数理解析研究所講究録
第 746 巻 1991 年 191-200

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，

$$A V = V E$$

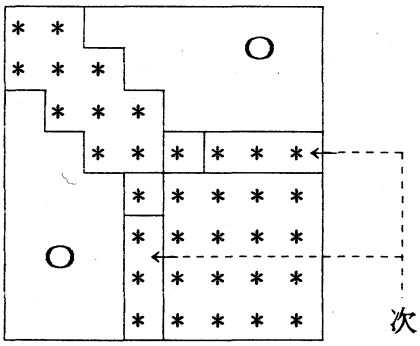
と，行列形式で表現できる．求める固有値，固有ベクトルの数をmとすると，Vはn×m行列，Eはm次正方行列であり，m＝nのときは完全対角化，m＜nのときは部分対角化になる．

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．



次に消去する部分

個々の鏡像変換を表す行列を $P^{(1)}$, $P^{(2)}$, …., $P^{(n-2)}$とおき,

$$P^{(1)}\cdot P^{(2)}\cdot\cdots\cdot P^{(n-2)} = H = (\text{鏡像変換行列})$$

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,

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

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

$$A_k \rightarrow E \qquad\qquad Q_1 Q_2 \cdots\cdot Q_k \rightarrow V$$

として得られる.

さて，行列Aが，(実対称)三重対角行列

$$T=\begin{pmatrix} d_1 & w_1 & & & & & \\ w_1 & d_2 & w_2 & & & \text{O} & \\ & w_2 & d_3 & w_3 & & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & & w_{n-3} & d_{n-2} & w_{n-2} & \\ & \text{O} & & & w_{n-2} & d_{n-1} & w_{n-1} \\ & & & & & w_{n-1} & d_n \end{pmatrix}$$

であれば，TにQR変換を施して得られる行列は，再び(実対称)三重対角行列になるという事実を利用して，効率よくQR変換を反復できる.

行列Tの各々の対角要素から，一定量zを引いて得られる行列

$$T' = T - zI \qquad (\text{Iはn次単位行列})$$

の固有値e'は，元の行列Tの固有値eからzを引いたものであるので，TからT'を得る操作を原点移動と呼び，その際の変更量zを原点移動量と呼ぶ.

この原点移動量zとして，元の三重対角行列Tの固有値を用いると，原点移動したT'にQR変換をただ1回施して新たに得られる三重対角行列は，その(n,n-1)-要素が0になることが証明できる. 従って，以後は左上のn－1次小行列の対角化問題に帰着でき，同様な減次プロセスにより，n－1回のみのQR変換でTを対角化できるはずである.

しかしながら，原点移動量zとして用いる，Tの固有値を計算することは，元々の固有値問題を解くことに他ならず，tautology に陥ってしまう. そこで，n次行列の固有値に代わるものとして，何

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.

D1　　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)
```

D2　　直接法で求めた右下2×2小行列の固有値のうち，D1に代数的に近い根をzとして用いる

```
Y=0.5*(D(N-1)+D(N))
R=D(N)-Y
Z=SIGN(SQRT(W(N-1)**2+R**2),R)+Y
```

N3　　D2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

```
   Y=0.5*(D(N-1)+D(N))
   R=D(N)-Y
   Z=SIGN(SQRT(W(N-1)**2+R**2),R)+Y
   H=W(N-2)**2
   DENO=(Z-D(N-2))*(Z-Y)*2.-H
   IF(ABS(DENO).LT.1.D-10) GO TO 10
   Z=(Z-D(N))*H/DENO+Z
10 CONTINUE
```

D3　　直接法で求めた右下3×3小行列の固有値のうち，D2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×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×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×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sinθ，cosθ）を次式のごとく計算する必要がある．

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

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，sinθ，cosθの替わりに$\sin^2\theta$，$\cos^2\theta$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～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×ｎ行列の全ての固有値
  e1 < e2 < ････ < en を求める
      DO 100 K=N,2,-1
      Z=eK                   ←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 × n 行列

Ｄ，Ｓは，r × r 行列

但し，$n = r^2$

$$D = \begin{array}{|c|c|c|c|c|c|}\hline 4 & & & & & \\ \hline & 4 & & & & \\ \hline & & 4 & & & \\ \hline & & & \ddots & & \\ \hline & & & & 4 & \\ \hline & & & & & 4 \\ \hline \end{array} \qquad S = \begin{array}{|c|c|c|c|c|c|}\hline & -1 & & & & \\ \hline -1 & & -1 & & & \\ \hline & -1 & & -1 & & \\ \hline & & \ddots & & \ddots & \\ \hline & & & -1 & & -1 \\ \hline & & & & -1 & \\ \hline \end{array}$$

r × 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ＣＰＵ時間（マイクロ秒）	Ｆ行列	Ｈ行列
Ｄ１	1	0	5951	10163
Ｄ２	3	37	5133	8334
Ｎ３	8	38	4898	7339
Ｄ３	91	100	4980	7349
Ｎ４	17	42	4898	6980
Ｄ４	152	143	5285	7388
Ｑ20	46	249	4645	5704
ＱＮ	44	1043	4469	4954
ＮＮ	49	1251	4465	4855
ＱＮＯ	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ＣＰＵ時間」は，その計算処理に要するＣＰＵ時間である．ＱＮＯでは，「一回当りのＣＰＵ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，ＣＰＵ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（Ｄ３，Ｄ４）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: 電算機を利用させて頂いた名大・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ー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).