

レゾルベントを用いた固有ベクトル計算

田島慎一

新潟大学工学部情報工学科*

SHINICHI TAJIMA

DEPT. OF INFORMATION ENGINEERING, NIIGATA UNIV.

樋口水紀

新潟大学工学部情報工学科

MIKI HIGUCHI

DEPT. OF INFORMATION ENGINEERING, NIIGATA UNIV.

1 はじめに

固有値問題は線形代数の中核をなす重要な問題である。特性多項式に関しては、計算機代数の観点からも盛んに研究がなされ、様々な計算法が知られている。現在、サイズが比較的大きな行列に関しても、その特性多項式を効率的に求めることが実際に可能となっている。其れに比べ、固有ベクトル計算に関する研究は十分にはなされていないように思える。そこで本研究では、行列とその特性方程式が与えられているような場合に、固有ベクトルを exact に求める方法について考察する。本研究の最も基本的なアイデアは「レゾルベントの留数解析を行う」ことにある。本稿では、主に特性方程式が既約であるような場合を扱い、論文 [13] で与えた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示し、さらに固有ベクトルを exact に求める効率的計算法を導出する。

2 スペクトル分解と固有ベクトル

A は $n \times n$ 正方行列であり、相異なる n 個の固有値 $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$ を持つとする。 $n \times n$ 単位行列を I とおく。この時、行列 A のレゾルベント $(\lambda I - A)^{-1}$ は、複素変数 λ に関し $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$ 以外では一価正則な有理関数となる。

固有値 α_i の周りのサイクル γ_i をとり、レゾルベント $(\lambda I - A)^{-1}$ の α_i における留数値

$$P_i = \frac{1}{2\pi\sqrt{-1}} \oint_{\gamma_i} (\lambda E - A)^{-1} d\lambda \quad (1)$$

を考える。行列 P_i は固有値 α_i が定める固有ベクトル空間への射影行列であり、これらは、行列 A のスペクトル分解

$$\begin{aligned} P_1 + P_2 + \dots + P_n &= I, \\ \alpha_1 P_1 + \alpha_2 P_2 + \dots + \alpha_n P_n &= A \end{aligned}$$

*tajima@ie.niigata-u.ac.jp

を与える。これらのことから明らかなように、特性多項式が重複因子を持たない場合は、射影行列 P_i の列ベクトルは与えられた行列 A の固有値 α_i に対する固有ベクトルである。具体例として、論文 [13] において与えた次の 3×3 行列を考える。

$$A = \begin{pmatrix} -4 & 5 & -4 \\ -3 & 3 & 3 \\ -1 & -2 & 3 \end{pmatrix}$$

特性多項式 $f(\lambda) = \lambda^3 - 2\lambda^2 + 2\lambda + 66$ は無平方である。論文 [13] に従い、行列 $P(\lambda)$ を次で定める。

$$\frac{1}{60134} \left(\begin{pmatrix} 1424 & -1509 & 1250 \\ 909 & -731 & -849 \\ 317 & 572 & -693 \end{pmatrix} \lambda^2 + \begin{pmatrix} -5267 & 3111 & -8973 \\ -2412 & 5512 & -6678 \\ -2925 & 3543 & -245 \end{pmatrix} \lambda + \begin{pmatrix} 23556 & -2074 & 5982 \\ 1608 & 16370 & 4452 \\ 1950 & -2362 & 20208 \end{pmatrix} \right)$$

行列 A の固有値を α, β, γ とおくと $P(\alpha), P(\beta), P(\gamma)$ は、行列 A のスペクトル分解を与える。ここで、行列 $P(\lambda)$ の第一列目の列ベクトル

$$\frac{1}{60134} \begin{pmatrix} 1424\lambda^2 - 5267\lambda + 23556 \\ 909\lambda^2 - 2412\lambda + 1608 \\ 317\lambda^2 - 2925\lambda + 1950 \end{pmatrix}$$

