

べき乗法とqd表による密行列の3重対角化について

大西, 洋平
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

Onishi, Yohei
Graduate School of Engineering, Doshisha University

Kondo, Koichi
Faculty of Science and Engineering, Doshisha University

<https://doi.org/10.15017/18718>

出版情報：応用力学研究所研究集会報告. 21ME-S7 (28), 2010-03. 九州大学応用力学研究所
バージョン：published
権利関係：



応用力学研究所研究集会報告 No.21ME-S7

「非線形波動研究の現状と将来 — 次の 10 年への展望」 (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.21ME-S7

*Current and Future Research on Nonlinear Waves —
Perspectives for the Next Decade*

Proceedings of a symposium held at Chikushi Campus, Kyushu University,
Kasuga, Fukuoka, Japan, November 19 - 21, 2009

Co-organized by

Kyushu University Global COE Program

Education and Research Hub for Mathematics - for - Industry

Article No. 28 (pp. 185-190)

べき乗法と qd 表による 密行列の 3 重対角化について

大西 洋平 (ONISHI Yohei), 近藤 弘一 (KONDO Koichi)

(Received January 28, 2010)



Research Institute for Applied Mechanics
Kyushu University
March, 2010

べき乗法と qd 表による密行列の 3 重対角化について

同志社大学大学院工学研究科 大西 洋平 (ONISHI Yohei)
同志社大学理工学部 近藤 弘一 (KONDO Koichi)

概要 ベルヌーイ法は多項式の根のうち絶対値が最大な根を 1 つ求める古典的な算法であり, 多項式のコンパニオン行列に対するある種のべき乗法とみなされる. 本論では, 一般の行列に対するべき乗法から得られる数列を初期値とする qd 表と行列の固有値, 固有多項式の係数, 同じ固有値をもつ別の 3 重対角行列との関係を明らかにする.

1 はじめに

多項式の根を数値的に求める古典的な算法としてベルヌーイ法が知られている. ベルヌーイ法は絶対値が最大となる根を 1 つのみ求める手法である. 全ての根を求めるための算法としては qd アルゴリズムが提案されている. qd アルゴリズムの解析は [1] が詳しい. [1] ではべき級数で与えられる有理型関数と多項式の根, 3 重対角行列の固有値, 連分数展開との関係を qd アルゴリズムを通して議論している.

本論では, ベルヌーイ法が多項式から得られるコンパニオン行列に対するべき乗法と等価であることに着目する. そして, 一般の行列に対するべき乗法から得られる数列を初期値とする qd アルゴリズムと行列の固有値, 固有多項式の係数, 同じ固有値をもつ別の 3 重対角行列との関係を明らかにする.

2 qd アルゴリズム

本節では, 文献 [1] で議論されている解析法に基づき qd アルゴリズムを紹介する.

有理型関数 $F(z)$ を $z=0$ でのテイラー級数

$$F(z) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n z^n, \quad D: |z| \leq \sigma \quad (2.1)$$

で定義する. 円盤 D 内の F の極を $z_k = \lambda_k^{-1}$ ($k = 1, 2, \dots$) とする. F に関連する qd アルゴリズムは初期値を

$$e_0^{(n)} = 0, \quad n = 1, 2, \dots, \quad q_1^{(n)} = \frac{f_{n+1}}{f_n}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.2)$$

とする漸化式

$$e_k^{(n)} = q_k^{(n+1)} - q_k^{(n)} + e_{k-1}^{(n+1)}, \quad q_{k+1}^{(n)} = \frac{e_k^{(n+1)}}{e_k^{(n)}} q_k^{(n+1)}, \quad k = 1, 2, \dots, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.3)$$

で定義される. 数列 $q_k^{(n)}, e_k^{(n)}$ を図 1 のように並べた表を qd 表という.

qd アルゴリズムの解を議論する. F に関連するハンケル行列式 $H_k^{(n)}$ を任意の整数 n に対して,

$$H_{-1}^{(n)} = 0, \quad H_0^{(n)} = 1, \quad H_k^{(n)} = \begin{vmatrix} f_n & f_{n+1} & \cdots & f_{n+k-1} \\ f_{n+1} & f_{n+2} & \cdots & f_{n+k} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ f_{n+k-1} & f_{n+k} & \cdots & f_{n+2k-2} \end{vmatrix}, \quad k = 1, 2, 3, \dots \quad (2.4)$$

$$\begin{array}{ccccccc}
& & q_1^{(0)} & & & & \\
0 & & & e_1^{(0)} & & & \\
& q_1^{(1)} & & & q_2^{(0)} & & \\
0 & & e_1^{(1)} & & & e_2^{(0)} & \\
& q_1^{(2)} & & & q_2^{(1)} & & \\
0 & & e_1^{(2)} & & & e_2^{(1)} & \cdots \\
& \vdots & & & \vdots & &
\end{array}$$

図 1: qd 表 .

