対称行列の固有値問題に対するSylvester二分法の精度保証

2009SE055 平野 由莉

指導教員：杉浦洋

1 はじめに

本研究では，対称三重対角行列式の固有値を Slvester 二分法により求め，後退誤差解析により精度保証を行う．プログラムを作成し，数値実験により，その効果を実証し，Slvester 二分法による精度保証の特性を分析する．

2 Sylbester の慣性則

定理 2.1(Sylveter[1])

対称行列 A を合同変換 $A \to PAP^T = D$ により，対角行列 D に変換し，D の正の対角成分の数を p，負の対角成分の数を m とする．このとき，p, m は合同変換によらず一定である．//

この p, m を A の符号数という．

この定理からただちに次の定理が導かれる．

系 2.1 対称行列の正の固有値の数，負の固有値の数は，それぞれ A の符号数 p, m と等しい．//

3 修正 Cholesky 分解

正則な対角行列 A の修正コレスキー分解は，

$$
\begin{aligned}
A &= LDL^T, \\
L &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ l_{21} & 1 & & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ l_{n1} & \dots & l_{n,n-1} & 1 \end{pmatrix}, \\
D &= \begin{pmatrix} d_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & d_2 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & d_n \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

である [2]．L が正則なら $A \to L^{-1}AL^{-T} = D$ は合同変換ゆえ，修正 Cholesky 分解で A の符号数がわかる．この L，D を求めるアルゴリズムを示す．

$j = 1, 2, 3, \dots, n$ の順に，

$k = 1, 2, \dots, j-1$ の順で，

$$
\begin{aligned}
c_k &= d_k l_{jk}; \\
d_j &= a_{ii} - \sum_{k=1}^{j-1} c_k l_{jk};
\end{aligned}
$$

$i = j+1, j+2, \dots, n$ の順で，

$$
l_{ij} = \frac{a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} c_k l_{jk}}{d_j}; \tag{1}
$$

この計算量は， $\frac{1}{6}n^3 + O(n^2)$flops である．//

修正 Cholesky 分解は，$d_j = 0$ となると式 (1) での割り算が生じて破綻する．また，$|\, d_j \,|$ が小さいと式 (1) で $|\, l_{ij} \,|$ が大きくなり，後で述べる定理により固有値の包囲区間幅が大きくなる．これを改善する方法が対角ピボッティングである．//

3.1 対角ピボッティング

0 ピボットを回避するための対角ピボッティングについて説明する．

対称行列 A の修正 Cholesky 分解を

$$
A = LDL^T = L(DL^T) = LU \quad ,U = DL^T
$$

と解釈すれば，A の LU 分解と考えられる．

対角ピボッティングは，$Q = P$ とし，PAQ^T を A の合同変換とする．これにより，PAP^T は対称となり，

$$
PAP^T = LDL^T
$$

と修正 Cholesky 分解される．

対角ピボッティングにより，すべての対角成分が 0 にならないかぎり，0 ピボットが発生せず，アルゴリズムが頑健になる．また，P は置換行列であるため，合同変換は丸め誤差を発生しない．//

4 Sylvester 二分法のアルゴリズム

与えられた λ に対して，$A - \lambda I$ の正の符号数を $p(\lambda)$ とする．A の固有値を

$$
\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n
$$

とすると，$A - \lambda I$ の固有値は $\lambda_i - \lambda (1 \leq i \leq n)$ であるから，

$$
p(\lambda) : \lambda_i - \lambda > 0 \text{ となる} \lambda_i \text{の数.}
$$

である．目標の固有値を λ_i とすると

$$
\begin{cases} p(\lambda) < i \Longrightarrow \lambda \geq \lambda_i \\ p(\lambda) \geq i \Longrightarrow \lambda < \lambda_i \end{cases}
$$

である．これを用いて，Sylvester 二分法のアルゴリズムにより，任意の精度で λ_i が包囲できる．すなわち，A の固有値を大きい順に $\lambda_1 > \lambda_2 > \dots > \lambda_n$ とし，第 i 番の固有値 λ_i を求める Sylvester 二分法のアルゴリズムは以下のようになる [3].

(0) λ_i を含む初期区間を $[a_0, b_0)$ とする．

許容誤差 $\epsilon > 0$ を与える． $k = 0$ とする．

(1) $c = \dfrac{a_k + b_k}{2}$ とし，

$$
\begin{cases} p(c) < i \Longrightarrow [a_{k+1}, b_{k+1}) = [c, b_k), \\ p(c) \geq i \Longrightarrow [a_{k+1}, b_{k+1}) = [a_k, c). \end{cases}
$$

(2) $b_{k+1} - a_{k+1} \geq \epsilon$ ならば，$k \to k+1$ として (1) へ．

(3) 区間 $[a_{k+1}, b_{k+1}) \ni \lambda_i$ を出力．

5 Sylvester 二分法の精度保証

5.1 修正 Cholesky 法の後退誤差解析

$A - \lambda I$ に対する修正 Cholesky のアルゴリズムは次と同値

$j = 1, 2, 3, \ldots, n$ の順に，

$$d_j = a_{jj} - \lambda - \sum_{k=1}^{j-1} d_k l_{jk}^2;$$

$i = j+1, j+2, \ldots, n$ の順で，

$$l_{ij} = \frac{a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} d_k l_{ik} l_{jk}}{d_j}; //$$