に注目し、これを $p(\lambda)$ とおく。このとき、ベクトル $p(\alpha), p(\beta), p(\gamma)$ はそれぞれ、固有値 α, β, γ に関する固有ベクトルとなる。さらに

$$\alpha + \beta + \gamma = 2, \quad \alpha\beta + \beta\gamma + \gamma\alpha = 2, \quad \alpha\beta\gamma = -66$$

より、

$$p(\alpha) + p(\beta) + p(\gamma) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

を満たすことを確かめることが出来る。

3 並列化可能性

行列 A の特性多項式 $f(\lambda)$ に対し $\psi(x, y) = \frac{f(x) - f(y)}{x - y}$ とおき、 $\psi(x, y)$ を用いて、行列 $\Psi(\lambda)$ を

$$\Psi(\lambda) = \psi(A, \lambda I)$$

で定める。このとき、レゾルベントは

$$(\lambda I - A)^{-1} = \frac{1}{f(\lambda)} \Psi(\lambda)$$

と表現され、 λ に関し、 $f(\lambda)$ の零点にのみ一位の極をもつ有理関数であることが分かる。スペクトル分解の理論により、固有値 α_i が定める固有ベクトル空間への射影行列は、留数を用いて

$$P_i = \frac{1}{2\pi\sqrt{-1}} \oint_{\gamma_i} (\lambda I - A)^{-1} d\lambda = \frac{1}{2\pi\sqrt{-1}} \oint_{\gamma_i} \frac{1}{f(\lambda)} \Psi(\lambda) d\lambda$$

と表現される. さて, 特性多項式 $f(\lambda)$ は重複因子を持たないと仮定してあるので

$$a(\lambda)f(\lambda) + b(\lambda)f'(\lambda) = 1$$

を満たす多項式 $b(\lambda)$ が存在する. 式 (2) の被積分関数の分子 1 を $1 = a(\lambda)f(\lambda) + b(\lambda)f'(\lambda)$ に置き換え, 留数計算を行うことで $P_i = b(\alpha_i)\Psi(\alpha_i)$ を得る. さてここで, 行列係数の多項式

$$P(\lambda) = b(\lambda)\Psi(\lambda) \text{ mod } f(\lambda)$$

を導入する. 明らかに, $P_i = P(\alpha_i)$ が成立するので, 全ての固有ベクトルは, 固有値の多項式として同一の表現を持つことが示された. この多項式 $P(\lambda)$ を求めることで, 行列 A のスペクトル分解が構成できる. 以上が論文 [13] で与えたスペクトル分解アルゴリズムの骨格である.

準備が整ったので, これよりスペクトル分解を与える行列 $P(\lambda)$ の指定された列ベクトルのみを計算することが可能であるか否かについて考える.

まず, 行列 $\Psi(\lambda)$ の第 j 番目の列ベクトルを $\eta(\lambda)$ とおき, それを λ の冪で展開し

$$\eta(\lambda) = \eta_{n-1}\lambda^{n-1} + \eta_{n-2}\lambda^{n-2} + \eta_{n-3}\lambda^{n-3} + \cdots + \eta_1\lambda + \eta_0$$

とおく. いま, 特性多項式 $f(\lambda)$ の展開式が

$$f(\lambda) = \lambda^n + a_{n-1}\lambda^{n-1} + a_{n-2}\lambda^{n-2} + \cdots + a_1\lambda + a_0$$

であるとする, 行列 $\Psi(\lambda)$ は

$$\Psi(\lambda) = I\lambda^{n-1} + (A + a_{n-1}I)\lambda^{n-2} + (A^2 + a_{n-1}A + a_{n-2}I)\lambda^{n-2} + \cdots + (A^{n-1} + a_{n-1}A^{n-2} + \cdots + a_1I)$$