と定義する . ここで , F に関連する $H_k^{(n)}$ が全ての $n \geq 0$ に対して $H_k^{(n)} \neq 0$ ($k = 1, 2, \dots, N$) となる正の整数 N が存在するとする . このとき , F は N 正規であるという . qd アルゴリズムの解は次の定理で与えられる .

定理 2.1 ([1, p. 610]) F は N 正規とする . F に関する qd アルゴリズム (2.2), (2.3) で生成される数列 $q_k^{(n)}, e_k^{(n)}$ は $k = 1, 2, \dots, N, n = 0, 1, 2, \dots$ において存在し ,

$$q_k^{(n)} = \frac{H_k^{(n+1)} H_{k-1}^{(n)}}{H_k^{(n)} H_{k-1}^{(n+1)}}, \quad e_k^{(n)} = \frac{H_{k+1}^{(n)} H_{k-1}^{(n+1)}}{H_k^{(n)} H_k^{(n+1)}}, \quad k = 1, 2, \dots, N, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.5)$$

をみます .

また , $q_k^{(n)}, e_k^{(n)}$ の極限については次の定理が与えられている .

定理 2.2 ([1, p. 612]) F は N 正規とする . $k = 1, 2, \dots, N$ のうち , $|z_{k-1}| < |z_k| < |z_{k+1}|$ をみますそれぞれの k に対して $\lim_{n \rightarrow \infty} q_k^{(n)} = \lambda_k$ が成り立つ . また , $|z_k| < |z_{k+1}|$ をみますそれぞれの k に対して $\lim_{n \rightarrow \infty} e_k^{(n)} = 0$ が成り立つ .

多項式

$$\varphi(z) = p_0 z^N + p_1 z^{N-1} + \cdots + p_{N-1} z + p_N \quad (2.6)$$

の根を求める問題を考える . 多項式に関する qd アルゴリズムは次の定理が与えられている .

定理 2.3 ([1, p. 617]) 有理関数 F を

$$F = \frac{1}{z^N \varphi(z^{-1})} \quad (2.7)$$

とおく . 係数 $\{p_k\}$ が $p_k \neq 0$ ($k = 0, 1, \dots, N$) をみますとする . qd アルゴリズムの初期値を

$$e_0^{(n)} = 0, \quad q_1^{(0)} = -\frac{p_1}{p_0}, \quad e_k^{(1-k)} = \frac{p_{k+1}}{p_k}, \quad q_{k+1}^{(-k)} = e_N^{(n)} = 0, \quad k = 1, 2, \dots, N-1 \quad (2.8)$$

とし , 漸化式を

$$e_k^{(n+1)} = e_k^{(n)} \frac{q_{k+1}^{(n)}}{q_k^{(n+1)}}, \quad q_{k+1}^{(n+1)} = q_{k+1}^{(n)} - e_k^{(n+1)} + e_{k+1}^{(n)},$$

$$k = 1, 2, \dots, N-1, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.9)$$

とする qd アルゴリズムを考える . このとき , $q_k^{(n)}, e_k^{(n)}$ は (2.5) を解としてもつ . ただし , $n < 0$ のとき $f_n = 0$ とおく .

漸化式 (2.9) を前進型 qd アルゴリズムと呼ぶ。また漸化式 (2.9) は漸化式 (2.3) のステップの発展の向きを変えたものである。\$q_k^{(n)}, e_k^{(n)}\$ の上付添字は \$k = 2, 3, \dots, N\$ に対して \$n \leq 1 - k < 0\$ となり負であることに注意する。\$\varphi(z)\$ の根が \$|\lambda_1| > |\lambda_2| > \dots > |\lambda_N| > 0\$ をみたすとする。(2.7) より \$F(z)\$ の極の逆数は \$\varphi(z)\$ の根 \$\lambda_k\$ であるから, 定理 2.2 より \$\lim_{n \to \infty} q_k^{(n)} = \lambda_k\$ が得られる。\$F\$ に関連する 3 重対角行列として

$$B_k^{(n)} = \begin{pmatrix} q_1^{(n)} & q_1^{(n)} e_1^{(n)} & & & & \\ 1 & q_2^{(n)} + e_1^{(n)} & q_2^{(n)} e_2^{(n)} & & & \\ & 1 & \ddots & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & q_{k-1}^{(n)} e_{k-1}^{(n)} & \\ & & & & 1 & q_k^{(n)} + e_{k-1}^{(n)} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{k \times k} \quad (2.10)$$

