九州大学学術情報リポジトリ
Kyushu University Institutional Repository

2次非線形方程式の求解によるニュートン法を用いた固有値問題の逐次解法

安河内，進士
同志社大学大学院工学研究科

近藤，弘一
同志社大学理工学部

岩崎，雅史
京都府立大学生命環境学部

https://doi.org/10.15017/14308

出版情報：応用力学研究所研究集会報告. 20ME-S7 (36), 2009-02. 九州大学応用力学研究所
バージョン：
権利関係：

応用力学研究所研究集会報告 No.20ME-S7
「**非線形波動の数理と物理**」（研究代表者　矢嶋　徹）
共催　九州大学グローバル COE プログラム
「マス・フォア・インダストリ教育研究拠点」

Reports of RIAM Symposium No.20ME-S7
Mathematics and Physics in Nonlinear Waves
Proceedings of a symposium held at Chikushi Campus, Kyushu Universiy,
Kasuga, Fukuoka, Japan, November 6 - 8, 2008

Co-organized by
Kyushu University Global COE Program
Education and Research Hub for Mathematics - for - Industry

Article No. 36 (pp. 211-217)

2次非線形方程式の求解によるニュートン法を用いた固有値問題の逐次解法

安河内 進士 (YASUKOUCHI Shinji), 近藤 弘一 (KONDO Koichi), 岩崎 雅史 (IWASAKI Masashi)

（Received January 30, 2009）

Research Institute for Applied Mechanics
Kyushu University
February, 2009

2 次非線形方程式の求解によるニュートン法を用いた固有値問題の逐次解法

同志社大学大学院工学研究科　安河内進士　(YASUKOUCHI Shinji)
同志社大学理工学部　近藤弘一　(KONDO Koichi)
京都府立大学生命環境学部　岩崎雅史　(IWASAKI Masashi)

概　要　固有値問題を非線形方程式の解法に変えニュートン法によりこれを解く．本提案手法では固有ベクトルの存在範囲に条件を課すことですべての固有対を逐次的に求める．本手法は非対称行列，重複固有値の場合でも適用可能である．

1　はじめに

本論では固有値分解に関する数値アルゴリズムについて議論する．Elgindi[2] らは固有ベクトルの成分の 1 つを 1 と固定することで固有値問題を非線形方程式の求解問題に置き換え，ニュートン法と連続変化法を用いて全ての固有対を求める．しかし，重複固有値をもつ行列に関しては，線形独立な固有ベクトルすべてを求めることができない等の問題点がある．本論では連続変化法を用いない別のアルゴリズムを提案し，重複固有値の場合でも精度良く固有値分解できることを数値的に示す．本提案アルゴリズムは次の通りである．まず，固有ベクトルが平面上にあるという条件を課し，固有値問題を非線形方程式に置き換える．得られた非線形方程式をニュートン法を用いて解いて，１組の固有対を求める．次に，既得の固有ベクトルから生成される部分空間の直交補空間の中から平面の法線ベクトルを選び直す．平面上には既得の固有ベクトルは存在しないため，ニュートン法は一度得られた固有ベクトルに収束することはない．

2　ニュートン法による固有値問題

本節ではまず，1 組の固有対を求めるアルゴリズムについて述べる．固有値問題

$$A\boldsymbol{x} = \lambda\boldsymbol{x}, \quad A \in \mathbb{C}^{n\times n},\ \boldsymbol{x} \in \mathbb{C}^n,\ \lambda \in \mathbb{C} \tag{2.1}$$

を考える．固有値 λ と固有ベクトル $\boldsymbol{x}$ の要素が全て未知であるとすると，未知変数の個数は $n+1$ 個であり，方程式の本数は n 本である．未知変数の個数に対して方程式が 1 本不足している．そこで，$\boldsymbol{x}$ が超平面

$$P = \{\boldsymbol{x} \,|\, (\boldsymbol{z}, \boldsymbol{x}) = C\} \tag{2.2}$$

上に存在するとする (図 1(a) 参照)．ここで，$(\boldsymbol{z}, \boldsymbol{x}) = \boldsymbol{z}^H\boldsymbol{x}$ は内積，上付添字 H は共役転置を表すとする．C は定数であり，固有ベクトルのノルムの任意性より，C は自由に選べることに注意する．(2.1) の両辺と $\boldsymbol{z}$ の内積をとると，λ は

$$\lambda(\boldsymbol{x}) = \frac{(A^H\boldsymbol{z}, \boldsymbol{x})}{(\boldsymbol{z}, \boldsymbol{x})} = \frac{(\boldsymbol{w}, \boldsymbol{x})}{C}, \quad \boldsymbol{w} = A^H\boldsymbol{z} \tag{2.3}$$