と与えられる. さて, 第 j 成分が 1 で他の成分が全て 0 であるような基本単位ベクトルを e_j で表すと, $\eta(\lambda) = \Psi(\lambda)e_j$ であることから $\eta_{n-1} = e_j$ が直ちに従い, 更に, $\eta(\lambda)$ の係数ベクトルは漸化式

$$\eta_{n-k-1} = A\eta_{n-k} + a_{n-k-1}e_j, \quad k = 1, 2, \dots, n-1$$

を満たすことが分かる. 行列 $P(\lambda)$ の第 j 番目の列ベクトルは, 行列 $\Psi(\lambda)$ の第 j 番目の列ベクトル $\eta(\lambda)$ に多項式 $b(\lambda)$ を掛けた後, $f(\lambda)$ による剰余を取ることで求めることができる.

以上のことから, 行列積を避け, 行列 $P(\lambda)$ の指定された列ベクトルを計算することが可能であることが分かった.

具体例として, 行列

$$A = \begin{pmatrix} -4 & 5 & -4 \\ -3 & 3 & 3 \\ -1 & -2 & 3 \end{pmatrix}$$

を再び取り上げ, 今度は, スペクトル分解行列の第 2 列目を計算してみる.

特性多項式は $f(\lambda) = \lambda^3 - 2\lambda^2 + 2\lambda + 66$ であることから, 行列 $\Psi(\lambda)$ の第 2 列目の列ベクトル $\eta(\lambda)$ を

$$\eta(\lambda) = \eta_2\lambda^2 + \eta_1\lambda + \eta_0$$

とおくと, 係数ベクトルが

$$\eta_2 = e_2, \quad \eta_1 = A\eta_2 - 2e_2, \quad \eta_0 = A\eta_1 + 2e_2$$

を満たすことから、 $\eta(\lambda)$ は

$$\eta(\lambda) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \lambda^2 + \begin{pmatrix} 5 \\ 1 \\ -2 \end{pmatrix} \lambda + \begin{pmatrix} -7 \\ -16 \\ -13 \end{pmatrix}$$

と計算できる. 特性多項式の導関数 $f'(\lambda) = 3\lambda^2 - 4\lambda + 2$ の剰余体 $\mathbf{Q}[\lambda]/\langle f(\lambda) \rangle$ での逆元 $b(\lambda)$ は

$$b(\lambda) = \frac{1}{60134}(2\lambda^2 - 303\lambda + 202)$$

である. ここで

$$\lambda(2\lambda^2 - 303\lambda + 202) \bmod f(\lambda) = -299\lambda^2 + 198\lambda - 132,$$

$$\lambda(-299\lambda^2 + 198\lambda - 132) \bmod f(\lambda) = -400\lambda + 730\lambda + 19734$$

を用いて, 行列 $P(\lambda)$ の第 2 番目の列ベクトルの分子多項式を計算し

$$\begin{pmatrix} -1509 \\ -731 \\ 572 \end{pmatrix} \lambda^2 + \begin{pmatrix} 3111 \\ 5512 \\ 3543 \end{pmatrix} \lambda + \begin{pmatrix} -2074 \\ 16370 \\ -2362 \end{pmatrix}$$

を得る. このベクトルを 60134 で割ることで, スペクトル分解行列 $P(\lambda)$ の第 2 番目の列ベクトル $p(\lambda)$ を得る. このベクトル $p(\lambda)$ の不定元 λ に固有値 α, β, γ を代入したベクトルは,

$$p(\alpha) + p(\beta) + p(\gamma) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \alpha p(\alpha) + \beta p(\beta) + \gamma p(\gamma) = \begin{pmatrix} 5 \\ 3 \\ -2 \end{pmatrix}$$

をみだす.