を定義する。行列の成分は qd アルゴリズムの変数により与えられることに注意する。3 重対角行列 \$B_k^{(n)}\$ について次の定理が与えられている。

定理 2.4 ([1, p. 635]) 3 重対角行列 \$B_k^{(n)}\$ (\$k = 1, 2, \dots, N, n = 0, 1, 2, \dots\$) の固有多項式 \$\det(\lambda I - B_k^{(n)})\$ はアダマール多項式

$$P_0^{(n)}(\lambda) = 1, \\ P_k^{(n)}(\lambda) = \frac{1}{H_k^{(n)}} \begin{vmatrix} f_n & f_{n+1} & \cdots & f_{n+k} \\ f_{n+1} & f_{n+2} & \cdots & f_{n+k+1} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ f_{n+k-1} & f_{n+k} & \cdots & f_{n+2k-1} \\ 1 & \lambda & \cdots & \lambda^k \end{vmatrix}, \\ n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \quad k = 1, 2, \dots \quad (2.11)$$

を用いて, \$\det(\lambda I - B_k^{(n)}) = P_k^{(n)}(\lambda)\$ と与えられる。

さらに, \$k = N\$ のときは次の定理が成り立つ。

定理 2.5 ([1, p. 626]) \$F\$ が \$N\$ 正規であるとき,

$$\det(\lambda I - B_N^{(n)}) = P_N^{(n)}(\lambda) = (\lambda - \lambda_1)(\lambda - \lambda_2) \cdots (\lambda - \lambda_N), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.12)$$

が成立する。

定理 2.5 は 3 重対角行列 \$B_N^{(n)}\$ の固有値は有理型関数 \$F\$ の極の逆数に等しいことを表している。

3 べき乗法と qd アルゴリズム

ベルヌーイ法を紹介する。多項式 \$\varphi(z) = \sum_{k=0}^N p_k z^{N-k}\$ の係数を用いた漸化式

$$p_0 f_n + p_1 f_{n-1} + \cdots + p_{N-1} f_{n-N+1} + p_N f_{n-N} = 0, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (3.1)$$

を考える。初期値は任意で良いが, 簡単のため \$f_0 = 1, f_{-1} = f_{-2} = f_{-N+1} = 0\$ とする。漸化式 (3.1) により数列 \$\{f_n\}\$ を作成する。このとき, 極限

$$\lim_{n \to \infty} \frac{f_{n+1}}{f_n} = \lambda_1 \quad (3.2)$$

により, $\varphi(z)$ の根のうち絶対値が最大な根 λ_1 が求まる. ここで, 漸化式 (3.1) は $\mathbf{y}^{(n)} = (f_n, f_{n-1}, \dots, f_{n-N+1})^T$ とおくとべき乗法 $\mathbf{y}^{(n+1)} = C\mathbf{y}^{(n)}$ と書き換えられる. ここで, C は多項式 $\varphi(z)$ のコンパニオン行列

$$C = \begin{pmatrix} -p_1/p_0 & -p_2/p_0 & \cdots & -p_N/p_0 \\ 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & \ddots & \\ & & & 1 \end{pmatrix} \quad (3.3)$$

である. また, 極限 (3.2) は $\mathbf{e}_1 = (1, 0, \dots, 0)^T$ を用いて

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{(\mathbf{e}_1, C\mathbf{y}^{(n)})}{(\mathbf{e}_1, \mathbf{y}^{(n)})} = \lambda_1 \quad (3.4)$$

とも書ける. ベルヌーイ法は多項式 $\varphi(z)$ のコンパニオン行列に対するべき乗法と等価である.

ここで, 多項式のコンパニオン行列に対するべき乗法ではなく, 一般の行列に対するべき乗法と qd アルゴリズムとの関係を明らかにする.

一般の行列を $A \in \mathbb{R}^{N \times N}$ とし, 固有値は λ_k ($k = 1, 2, \dots, N$) とする. A に対するべき乗法 $\mathbf{x}^{(n+1)} = A\mathbf{x}^{(n)}$ でベクトル列 $\{\mathbf{x}^{(n)}\}$ を生成する. 適当なベクトル \mathbf{z} を用いて $f_n = (\mathbf{z}, \mathbf{x}^{(n)})$ とおく. つまり,

$$\mathbf{x}^{(n+1)} = A\mathbf{x}^{(n)}, \quad f_n = (\mathbf{z}, \mathbf{x}^{(n)}), \quad \mathbf{x}^{(0)} \in \mathbb{R}^N, \quad \mathbf{z} \in \mathbb{R}^N, \quad n \in \mathbb{Z} \quad (3.5)$$

で得られる数列 $\{f_n\}$ を考える. このとき, 次の定理が成り立つ.