で与えられる．これを (2.1) に代入すると，固有値問題が 2 次非線形方程式

$$\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}) = A\boldsymbol{x} - \lambda(\boldsymbol{x})\boldsymbol{x} = A\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}\frac{(\boldsymbol{w}, \boldsymbol{x})}{C} = \boldsymbol{0} \tag{2.4}$$

に置き換わる．(2.4) に対して，ニュートン法

$$\boldsymbol{x}^{(l+1)} = \boldsymbol{x}^{(l)} - J(\boldsymbol{x}^{(l)})^{-1}\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}^{(l)}), \qquad l = 0, 1, 2, \cdots, l_{\max} \tag{2.5}$$

を適用する．ただし，$J(\boldsymbol{x})$ は $\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x})$ のヤコビ行列であり，

$$J(\boldsymbol{x}) = \nabla\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}) = A - I\lambda(\boldsymbol{x}) - \frac{\boldsymbol{x}\boldsymbol{w}^H}{C}, \quad \lambda(\boldsymbol{x}) = \frac{(\boldsymbol{w}, \boldsymbol{x})}{C} \tag{2.6}$$

で与えられる．ここで，各ステップで得られる $\boldsymbol{x}^{(l)}$ を平面 $(\boldsymbol{z}, \boldsymbol{x}) = C$ 上にのせるために，(2.5) を

$$\boldsymbol{x}^{(l+1)} = \frac{C\hat{\boldsymbol{x}}^{(l+1)}}{(\boldsymbol{z}, \hat{\boldsymbol{x}}^{(l+1)})}, \quad \hat{\boldsymbol{x}}^{(l+1)} = \boldsymbol{x}^{(l)} - J(\boldsymbol{x}^{(l)})^{-1}\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}^{(l)}) \tag{2.7}$$

と変形する．反復計算 (2.7) の終了条件は

$$\|\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}^{(l)})\|_\infty < \varepsilon_{\mathrm{itr}}\|\boldsymbol{x}^{(l)}\|_2 \tag{2.8}$$

とする．(2.8) は

$$\frac{\|\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}^{(l)})\|_\infty}{\|\boldsymbol{x}^{(l)}\|_2} = \left\| A\frac{\boldsymbol{x}^{(l)}}{\|\boldsymbol{x}^{(l)}\|_2} - \lambda(\boldsymbol{x}^{(l)})\frac{\boldsymbol{x}^{(l)}}{\|\boldsymbol{x}^{(l)}\|_2} \right\|_\infty < \varepsilon_{\mathrm{itr}} \tag{2.9}$$

とも書けるので，$\boldsymbol{x}^{(l)}$ を各ステップで規格化しているともみえる．$\boldsymbol{x}^{(l)}$ を球面 $\|\boldsymbol{x}\|_2 = 1$ と平面 $(\boldsymbol{z}, \boldsymbol{x}) = C$ の両方の上に存在させるために，各ステップで平面の定数項 C を $C^{(l)} = (\boldsymbol{z}, \boldsymbol{x}^{(l)})$ と更新する．これにより，平面は法線ベクトル $\boldsymbol{z}$ の向きを変えず平行移動する（図 1(b) 参照）．このとき (2.7) は

$$\boldsymbol{x}^{(l+1)} = \frac{\hat{\boldsymbol{x}}^{(l+1)}}{\|\hat{\boldsymbol{x}}^{(l+1)}\|_2}, \quad \hat{\boldsymbol{x}}^{(l+1)} = \boldsymbol{x}^{(l)} - J(\boldsymbol{x}^{(l)})^{-1}\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}^{(l)}) \tag{2.10}$$