以上述べた方法に基づいて「スペクトル分解行列の指定した列ベクトルのみを求めるアルゴリズム」を構成, プログラムを試作した. このプログラムは, (有理数を成分に持つ) 行列とその特性多項式, スペクトル分解行列の第何番目の列ベクトルを求めたいかを指定するための列ベクトルの番号の 3 つの引数を入力すると, 最小多項式が重複因子を持たない場合に, スペクトル分解行列の指定された列のみを計算する. 数式処理システム Risa/Asir に実装したプログラムを用いて, 実行時間を測定した. 計測実験には, Pentium(R)4, 2.52GHz, 2GB メモリーの計算機 (Windows XP) を使用した. 行列は, -65536~65535 の範囲のランダムな整数を成分に持つような n 次正方行列とした. 行列サイズを $n = 20, 30, 40, 50, 60, 70, 80$ で変化させ, 各々 10 回ずつ計算所要時間を計測し, その平均を取った.

測定結果 (単位: sec)

n	計算時間
20	0.04581
30	3.15625
40	14.87030
50	46.11877
60	127.9990
70	249.7555
80	544.6016

論文 [13] で与えたスペクトル分解を求めるアルゴリズムと計算時間を比較すると、行列成分を、-65536～65535 の範囲からランダムに選んだ場合、行列サイズが 30×30 のとき、約 11 倍、行列サイズが 40×40 の場合で約 16 倍ほど計算が速いことになる。また、列ベクトルのみを計算することで、扱える行列のサイズも大きくなることがわかった。これらのことから、スペクトル分解アルゴリズムを並列化することは、有効な方法であることが予想される。スペクトル分解アルゴリズムの並列化に関しては、論文 [8] を参照されたい。

補足 2009 年 1 月に、小原功任氏と共同で、この節で与えた「スペクトル分解行列の指定した列ベクトルのみを求めるアルゴリズム」よりも計算効率の良いアルゴリズムを導出した。先程と同じ入力に対し、計算時間は行列サイズが 50×50 の時、40.0000 秒、 60×60 の時、94.53348 秒、 70×70 の時、139.5103 秒、 80×80 の時、303.5471 秒であった。行列サイズが大きくなるとより効率的なアルゴリズムであることになる。このアルゴリズムに関しては、稿を改めて報告したい。

4 固有ベクトル計算

2001 年の森継修一、栗山和子の論文 [6] において既に指摘されているように、Maple, Reduce, Mathematica 等の数式処理システムに組み込まれている関数を用いて行列の固有ベクトルを記号代数的に exact に計算させようとしても、サイズのごく小さな行列しか実際には扱うことが出来ない。森継氏の論文によると、例えば、MapleV では、固有ベクトルを固有値の多項式として表現する式を戻り値として返すが、5 桁程度の整数を成分にもつ行列の場合、行列サイズが 10×10 の時、1,368 秒、 18×18 の時、438.187 秒計算にかかっている（使用計算機は H9000VK270, CPU: PA-8000, 160MHz, 128MB）。行列サイズが 20×20 となるとメモリー不足のため計算不能となっている。Reduce では、MapleV に比べ計算速度が 2 千倍近く速いが、行列サイズは、先ほどと同じ条件の元で 16×16 まではしか計算を実行できない。しかも Reduce の場合、固有ベクトルを固有値の有理関数として表現する式を返すため、計算結果を多項式表現に変換する際に相当量の時間が必要になることが森継氏により指摘されている。また、Mathematica の場合、行列サイズが 8×8 程度でメモリー不足に陥ると報告されている。

これ等に比べ、森継、栗山の提案した計算法では、（同一計算機で行列成分に関しても同一条件の下）行列サイズが 20×20 の時、固有ベクトルの計算に 498 秒、 30×30 の時、7,397 秒、 40×40 の時、56,319 秒、 50×50 の時、254,241 秒かかると報告されている。

さて、前節で与えたのは「スペクトル分解行列の指定した列ベクトルのみを求めるアルゴリズム」は、基本単位ベクトルを固有ベクトルの和に分解する公式を与えるものであると解釈できる。特に、行列の特性多項式が既約であるような場合は、その戻り値は（零でない）固有ベクトルを固有値の多項式として表現する式となる。森継、栗山らのデータと見比べれば、（使用した計算機が異なるので計算効率の比較を直接行うことは出来ないが）前節で提案した計算方法は、固有ベクトル計算のアルゴリズムとして用いても、計算効率が極めて良いことが分かる。

