}^t(h)y_1(h) = 1$ より、$y_1{}^t(0)\dot{y}_1(0) = 0$、すなわち、$u_1{}^t\dot{y}_1(0) = 0$ であるから、$\dot{y}_1(0)$ はベクトル $\{u_2, ..., u_n\}$ で張られる部分空間に属し、次式のように書ける。

$$\dot{y}_1(0) = \sum_{i=2}^{n} \alpha_i u_i. \tag{4.10}$$

式 (4.10) を式 (4.9) に代入し、式 (4.1) 用いると次式を得る。

$$\sum_{i=2}^{n} \alpha_i(\lambda_i - \lambda_1)u_i = \dot{\lambda}(0)u_1 + C_1 u_1. \tag{4.11}$$

ベクトル $\{u_1, ..., u_n\}$ の正規直交性により次式を得る。

$$\dot{\lambda}(0) = {u_1}^t C_1 u_1, \tag{4.12}$$

$$\alpha_i = \frac{{u_i}^t C_1 u_1}{\lambda_i - \lambda_1}, \quad i = 2, ..., n. \tag{4.13}$$

式(4.12)、 (4.10) を h で積分し、初期条件 (4.7)、 (4.8) を考慮して次式を得る。

$$\lambda(h) = \lambda_1 + h({u_1}^t C_1 u_1) + O(h^2), \tag{4.14}$$

$$y_1(h) = \frac{1}{l_1(h)} \left\{ u_1 + h \sum_{i=2}^{n} \left(\frac{{u_i}^t C_1 u_1}{\lambda_i - \lambda_1} \right) u_i + O(h^2) \right\}, \tag{4.15}$$

$${l_1}^2(h) = 1 + h^2 \sum_{i=2}^{n} \left(\frac{{u_i}^t C_1 u_1}{\lambda_i - \lambda_1} \right)^2 + O(h^2), \tag{4.16}$$

ただし、 $l_1(h)$ はベクトルの長さを 1 に正規化するための因子である。

予測固有ベクトルの摂動は予測固有値 μ_{1p} の μ_1 からのずれ h と、固有値の分離の程度 $(\lambda_i - \lambda_1)$ に依存する。

固有ベクトル v_1 についても、同様の議論を行なうことができ、予測固有値 λ_{1p} の λ_1 からのずれを k とするとき、固有ベクトル v_1 の予測値を $y_2(k)$ とすると、次式のように書ける。

$$y_2(k) = \frac{1}{l_2(k)} \left\{ v_1 + k \sum_{i=2}^{n} \left(\frac{{v_i}^t B_2 v_1}{\mu_i - \mu_1} \right) v_i + O(k^2) \right\}, \tag{4.17}$$

$${l_2}^2(k) = 1 + k^2 \sum_{i=2}^{n} \left(\frac{{v_i}^t B_2 v_1}{\mu_i - \mu_1} \right)^2 + O(k^2), \tag{4.18}$$

ただし、 $l_2(k)$ はベクトルの長さを 1 に正規化するための因子である。

4..2 固有値の修正子の収束性

数値解法では、固有値の予測子に対する予測固有ベクトル x_{1p}, x_{2p} を計算したあと、固有値の修正子 (λ_c, μ_c) を連立一次方程式 (3.1)、 (3.2) で計算することを述べた。前節の議論により、 x_{1p}, x_{2p} は次のように書くことができる。

$$x_{1p} = \frac{1}{\sqrt{1 + h^2 \sum_{i=2}^{n} {\alpha_i}^2}} \{u_1 + h \sum_{i=2}^{n} \alpha_i u_i\}, \tag{4.19}$$

$$x_{2p} = \frac{1}{\sqrt{1+k^2\sum_{i=2}^{n}{\beta_i}^2}}\{v_1 + k\sum_{i=2}^{n}\beta_i v_i\}. \tag{4.20}$$

ただし、h, k は μ_p, λ_p のそれぞれ μ_1, λ_1 からのずれに依存する微小量である。これを式 (3.1)、(3.2) に代入して次式を得る。

$$\begin{aligned}\lambda_c(1 &+ h^2\sum_{i=2}^{n}{\alpha_i}^2) + \mu_c(u_1 + h\sum_{i=2}^{n}\alpha_i u_i)^t C_1(u_1 + h\sum_{i=2}^{n}\alpha_i u_i) \\ &= (u_1 + h\sum_{i=2}^{n}\alpha_i u_i)^t T_1(u_1 + h\sum_{i=2}^{n}\alpha_i u_i),\end{aligned} \tag{4.21}$$

$$\begin{aligned}\lambda_c(v_1 &+ k\sum_{i=2}^{n}\beta_i v_i)^t B_2(v_1 + k\sum_{i=2}^{n}\beta_i v_i) + \mu_c(1 + k^2\sum_{i=2}^{n}{\beta_i}^2) \\ &= (v_1 + k\sum_{i=2}^{n}\beta_i v_i)^t T_2(v_1 + k\sum_{i=2}^{n}\beta_i v_i).\end{aligned} \tag{4.22}$$

一方、

$$\lambda_1 + ({u_1}^t C_1 u_1)\mu_1 = {u_1}^t T_1 u_1, \tag{4.23}$$
$$({v_1}^t B_2 v_1)\lambda_1 + \mu_1 = {v_1}^t T_2 v_1, \tag{4.24}$$

より、次式を得る。

$$\lambda_1(1 + h^2\sum_{i=2}^{n}{\alpha_i}^2) + \mu_1({u_1}^t C_1 u_1)(1 + h^2\sum_{i=2}^{n}{\alpha_i}^2) = ({u_1}^t T_1 u_1)(1 + h^2\sum_{i=2}^{n}{\alpha_i}^2), \tag{4.25}$$

$$\lambda_1({v_1}^t B_2 v_1)(1 + k^2\sum_{i=2}^{n}{\beta_i}^2) + \mu_1(1 + k^2\sum_{i=2}^{n}{\beta_i}^2) = ({v_1}^t T_2 v_1)(1 + k^2\sum_{i=2}^{n}{\beta_i}^2), \tag{4.26}$$