これを機械計算した結果を $\tilde{l}_{ij}, \tilde{d}_j$ と書き，

$$\tilde{L} = (\tilde{l}_{ij}), \tilde{D} = \mathrm{diag}(\tilde{d}_j),$$
$$\tilde{A} = \tilde{L}\tilde{D}\tilde{L}^T, \Delta A = \tilde{A} - A$$

とすると，

$$\| \Delta A \|_\infty \leq \| | \tilde{L} | | \tilde{D} | | \tilde{L}^T | \|_\infty \gamma_{n+1}. \tag{2}$$

ここで，行列 $B = (b_{ij})$ のとき $| B | = (| b_{ij} |)$ を表す．また，$\gamma_k = ku/(1-ku)$ であり，$u = 2^{-53}$ は丸め誤差である．式 (2) は，次のように変形でき，右辺の計算量は $O(n^2)$ である．

$$\| \Delta A \|_\infty \leq \| | \tilde{L} | | \tilde{D} | | \tilde{L}^T | \boldsymbol{e} \|_\infty \gamma_{n+1}. \tag{3}$$

ここで，$\boldsymbol{e} = (1, 1, \cdots, 1)^T$ である．//

5.2 Slvester 二分法の精度保証

以上の結果より次の定理を得る．ここで，A の大きい方から i 番目の固有値を $\lambda_i(A)$ と書く．

定理 5.1 機械計算による $A - \lambda I$ の桁数を $\tilde{p}(\lambda)$ とする．このとき，次の不等式が成立する．

$$\lambda_i(A) \geq \lambda - \delta(\lambda),$$
$$\lambda_{i-1}(A) < \lambda + \delta(\lambda).$$

ここで，

$$\delta(\lambda) = \gamma_{n+1} \| | \tilde{L} | | \tilde{D} | | \tilde{L}^T | \boldsymbol{e} \|_\infty . //$$

定理 5.2 Sylvester 二分法の機械計算で得られた $\lambda_i(A)$ の「包囲区間」を (a, b) とする．このとき，

$$\lambda_i(A) \in [a - \delta(a), b + \delta(b)). // \tag{4}$$

表 1 Sylvester 二分法による結果

k	λ_k	$\lvert$mid[λ_k]-$\lambda_k\rvert$	rad[λ_k]
1	$4.47\cdots \times 10^{1}$	1.56×10^{-13}	3.41×10^{-13}
2	$5.04\cdots$	1.78×10^{-15}	1.84×10^{-13}
3	$1.87\cdots$	5.33×10^{-15}	9.77×10^{-14}
4	$1.00\cdots$	4.66×10^{-15}	8.64×10^{-14}
5	$6.43\cdots \times 10^{-1}$	2.11×10^{-15}	6.92×10^{-14}
6	$4.65\cdots \times 10^{-1}$	2.16×10^{-15}	6.98×10^{-14}
7	$3.66\cdots \times 10^{-1}$	1.67×10^{-16}	6.81×10^{-14}
8	$3.07\cdots \times 10^{-1}$	1.72×10^{-15}	6.83×10^{-14}
9	$2.73\cdots \times 10^{-1}$	7.22×10^{-16}	6.82×10^{-14}
10	$2.55\cdots \times 10^{-1}$	2.22×10^{-16}	6.82×10^{-14}

6 数値実験

数値実験によく用いられる Frank 行列

$$A = (a_{ij}) \in \mathbb{R}^{n \times n}, \quad a_{ij} = \min\{i, j\}$$

を取り上げる．また，次数は $n = 10$ とする．そして，結果を表 1 に示す．表 1 で"k"は固有値番号，"λ_k"は固有値，λI は Sylvester 二分法で計算された λ_k の包囲区間であり，"mid[λI]"はその中心，"rad[λI]"はその半径である．すべての固有値の包囲に成功した．

対角ピボッティングを用いない修正 Cholesky 法でも，すべての固有値の包囲に成功した．しかし，首座小行列の固有値と一致する $\lambda_2, \lambda_4, \lambda_5, \lambda_8$ では，包囲区間が極端に広くなり，精度保証の品質が劣化した．これは，$| \tilde{L} |$ のノルムが大きくなることが原因である．//

7 おわりに

本研究では，対称行列の固有値を求める Slvester 二分法により，固有値を精度保証付きで計算するアルゴリズムを作成し，Mathematica 上に実装した．

1. 修正 Cholesky 分解の後退誤差解析を研究した．
2. Sylvester 二分法の出力を 1 により補正し，固有値の厳格な包囲範囲を計算した．
3. 修正 Cholesky 法が 0 ピボットのため破綻する条件を明らかにした．
4. 0 ピボットを回避するため，対角ピボッティング付き修正 Cholesky 法を作成した．
5. 数値実験により，2，4 の効果を確認した．

今後の課題としては，さらに頑健な修正 Cholesky 分解を構成することである．

参考文献

[1] 東海大学数学教室 :『線形代数学』．東海大学出版会．

[2] 杉浦洋 :『数値計算の基礎と応用—数値解析学への入門—』．サイエンス社，1997.

[3] W.Kahan : ACCURATE EIGENVALUES OF A SYMMETRIC TRI-DIAGONAL MATRIX，CS41, Computer Science Dpt，Stanford University，1966.