となる．(2.6) は

$$J(\boldsymbol{x}^{(l)}) = \nabla\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}^{(l)}) = A - I\lambda(\boldsymbol{x}^{(l)}) - \frac{\boldsymbol{x}^{(l)}\boldsymbol{w}^H}{C^{(l)}}, \quad \lambda(\boldsymbol{x}^{(l)}) = \frac{(\boldsymbol{w}, \boldsymbol{x}^{(l)})}{C^{(l)}}, \quad C^{(l)} = (\boldsymbol{z}, \boldsymbol{x}) \tag{2.11}$$

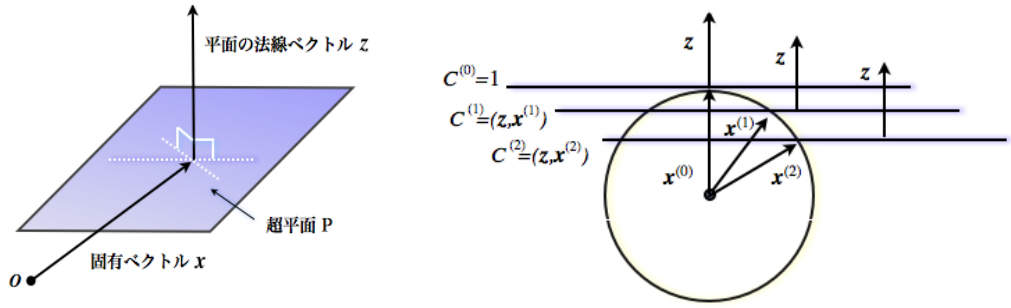
となる．終了条件 (2.8) は

$$\|\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}^{(l)})\|_\infty < \varepsilon_{\mathrm{itr}} \tag{2.12}$$

となる．反復計算 (2.10) のあるステップ $l = l^*$ で終了条件 (2.12) をみたすとき，(2.10) は収束したとみなし，$\boldsymbol{x}^{(l^*)}$ を A の固有ベクトルの 1 つとする．$l = l_{\max}$ で (2.12) をみたさないときは発散したとみなす．また，得られた固有ベクトルを (2.3) に代入することで，対応する固有値が求まり，1 組の固有対が得られる．

3　ニュートン法で表れるカオス

ニュートン法は一般に局所的には 2 次収束であり高速に収束するが，大域的な収束条件は難しい課題である．前節で構成した (2.10) についても同様のことがいえる．つまり，(2.10) に初期値



(a) 固有ベクトルが存在する超平面　　(b) 固有ベクトルが存在する球面

図 1: 固有ベクトルの存在する平面と球面

を 1 つ与えるとある固有対が 1 組求まる．しかし，求めたい固有対に収束する初期値を定めることはできない．例えば，行列

$$A = \begin{pmatrix} 2.80 & -1.65 & 0.42 \\ 0.99 & -1.42 & 1.25 \\ 0.87 & -5.84 & 4.62 \end{pmatrix} \tag{3.1}$$