定理 3.1 行列 A が重複固有値および零固有値をもたないとき,

$$f_n = c_1 \lambda_1^n + c_2 \lambda_2^n + \cdots + c_N \lambda_N^n, \quad n \in \mathbb{Z} \quad (3.6)$$

が成り立つ. ただし, c_1, c_2, \dots, c_N はある定数とする.

(証明) 初期値 $\mathbf{x}^{(0)}$ を A の固有ベクトル $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_N$ の 1 次結合で表すと $\mathbf{x}^{(0)} = \tilde{c}_1 \mathbf{v}_1 + \tilde{c}_2 \mathbf{v}_2 + \cdots + \tilde{c}_N \mathbf{v}_N$ と書ける. $\mathbf{x}^{(n)}$ は $\mathbf{x}^{(n)} = A^n \mathbf{x}^{(0)} = \tilde{c}_1 \lambda_1^n \mathbf{v}_1 + \tilde{c}_2 \lambda_2^n \mathbf{v}_2 + \cdots + \tilde{c}_N \lambda_N^n \mathbf{v}_N$ となる. したがって, $(\mathbf{z}, \mathbf{v}_i) \tilde{c}_i = c_i$ とおくと $f_n = (\mathbf{z}, \mathbf{x}^{(n)}) = c_1 \lambda_1^n + c_2 \lambda_2^n + \cdots + c_N \lambda_N^n$ を得る.

定理 3.1 の結果を定理 2.1 の解に代入し極限をとると, 次の定理が成り立つ.

定理 3.2 行列 $A \in \mathbb{R}^{N \times N}$ の固有値は $|\lambda_1| > |\lambda_2| > \cdots > |\lambda_N| > 0$ をみたすとする. べき乗法 (3.5) で生成される数列 $\{f_n\}$ を用いて qd アルゴリズムの初期値 (2.2) を定める. このとき, qd アルゴリズム (2.3) で生成される $q_k^{(n)}, e_k^{(n)}$ は $\lim_{n \rightarrow \infty} q_k^{(n)} = \lambda_k, \lim_{n \rightarrow \infty} e_k^{(n)} = 0$ をみたす.

ここで, qd アルゴリズムの初期値は

$$q_1^{(n)} = \frac{f_{n+1}}{f_n} = \frac{(\mathbf{z}, A\mathbf{x}^{(n)})}{(\mathbf{z}, \mathbf{x}^{(n)})}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (3.7)$$

である. $q_1^{(n)}$ の極限は $\lim_{n \rightarrow \infty} q_1^{(n)} = \lambda_1$ であり, (3.7) はべき乗法そのものである. また, 行列 A がコンパニオン行列 C , \mathbf{z} が \mathbf{e}_1 であれば (3.7) は (3.4) と一致する. (3.7) はべき乗法であり A の固有値のうち 1 つのみを計算できる. 一方, べき乗法 (3.5) から qd アルゴリズム (2.3) を介するとすべての固有値が計算できる. qd アルゴリズムはベルヌーイ法のある種の拡張とみなされる.

べき乗法 (3.5) と A の固有多項式 $\varphi_A(z) = \sum_{k=0}^N p_k z^{N-k}$ との関係は次の定理で与えられる.

$$A = \begin{pmatrix} -1.728 & 0.4234 & -0.1630 & -0.3690 & 0.4087 & -0.3792 \\ -0.5970 & -0.8750 & -0.8636 & -0.8527 & -0.3511 & 0.09235 \\ -0.1911 & -0.4767 & -0.7285 & -1.378 & -0.2294 & -0.8232 \\ -0.2208 & 0.9838 & -0.3867 & -0.2580 & -1.108 & -0.8806 \\ -0.1610 & 0.1126 & 0.8932 & 0.006744 & -0.5976 & 0.3314 \\ 0.3385 & 0.9899 & 1.086 & -0.2384 & 0.2332 & -1.813 \end{pmatrix}$$

図 2: テスト行列 A : 実非対称, 複素固有値 .