そこで本節では、「基本単位ベクトルの固有ベクトルへの分解」という制約条件を取り外し、与えられた固有値に対する固有ベクトルを計算する方法について考える。さて、そこで

$$P_i = b(\alpha_i)\Psi(\alpha_i)$$

に注目する。ここで、 $b(\alpha_i)$ はスカラー量であるので、行列 $\Psi(\alpha_i)$ の列ベクトルは、（それが零ベクトルでない場合は）行列 A の固有値 α_i に関する固有ベクトルとなる。このことは $f(x) - f(y) = (x - y)\psi(x, y)$ よ

り, $(A - \alpha_i I)\Psi(\alpha_i) = 0$ が直ちに従うことから明らかである. 例えば

$$A = \begin{pmatrix} -4 & 5 & -4 \\ -3 & 3 & 3 \\ -1 & -2 & 3 \end{pmatrix}$$

の場合

$$\Psi(\lambda) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \lambda^2 + \begin{pmatrix} -6 & 5 & -4 \\ -3 & 1 & 3 \\ -1 & -2 & 1 \end{pmatrix} \lambda + \begin{pmatrix} 15 & -7 & 27 \\ 6 & -16 & 24 \\ 9 & -13 & 3 \end{pmatrix}$$

であるが, $\Psi(\alpha_i)$ の各列ベクトルは何れも, 行列 A の固有値 α_i に関する固有ベクトルであることが容易に確かめられる.

一般に, スペクトル分解の理論より, 整数 (あるいは有理数) 行列の特性多項式が, 整数 (あるいは有理数) 係数多項式環において既約であるとする, $\Psi(\alpha_i)$ のどの列ベクトルも零とはならないことが分かる. 従って, 特性多項式が既約であるような場合は, 行列 $\Psi(\lambda)$ の任意の一行を求めることで固有値の多項式として固有ベクトルを表現する式を構成できることになる.

アルゴリズムの性能を評価するため, 先ほどと同じ計算機を用いて, $-65536 \sim 65535$ の範囲のランダムな整数を成分に持つような正方行列に対し計算実験を行った. プログラムの引数は, 行列とその特性多項式, $\Psi(\lambda)$ の何番目の列ベクトルを求めるかを指定するための整数である. 行列のサイズが大きいため特性多項式は, 木村欣司氏のプログラムを用いて計算し, その既約性も予めチェックしておく. 行列サイズを $n = 20, 40, 60, 80, 100, 120, 150, 200$ と変化させ, 固有ベクトルの計算所要時間を各々10回ずつ計測し, その平均を取った. 以下がその結果である.

測定結果 (単位: sec)

n	計算所要時間
20	0.01563
40	0.07813
60	0.26563
80	0.73438
100	1.64063
120	3.07813
150	7.20313
200	21.12500

この計算法は, 1949年に発表された Frame の計算法を更に簡単にしたものを見做すことができるが, 固有ベクトルを exact に求める方法として, 計算効率の面で非常に優れていることが確かめられた.

行列の特性多項式 $f(\lambda)$ が無平方であり, $F(\lambda) = p_1(\lambda)p_2(\lambda) \cdots p_s(\lambda)$ と整数係数多項式の積に因数分解される場合, $p_k(\alpha) = 0$ なる固有値 α に関する固有ベクトルは, 固有値 α の $\deg(p_k) - 1$ 次多項式として表現できる. 論文 [10] あるいは [11] で補間と留数に関して述べた事柄等を用いると, 特性多項式が既約な場合の計算法を拡張することで固有ベクトルを求めるアルゴリズムを構成できる. また, クリロフの方法 ([5]) と組み合わせることで, 固有ベクトル計算の効率化を図ることができる. これらの結果については, 稿を改めて述べることにする.