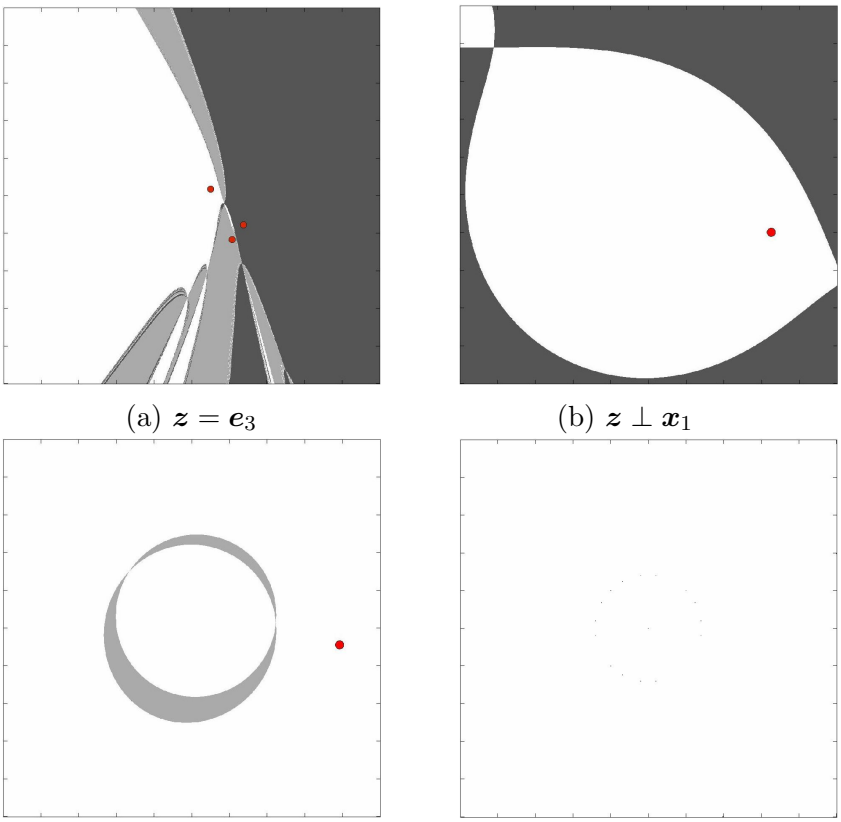
の固有対を (2.10) で求めるとき，与えた初期値とその極限の関係を考える．A の固有値は $\lambda = 1$, 2, 3 である．初期値をある平面 $(\boldsymbol{z}, \boldsymbol{x}) = C$ 上で $\boldsymbol{x}^{(0)} = \boldsymbol{z} + x\,\boldsymbol{p}_1 + y\,\boldsymbol{p}_2$ として様々に変化させる．ただし，$\boldsymbol{z}$, $\boldsymbol{p}_1$, $\boldsymbol{p}_2$ は $\boldsymbol{z} \perp \boldsymbol{p}_1$, $\boldsymbol{z} \perp \boldsymbol{p}_2$, $\boldsymbol{p}_1 \perp \boldsymbol{p}_2$, $-10 \leq x \leq 10$, $-10 \leq y \leq 10$ とする．与えた初期値に対してで求めた固有値に対応する表 1 の色をそれぞれプロットする．図 2(a) に $\boldsymbol{z} = (0, 0, 1)^T$ としたときの図を示す．各色の境界線は複雑に入り組んでおり，ある固有対を求めるために適切に初期値を選定することは極めて難しい．そこで，初期値を適切に与えるのではなく，一度得られた固有ベクトルには収束しない方法を考える．法線ベクトル $\boldsymbol{z}$ が任意に設定可能であることに着目する．例えば，$\boldsymbol{x}_1$ を既得の固有ベクトルとする．$\boldsymbol{z}$ を $\boldsymbol{z} \perp \boldsymbol{x}_1$ となるように選ぶ．図 2(b) がそのときの収束領域である．$\boldsymbol{x}_1$ に対応する明灰色は存在せず，$\boldsymbol{x}_1$ には収束していない．また，$\boldsymbol{z}$ を $\boldsymbol{z} \perp \boldsymbol{x}_2$ となるように選ぶと収束領域は図 2 (c) のようになる．$\boldsymbol{x}_2$ に対応する暗灰色には収束していない．また，$\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2$ を既得の固有ベクトルとする．$\boldsymbol{z}$ を $\boldsymbol{z} \perp \langle \boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2 \rangle_{\mathbb{C}}$ となるようにを選ぶと図 2 (d) となり，$\boldsymbol{x}_3$ に対応する白色しかなく，$\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2$ には収束していない．以上より，法線ベクトル $\boldsymbol{z}$ を既得の固有ベクトルより生成される部分空間と直交させることで，既得の固有ベクトルには収束しない．これを基に逐次的に全ての固有対を求めるアルゴリズム構成する．

表 1: 行列 A の固有対と対応する図 2 における色

固有値	固有ベクトル	対応する色
$\lambda_1 = 1$	$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}_1$	明灰色
$\lambda_2 = 2$	$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}_2$	暗灰色
$\lambda_3 = 3$	$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}_3$	白色

4　ニュートン法の逐次解法による固有値分解

本節では，3 節のアイデアを基に逐次的に全ての固有対を求めるアルゴリズムを構成する．まず平面の法線ベクトル $\boldsymbol{z}$ と (2.10) の初期値 $\boldsymbol{x}^{(0)}$ をランダムに与える．(2.10) により得られた