定理 3.3 行列 A が定理 3.1 の条件をみたし, $\{f_n\}$ が $f_0 \neq 0, f_{-1} = f_{-2} = \dots = f_{-N+1} = 0$ をみたすとき,

$$q_1^{(0)} = -\frac{p_1}{p_0}, \quad q_k^{(1-k)} = 0, \quad k = 2, 3, \dots, N, \quad e_k^{(1-k)} = \frac{p_{k+1}}{p_k}, \quad k = 1, 2, \dots, N-1 \quad (3.8)$$

が成立する .

定理 3.3 の f_n に関する条件をみたすベクトル z に関しては次の定理が成り立つ .

定理 3.4 z と $x^{(-N+1)}$ が $(z, A^k x^{(-N+1)}) = 0$ ($k = 0, 1, \dots, N-2$) をみたすとき, $f_{-1} = f_{-2} = \dots = f_{-N+1} = 0$ が成立する .

定理 3.4 は $z \perp x^{(-N+1)}, z \perp Ax^{(-N+1)}, \dots, z \perp A^{N-2}x^{(-N+1)}$ と同じ意味である . $x^{(-N+1)}$ を初期値とするベクトル列 $\{x^{(-N+1)}, Ax^{(-N+1)}, \dots, A^{N-2}x^{(-N+1)}\}$ を生成し, これらに直交する z を選べばよい . そして, qd アルゴリズムで用いる初期値を $x^{(0)} = A^{N-1}x^{(-N+1)}$ とし, 改めてべき乗法によりベクトル列 $\{x^{(n)}\}$ を作成する .

べき乗法 (3.5) と (2.10) の 3 重対角行列の固有値の関係は次の通りである .

定理 3.5 行列 A が定理 3.1 の条件をみたすとき, (3.5), (2.2), (2.3) から生成される $q_k^{(n)}, e_k^{(n)}$ を用いた (2.10) の 3 重対角行列 $B_N^{(n)}$ の固有値は行列 A の固有値と等しい .

(証明) 定理 2.4 より $B_N^{(n)}$ の固有多項式は $P_N^{(n)}(\lambda)$ である . $P_N^{(n)}(\lambda_k) = 0$ ($k = 1, 2, \dots, N$) を示す . 定理 3.1 の (3.6) を (2.11) へ代入すると,

$$H_N^{(n)} P_N^{(n)}(\lambda_k) = \begin{vmatrix} \sum_{j_0=1}^N c_{j_0} \lambda_{j_0}^n & \dots & \sum_{j_N=1}^N c_{j_N} \lambda_{j_N}^{n+N} \\ \sum_{j_1=1}^N c_{j_1} \lambda_{j_1}^{n+2} & \dots & \sum_{j_N=1}^N c_{j_N} \lambda_{j_N}^{n+N+1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum_{j_0=1}^N c_{j_0} \lambda_{j_0}^{n+N-1} & \dots & \sum_{j_N=1}^N c_{j_N} \lambda_{j_N}^{n+2N-1} \\ \lambda_k^0 & \dots & \lambda_k^N \end{vmatrix} = \sum_{(j_0, j_1, \dots, j_N) \in J} \begin{vmatrix} c_{j_0} \lambda_{j_0}^n & \dots & c_{j_N} \lambda_{j_N}^{n+N} \\ c_{j_0} \lambda_{j_0}^{n+1} & \dots & c_{j_N} \lambda_{j_N}^{n+N+1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ c_{j_0} \lambda_{j_0}^{n+N-1} & \dots & c_{j_N} \lambda_{j_N}^{n+2N-1} \\ \lambda_k^0 \delta_{j_0, k} & \dots & \lambda_k^N \delta_{j_N, k} \end{vmatrix} \quad (3.9)$$

となる . ただし, $J = \{(j_0, j_1, \dots, j_N) \mid j_i \in \{1, 2, \dots, N\}, i = 0, 1, 2, \dots, N\}$ である . 添字の組 (j_0, j_1, \dots, j_N) の要素のうち少なくとも 2 個は同じ値となる . それを a 列, b 列とする . このとき第 b 列は第 a 列の λ_k^{b-a} 倍と等しい . よって, 定理が示された .

4 数値例

数値例により定理を確認する . 計算には Matlab を用いる . テスト行列を図 2 の 6×6 型実非対称行列とする . この行列の固有値は $-1.888 + 1.538i, -1.888 - 1.538i, -1.369 + 0.6391i, -1.369 - 0.6391i, 0.7756, -0.2620$ である . パラメータ z を $z = (0.6424, 0.4465, -0.4739, 0.02228, 0.3892, 0.1072)^T$, 初期値を $x^{(0)} = (16.16, 16.93, 29.18, 13.68, -12.01, 11.73)^T$ とする . ここで,