5 あとがき

一昨年前, Maple12 の組み込み関数を用いて固有ベクトル計算を行った. MapleV に比べ計算速度はかなり速くなっていたが, 固有ベクトルを固有値の有理関数として表示する式を戻すようにアルゴリズムが変更されていた. メモリーが 1GB 程度の通常のパソコンを使用した, 5 桁程度の整数を成分に持つ行列の場合, 17×17 程度でメモリー不足に陥ってしまう. 固有ベクトル解析は極めて重要なテーマであるにもかかわらず, 森継氏の研究をはじめとした計算機代数の研究成果が, Maple のように世界的に定評のある数式処理にも未だ活かされていないことは大変に残念なことであると強く感じた. このことが一つの大きな動機となり, 本研究を行うことになった.

本稿で扱った問題は行列の特性多項式が無平方な場合であるので, スペクトル分解や固有ベクトル計算のアルゴリズムを導出するのに, 留数の概念は必要はなく, ラグランジュの補間公式を用いるだけで事足りる. しかし, 最小多項式が重複因子を持つような一般的な場合にスペクトル分解や一般固有ベクトル空間を求めるアルゴリズムを研究・開発していく際は, 留数の概念を用いたスペクトル分解の理論に基づいて問題を扱うことが有効となる. 実際, 論文 [7], [4], [12] 等の結果を用いることで, 最小多項式が重複因子を持つような行列に対してもスペクトル分解や一般固有ベクトル空間を求めるアルゴリズムを構成することが可能である. 今後, これら固有値問題に関連する一連のアルゴリズムの研究・開発を続け, 数式処理システム Risa/Asir への実装を行いたいと考えている.

本研究を行うにあたり, 筑波大学の森継修一先生, 立教大学の横山和弘先生, 神戸大学の野呂正行先生, 京都大学の木村欣司先生との研究討議は, 大変有意義であった. ここに感謝の意を表したい.

本研究は, 山口奨学育英会の研究助成を受けている.

参 考 文 献

- [1] J. Abdeljaoued et H. Lombardi, Méthodes matricielles - Introduction à la complexité algébrique, Springer, 2004.
- [2] J. S. Frame, A simple recurrent formula for inverting a matrix (abstract), Bull. Amer. math. Soc., **55** (1949), p. 1045.
- [3] T. Kato, A Short Introduction to Perturbation Theory for Linear Operators, Springer-Verlag, 1982.
- [4] 加藤涼香, 田島慎一, 有理関数のローラン展開アルゴリズムと代数的局所コホモロジー, 京都大学数理解析研究所講究録, **1395** (2004), 50–56.
- [5] A. N. Krylov, On the numerical solution of the equation by which in technical questions frequencies of small oscillations of material systems are determined (in Russian), Izvestija AN SSSR, Otdel. mat. i. estest. nauk, **7** (1931), 491–539.
- [6] 森継修一, 栗山和子, 行列の固有値・固有ベクトル・一般固有ベクトルの数式処理による記号的計算法, 日本応用数学会論文誌, **11**, No. 2 (2001), 103–120.
- [7] Y. Nakamura and S. Tajima, Residue calculus with differential operators, Kyushu J. of Math. **54** (2000), 127–138.
- [8] 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, 本講究録掲載予定
- [9] C. Pernet, Algèbre linéaire exacte efficace: le calcul du polynôme caractéristique, PhD dissertation, University Joseph Fourier (Grenoble, France), 2006, <http://membres-liglab.image.fr/pernet/>

- [10] 田島慎一, 多変数補間問題とホロノミック D-加群, 千葉大学数学セミナーノート, No. 9 (1999), 73–94.
- [11] 田島慎一, Holonomic な定数係数線形偏微分方程式系と Grothendieck duality, 京都大学数理解析研究所講究録, **1509** (2006), 1–23.
- [12] 田島慎一, 一変数留数計算アルゴリズムについて, 京都大学数理解析研究所講究録, **1509** (2006), 24–50.
- [13] 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, 本講究録掲載予定