(a) $\boldsymbol{z} = \boldsymbol{e}_3$ (b) $\boldsymbol{z} \perp \boldsymbol{x}_1$

(c) $\boldsymbol{z} \perp \boldsymbol{x}_2$ (d) $\boldsymbol{z} \perp \langle \boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2 \rangle_{\mathrm{C}}$

図 2: ニュートン法における固有値の収束領域

ベクトルを $\boldsymbol{x}_1$ とする．次に $\boldsymbol{z} \perp \boldsymbol{x}_1$ となるように $\boldsymbol{z}$ をランダムに選び直す．初期値 $\boldsymbol{x}^{(0)}$ もまたランダムに選び直す．同様にして (2.10) により固有ベクトルを求め $\boldsymbol{x}_2$ とする．さらに，$\boldsymbol{z} \perp W_2 = \langle \boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2 \rangle_{\mathbb{C}}$ となるように $\boldsymbol{z}$ を選び直す．初期値 $\boldsymbol{x}^{(0)}$ も選び直し，求めたベクトルを $\boldsymbol{x}_3$ とする．これを繰り返し固有ベクトル $\{\boldsymbol{x}_1, \cdots, \boldsymbol{x}_k\}$ を得る．部分空間 $W_k = \langle \boldsymbol{x}_1, \cdots, \boldsymbol{x}_k \rangle_{\mathbb{C}}$ の直交補空間を $W_k^{\perp}$ とし，$\boldsymbol{z} \in W_k^{\perp}$ となるように $\boldsymbol{z}$ を選べば，平面 P と W_k とは $P \cap W_k = \emptyset$ をみたす．反復計算 (2.10) により得られるベクトル列 $\{\boldsymbol{x}^{(l)}\}$ は $\{\boldsymbol{x}^{(l)}\} \in P$ であることから，その極限 $\boldsymbol{x}_{k+1}$ は $\boldsymbol{x}_{k+1} \notin W_k$ をみたす．よって，これを繰り返すことで，全ての固有ベクトル $\{\boldsymbol{x}_1, \cdots, \boldsymbol{x}_n\}$ が求まり，その固有値 $\{\lambda_1, \cdots, \lambda_n\}$ が (2.3) により求まる．以上より，行列 A の固有値分解 $A = XDX^{-1}, X = (\boldsymbol{x}_1 \cdots \boldsymbol{x}_n), D = \mathrm{diag}(\lambda_1, \cdots, \lambda_n)$ が得られる．

なお，法線ベクトル $\boldsymbol{z}$ を部分空間 W_k の直交補空間 $W_k^{\perp}$ から選ぶためには，W_k と $W_k^{\perp}$ の正規直交基底を求める必要がある．正規直交化にはグラム・シュミットの直交化法があるが，グラム・シュミットの直交化法では直交化の精度が良くない．そこで本論では，ハウスホルダー変換による QR 分解を用いて正規直交化を行う．QR 分解において，一般に必要とされるのは上三角行列 R であるが，本論では直交行列 Q を用いる．

5 数値実験

本節では，本提案アルゴリズムが有効に実行されるか数値実験により検証する．

提案アルゴリズムは前節で示した通りであるが，実際のプログラムでは各固有対の計算におけ

るニュートン法の発散を評価するために最大残差ノルム

$$E_{\max} = \max_{k=1,\cdots,n} \|A\boldsymbol{x}_k - \lambda_k \boldsymbol{x}_k\|_\infty \tag{5.1}$$

を用いる．また，独立なベクトルを正しく求めているか判定するために，得られた固有ベクトルと既得の固有ベクトルとのなす最小角度

$$\theta_{\min} = \frac{180}{\pi} \min_{i<j} \arccos\left(\frac{|(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j)|}{\|\boldsymbol{x}_i\|\|\boldsymbol{x}_j\|}\right) \tag{5.2}$$

を用いる．$E_{\max} > \varepsilon_{\mathrm{good}} = 10^{-13}$ または $\theta_{\min} < \theta_{\mathrm{same}} = 0.1\,^\circ$ をみたすときは初期値をランダムに選び直し再度固有対の計算を行う．1 組の固有対の計算が失敗した場合も含めたニュートン法の実行回数を試行回数 t と呼び，これを検証する．実験環境は，Linux 2.6.18，GNU C Compiler 4.1.2，CLAPACK 3.0 (BLAS2, dgesv) である．

