Kahanの方法による三重対角行列の固有値の精度保証

2009SE179 渡部優斗
指導教員：杉浦洋

1　はじめに

本研究では，Kahan の二分法による対称三重対角行列式の近似固有値の精度保証を行う．後退誤差解析により，Kahan のアルゴリズム [1] の丸め誤差特性を詳しく分析し，精度保証アルゴリズムの構成する．Mathematica 上でプログラムを作成し，数値実験によりその有効性を検証する．

2　2 次形式と Sylvester の慣性則

2.1　2 次形式

$A = (a_{ij})$ を n 次実対称行列，$\boldsymbol{x} = (x_1 x_2 \cdots x_n)^T$ を n 次元列ベクトルとするとき

$$f = \boldsymbol{x}^T A \boldsymbol{x} = \sum_{i,j=1}^{n} a_{ij} x_i x_j$$

を変数 $x_1, x_2, \cdots, x_n$ に関する 2 次形式という．

2.2　変数変換

正則行列 P を用いて変数変換 $\boldsymbol{x} = P\boldsymbol{y}$ を行うと 2 次形式 f は $f = \boldsymbol{y}^T P^T A P \boldsymbol{y}$ と書き換えられる．これにともなって定義行列 A に起こる変換

$$A \to P^T A P$$

を合同変換という．
定理 (Sylvester の慣性則) A を合同変換により対角行列

$$D = \mathrm{diag}(d_1, \cdots, d_n) = \begin{pmatrix} d_1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & d_n \end{pmatrix}$$

に変換し $d_1, \cdots, d_n$ の中で正数の数を p 個, 負数の数を m 個とする．このとき，p, m は合同変換によらず一定である．// 上の (p, m) を A の符号数と呼ぶ.
系　対称行列 A の符号定数を (p,m) とすると，p は A の正の固有値の数，m は A の負の固有値の数である．
(証明)A の固有値を $\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n$、対応する固有ベクトルを $\boldsymbol{u_1}, \boldsymbol{u_2}, \cdots, \boldsymbol{u_n}$ とする．
λ_i を対角成分とする対角行列 $\Lambda, \boldsymbol{u_i}$ を列ベクトルとする行列を $U = (\boldsymbol{u_1}, \boldsymbol{u_2}, \cdots, \boldsymbol{u_n})$ とすると，

$$A = U \Lambda U^T$$

とかける．これは対角行列 Λ から A への合同変換である．ゆえに Sylvester の慣性則より，正の固有値の数は p, 負の固有値の数は m である．//

3　Kahan のアルゴリズム

与えられた λ に対して，$A - \lambda I$ の符号数を $(p(\lambda), m(\lambda))$ とする．A の固有値を $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \cdots \leq \lambda_n$ 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，

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

である．目標の固有値を λ_i とすると

$$\begin{cases} m(\lambda) < i \Longrightarrow \lambda \leq \lambda_i \\ m(\lambda) \geq i \Longrightarrow \lambda > \lambda_i \end{cases}$$

である．これを用いて，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 の固有値を小さい順に $\lambda_1 < \lambda_2 < \cdots < \lambda_n$ とし，第 i 番の固有値 λ_i を求める Kahan のアルゴリズムは以下のようになる．

1. 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，$k = 0$ とする．
2. $c = (a_k + b_k)/2$ とし，
   $$\begin{cases} m(c) < i \Longrightarrow [a_{k+1}, b_{k+1}) = [c, b_k), \\ m(c) \geq i \Longrightarrow [a_{k+1}, b_{k+1}) = [a_k, c). \end{cases}$$
   である．
3. $b_{k+1} - a_{k+1} \geq \epsilon$ ならば，$k \to k+1$ として 2. へもどる．
4. 区間 $[a_{k+1}, b_{k+1}) \ni \lambda_i$ を出力．終了．

4　修正 Cholesky 分解による符号数計算

修正 Cholesky 分解は n 次対称行列 A を

$$A = LDL^T \tag{1}$$

と単位下三角行列 L と対角行列 D および L^T の積に分解することである．[2] D の符号数を数えることにより A の符号数がわかる．A が対称三重対角行列

$$A = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & & \\ \beta_1 & \alpha_2 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & \beta_{n-1} \\ & & \beta_{n-1} & \alpha_n \end{pmatrix}$$

のとき，符号数の計算には L は不要ゆえに $D = \mathrm{diag}(d_i)$ のみを計算すると

$$\begin{aligned} d_1 &= \alpha_1, \\ d_i &= \alpha_i - \frac{\beta_{i-1}^2}{d_{i-1}} \quad (2 \leq i \leq n) \end{aligned} \tag{2}$$