式(4.21) から式(4.25) を引き、式

$$\begin{aligned} h\sum_{i=2}^{n}\alpha_i {u_i}^t(T_1 - \mu_1 C_1)u_1 &= h\sum_{i=2}^{n}\alpha_i {u_i}^t \lambda_1 u_1 \\ &= 0 \qquad ({u_i}^t u_1 = 0, \quad i \neq 1),\end{aligned} \tag{4.27}$$

$$\begin{aligned} h^2\mu_1 {u_1}^t C_1 u_1 - h^2 {u_1}^t T_1 u_1 &= -h^2 {u_1}^t(T_1 - \mu_1 C_1)u_1 \\ &= -h^2 {u_1}^t \lambda_1 u_1,\end{aligned} \tag{4.28}$$

$$
\begin{aligned}
& & = & -h^2\lambda_1, \\
(4.29) \quad & {u_i}^t T_1 u_j - \mu_1 {u_i}^t C_1 u_j & = & {u_i}^t (T_1 - \mu_1 C_1) u_j \\
& & = & \lambda_j {u_i}^t u_j, \\
& & = & \lambda_i \delta_{i,j}
\end{aligned}
$$

を用いると、次式を得る。

(4.30) $$(\lambda_c - \lambda_1)P_h + (\mu_c - \mu_1)Q_h = h^2 \sum_{i=1}^{n} (\lambda_i - \lambda_1){\alpha_i}^2,$$

ただし、

(4.31) $$P_h = 1 + h^2 \sum_{i=2}^{n} {\alpha_i}^2,$$

(4.32) $$Q_h = {u_1}^t C_1 u_1 + 2h \sum_{i=2}^{n} \alpha_i {u_i}^t C_1 u_1 + h^2 \sum_{i=2}^{n} \sum_{j=2}^{n} \alpha_i \alpha_j {u_i}^t C_1 u_j.$$

同様に次式を得る。

(4.33) $$(\lambda_c - \lambda_1)R_k + (\mu_c - \mu_1)S_k = k^2 \sum_{i=1}^{n} (\mu_i - \mu_1){\beta_i}^2,$$

ただし、

(4.34) $$R_k = {v_1}^t B_2 v_1 + 2k \sum_{i=2}^{n} \beta_i {v_i}^t B_2 v_1 + k^2 \sum_{i=2}^{n} \sum_{j=2}^{n} \beta_i \beta_j {v_i}^t B_2 v_j,$$

(4.35) $$S_k = 1 + k^2 \sum_{i=2}^{n} {\beta_i}^2.$$

次式

(4.36) $$D_{hk} = P_h S_k - Q_h R_k > 0,$$

で D_{hk} を定義すると、次式を得る。

(4.37) $$D_{hk} = 1 - ({u_1}^t C_1 u_1)({v_1}^t B_2 v_1) + O(h^2, k^2).$$

確定条件 (2.3) が成立するときは、h,k が十分小さければ、$(\lambda_c-\lambda_1)$、$(\mu_c-\mu_1)$ に関する連立一次方程式 (4.30)、 (4.33) の係数行列は正則で、次式が成立する。

$$\lambda_c-\lambda_1 = \{h^2S_k\sum_{i=2}^{n}(\lambda_i-\lambda_1){\alpha_i}^2+k^2Q_h\sum_{i=2}^{n}(\mu_i-\mu_1){\beta_i}^2\}/D_{hk}, \tag{4.38}$$

$$\mu_c-\mu_1 = \{h^2R_k\sum_{i=2}^{n}(\lambda_i-\lambda_1){\alpha_i}^2+k^2P_h\sum_{i=2}^{n}(\mu_i-\mu_1){\beta_i}^2\}/D_{hk}. \tag{4.39}$$

固有値の修正子は $\{h,k\}$ について２次の収束をすることがわかる。

5. おわりに

前論文で与えたある種の２固有値問題に対するホモトピーに対し、予測子、修正子法による数値解法を与え、反復過程が２次の収束性を持つことを示した。複数のホモトピー曲線の追跡は互いに独立に行えるという意味で、与えた手法は並列計算に対する適合性を有している。

謝辞 通常の固有値問題に対するホモトピー法に関する文献の入手についてご協力頂いた別府良孝氏、有益なコメントを頂いた査読者に謝意を表します。

参考文献

[1] Blum, E.K. and Chang, A.F., A Numerical Method for the Solution of the double eigenvalue problem, J. Inst. Math. Appl. 22(1978), 29-42.

[2] Ji, X., A two-Dimensional Bisection Method for Solving Two-Parameter Eigenvalue Problems, SIAM J. Matrix Anal. Appl. 13(1992), 1085-1093.

[3] Li, T., Zhang, H. and Sun, X., Parallel Homotopy Algorithm for the Symmetric Tridiagonal Eigenvalue Problem, SIAM J. Sci. Stat. Compt., 12(1991), 469-487.

[4] Lin, W. and Lutzer, G., An Application of the Homotopy Method to the Generalized Symmetric Eigenvalue Problem, J. Austral. Math. Soc. Ser. B 30(1988), 230-249.

[5] Parlett, B.N., The Symmetric Eigenvalue Problem, Engelwood Cliffs, N. J. Prentice-Hall, 1980.

[6] 島崎 眞昭, 2 固有値問題に対するホモトピー法, 日本応用数理学会論文誌 Vol.5, No.2. pp.121-129, 1995.