5.1 対称行列の場合

まず，対称行列の場合を考える．ここで，テスト行列として $n \times n$ 型行列 A

$$A = \left.\begin{pmatrix} W & \delta & & \\ \delta & W & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & \delta \\ & & \delta & W \end{pmatrix}\right\} n = m\,b, \quad W = \left.\begin{pmatrix} 10 & 1 & & & & \\ 1 & 9 & 1 & & & \\ & 1 & \ddots & \ddots & & \\ & & \ddots & 0 & \ddots & \\ & & & \ddots & \ddots & 1 \\ & & & & 1 & 10 \end{pmatrix}\right\} m = 21$$

を考える．ただし，行列 W は Wilkinson 行列である．行列 A において糊付け係数 δ が零のとき，A の固有値は b 個ずつ重複する．また，$\delta = 10^{-4}$ のときは，固有値は $O(10^{-8})$ 程度で近接する．ブロック数 b を $b = 1, 2, \cdots, 20$ と変化させ，$\delta = 0$ と $\delta = 10^{-4}$ のときで実験を行う．行列 W の b 対 $E_{\max}$ をプロットしたグラフが図 3(a) である．重複および近接固有値を持つ両方の場合で，$E_{\max}$ は $O(10^{-14})$ 程度と精度よく求まる．試行回数 t のサイズ n に対する比を図 3(b) に示す．全ての b で $t/n = 1.0$ であり，理論通り n 回の試行で全ての固有対が得られている．他の対称行列に対しても同様の実験結果を得る．

5.2 非対称行列の場合

次に，非対称行列の場合で実験を行う．3 重対角の Toeplitz 行列

$$A = T^{(3)} = \left.\begin{pmatrix} 2 & 1 & & & \\ 3 & 2 & 1 & & \\ & 3 & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & 2 & 1 \\ & & & 3 & 2 \end{pmatrix}\right\} n$$