となる．これが Kahan のアルゴリズムである．//

5　後退誤差解析

$A-\lambda I$ に対してアルゴリズム (2) の d_i を機械計算で求めた結果を $\tilde{d}_i$ とする．後退誤差解析により，$\tilde{d}_i$ は行列

$$\tilde{A}-\lambda I=\begin{pmatrix} \tilde{\alpha}_1 & \tilde{\beta}_1 & & \\ \tilde{\beta}_1 & \tilde{\alpha}_2 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & \tilde{\beta}_{n-1} \\ & & \tilde{\beta}_{n-1} & \tilde{\alpha}_n \end{pmatrix}-\lambda I$$

に対してアルゴリズム (2) を正確に計算した結果と等しく

$$\|\tilde{A}-A\|_\infty \leq \delta(\lambda)$$

が成立する．ここで，

$$\begin{aligned}\delta(\lambda)=\max\Big\{&|\alpha_1|u+|\lambda|u+|\beta_1|\mu_3,\\ &\max_{2\leq i\leq n-1}\{|\alpha_i|\gamma_2+|\lambda|\gamma_2+(|\beta_{i-1}|+|\beta_i|)\mu_3\},\\ &|\beta_{n-1}|\mu_3+|\alpha_n|\gamma_2+|\lambda|\gamma_2\Big\}\end{aligned}$$

である．また

$$\begin{aligned} u=2^{-53}&=1.11\cdots\times 10^{-16},\\ |\theta_k|\leq\gamma_k&\equiv\frac{ku}{1-ku},\\ \mu_3&=\frac{\gamma_3}{1+\sqrt{1-\gamma_3}}\end{aligned}$$

である．これより A の固有値で小さい方から i 番目を $\lambda_i(A)$ と書くと，

$$|\lambda_i(\tilde{A})-\lambda_i(A)|\leq\|\Delta A\|_\infty\leq\delta(\lambda) \tag{3}$$

が成立する．

6　精度保証付 Kahan の二分法

後退誤差解析の結果 (3) を用いて，5 節のアルゴリズムの結果に精度保証を与えることが出来る．5 節のアルゴリズムで得られた小さい方から i 番目の固有値 λ_i の包囲区間を (a,b) とする．$\lambda=a$ のときの後退誤差解析の結果は，式 (3) より

$$a-\delta(a)\leq\lambda_i(A)$$

である．同じく，$\lambda=b$ のときの後退誤差解析の結果は，式 (3) より

$$\lambda_i(A)<b+\delta(b)$$

である．また，$\delta(\lambda)$ は $|\lambda|$ の単調増加関数であることは明らかだから，

$$|\lambda|=\max\{|a|,|b|\}$$

として，厳格な不等式

$$a-\delta(\lambda)\leq\lambda_i(A)<b+\delta(\lambda) \tag{4}$$

を得る．

7　Mathematica による数値実験

テスト行列として

$$A=\begin{pmatrix} 2 & -1 & & & & 0\\ -1 & 2 & -1 & & & \\ & -1 & 2 & -1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & -1 & 2 & -1\\ 0 & & & & -1 & 2\end{pmatrix}\in\mathbb{R}^{n\times n}$$

を用い，全固有値の包囲区間を計算した．

$n=128$ の場合，全ての固有値の包囲に成功した．また，固有値の包囲区間幅の最大値 Max Width$=4.88\cdots\times 10^{-15}$ で 2011 年の岡山亮士の卒業論文 [4] における結果 Max width$=3.28\times10^{-14}$ よりも精密に精度保証ができた．

次に $n=2048$ の場合，全ての固有値の包囲に成功した．また，固有値の包囲区間幅の最大値は $n=128$ のときと同じで，$4.88\cdots\times10^{-15}$ と大次元にも関わらず極めて精密に精度保証ができた．

8　考察

結果として，修正 Cholesky 分解で 0 割り算になってしまった場合のコントロールがやや複雑になってしまったが，高精度であった岡山亮士の精度保証よりもさらに精密にできた．また今回は問題を $n=128, n=2048$ と二通りに設定して実験を行ったが，n の数を大きいものに置き換えても高精度な精度保証ができたことには驚きであった．これは，符号数が 2048 項の数列 d_j を延々と漸化式計算した結果であることを考えると驚異的な精度である．

9　おわりに

本研究では，Kahan の二分法を用いて対称三重対角行列の固有値を精度保証付きで計算することを目指した．後退誤差解析により，Strum 二分法より丸め誤差の影響が小さいことがわかった．実際に Mathematica のプログラムを組み数値実験を行うと，修正 Cholesky 分解で 0 割り算が発生した場合のコントロールが難しくプログラムが複雑になってしまったが，すべての固有値を精度保証付きで求めることに成功した．また，Sturm 二分法 [3] より精密な精度保証が得られた．

参考文献

[1] W. Kahan: Accurate eigenvalues of a symmetric tri-diagonal matrix, Technical Report of Stanford University Stanford, CA, USA, 1966.

[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] 岡山亮士 :『卒業論文』．南山大学，　2011.