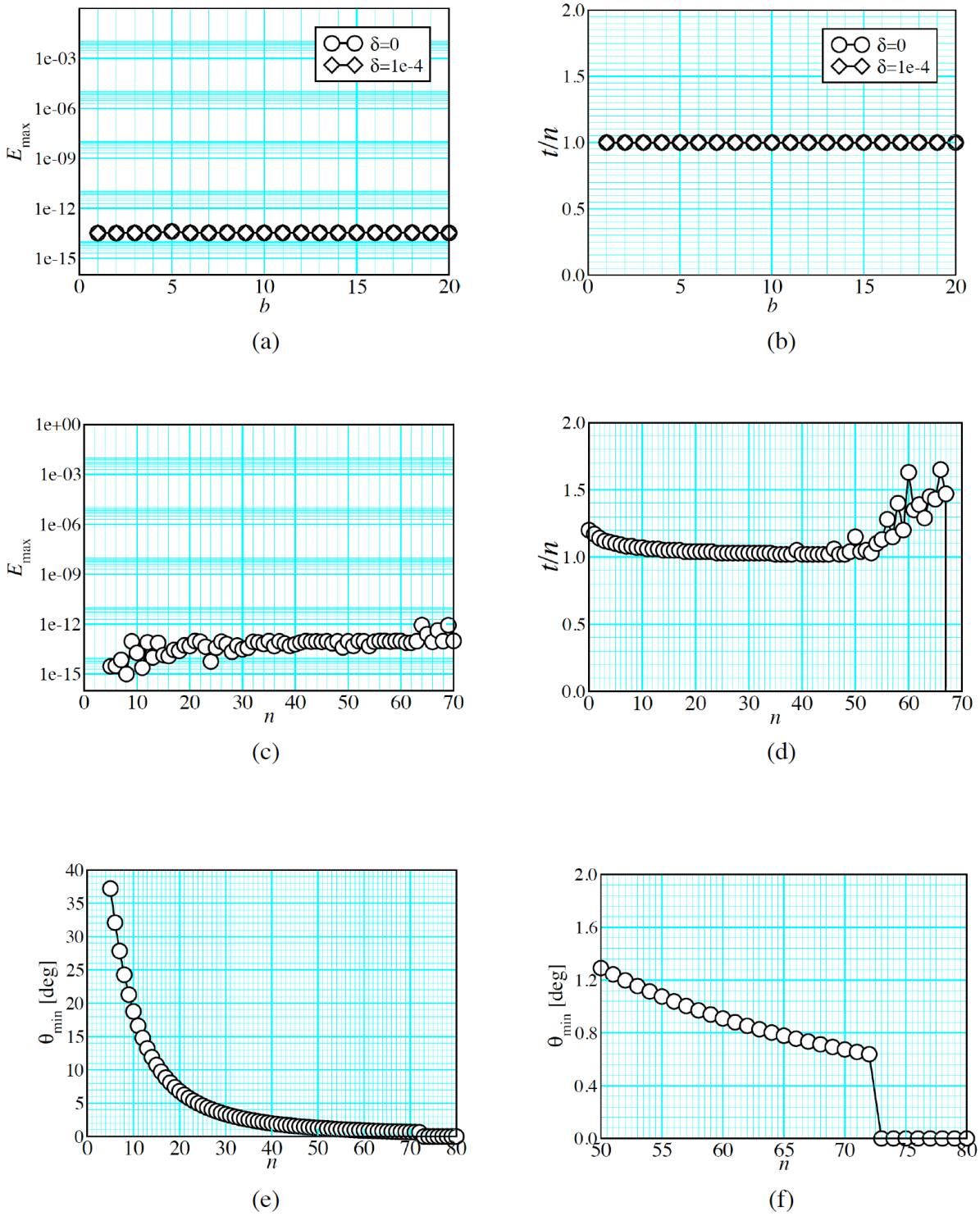


図 3: 数値実験結果

を用いる．サイズ n を変化させて実験を行う．図 3(c) に n 対 $E_{\max}$ の結果を示す．$E_{\max} = O(10^{-13})$ 程度であり，十分な精度が得られている．図 3(d) に試行回数の結果を示す．$n = 0, \cdots, 20$ のとき，t/n は 1 より若干大きい．実験結果を詳細に調べると，ニュートン法が発散する場合があり，再計算が多発している．本論で構成したニュートン法は収束の保証はない．そのためニュートン法が発散することもあり得る．$n = 50, \cdots, 70$ のときでは，同じ固有ベクトルに収束して再計

算が多発している．これは固有ベクトル同士のなす角が小さくなるために起こる．図 3(e) に $\theta_{\min}$ を示す．図 3(f) は 図 3(e) を $50 \leq n \leq 80$ で拡大したグラフである．n が大きくなるにつれ，最小角度 $\theta_{\min}$ が小さくなり，固有ベクトル同士は平行に近づく．$n = 50, \cdots, 70$ では，角度が 1° 程度であり，倍精度の桁数内では直交化が困難となるためと考えられる．また $n \geq 73$ では角度がほぼ零となる．これは正しい結果とは考えられない．本提案アルゴリズムでの固有ベクトル同士がなす限界最小角度は 0.6° 程度であるという結果を得る．

6 まとめ

本論では，固有値問題を非線形方程式の求解に置き換え，ニュートン法により全ての固有対を求める方法を提案した．固有ベクトル $\boldsymbol{x}$ がある平面上にあるとし，平面の法線ベクトルを既得の固有ベクトルより生成される直交補空間の中から選ぶことで，ニュートン法は既得の固有ベクトルに収束しない．これにより逐次的に全ての固有対を得るアルゴリズムを構成した．また，直交補空間の正規直交基底を得るために，上三角行列 R を保存しないハウスホルダー変換による QR 分解を構成した．最後に，数値実験により本提案アルゴリズムが理論通りに動作することを確認した．対称行列の場合では，n 回の試行で固有値分解ができることを確認した．非対称行列の場合では，固有ベクトル同士が平行に近づくと精度悪化することが確認され，限界角度は 0.6 °程度であることを数値的に示した．

参考文献

[1] F. シャトラン: 伊里正夫 訳，行列の固有値 最新の解法と応用，シュプリンガーフェアラーク東京, 1993.

[2] M. B. Elgindi and A. Kharab: The quadratic method for computing the eigenpairs of a matrix, Intern. J. Computer Math. **73** (2000), pp. 517–530.