対称行列に対する Householder 三重対角化の精度保証

2010SE009 青山　亨

指導教員：杉浦洋

1 はじめに

対称行列 A の固有値問題における，Householder 三重対角化法 [1] は，Householder 変換により A を相似変換して，三重対角行列 T を作り，問題を T の固有値問題に帰着させる．これを数値的に実行すると，T の近似 $\tilde{T}$ が求まる．本論の目的は $\tilde{T}$ の固有値と A の固有値の差を評価することである．

2 区間演算

区間解析では，区間を数の拡張と考える．ここで，区間とは，閉区間

$$[\underline{x},\overline{x}] = \{x \in \mathbb{R} | \underline{x} \leq x \leq \overline{x}\}$$

である．区間を $[x] = [\underline{x}, \overline{x}]$ と表すこともある．
関数 $f : D \subset \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ を領域 D で連続な関数とする．関数 f を区間関数

$$f([x]) = \{f(x) | x \in [x]\}\,([x] \subset D)$$

により $\mathbb{IR}$ 上の関数に拡張できる．Mathematica には基本的な実数関数の区間関数が実装されている．

区間を要素とする行列

$$[A] = ([a_{ij}])$$

を区間行列と言う，Mathematica の区間演算で行列積 AB を含む区間

$$[C] = [A][B] \ni AB$$

が計算できる．

3 Householder 行列と Householder 三重対角化

Householder 行列 $H \in \mathbb{R}^{n\times n}$ は，ベクトル $\boldsymbol{q} \in \mathbb{R}^n$, $\|\boldsymbol{q}\|_2 = \sqrt{2}$ により，

$$H = I - \boldsymbol{q}\boldsymbol{q}^{\mathrm{T}} \tag{1}$$

で定義される対称直交行列である．

任意のベクトル $\boldsymbol{a} = (a_1, a_2, \cdots a_n)^{\mathrm{T}} \in \mathbb{R}^n$ に対し，Householder 行列 $H(\boldsymbol{a}) \in \mathbb{R}^{n\times n}$ が存在し，

$$H(\boldsymbol{a})\boldsymbol{a} = b\boldsymbol{e}_1, b = \pm\|\boldsymbol{a}\|_2 \tag{2}$$

とすることができる．符号 $\pm$ は任意に選べるが, 計算上で桁落ちの少ない方を選ぶ.

Householder 三重対角化 [1] は, Householder 行列を用いて n 次対称行列 A を相似変換し, 対称三重対角行列 T を作る.
すなわち, $i = 1, 2, \cdots, n-2$ の順に適切に

$$H_i = \begin{pmatrix} I_i & O \\ O & H(\boldsymbol{a}_i) \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{n\times n} \tag{3}$$

を定め

$$QAQ^{\mathrm{T}} = T,$$
$$Q = H_{n-2}, \cdots, H_2H \tag{4}$$

とする.

数値的に Householder 三重対角化を行うと, T の近似行列 $\tilde{T}$ が求まる．Householder 三重対角化の精度保証とは,

$$\left|\lambda_i(\tilde{T}) - \lambda_i(A)\right| \leq \delta_i\ (1 \leq i \leq n) \tag{5}$$

を満たす δ_i を計算することである.

ここで, $\lambda_i(A)$ は行列 A の小さい方から i 番目の固有値である.

4 基本的な定理

精度保証に用いる基本的な定理を紹介する.

[定理 1] 対称行列 $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ と行列 $Q \in \mathbb{R}^{n\times n}$ について,

$$QQ^T = I + E, \|E\|_2 \leq \epsilon < 1 \tag{6}$$

のとき，$B = QAQ^T$ とすると

$$|\lambda_i(A) - \lambda_i(B)| \leq \frac{\epsilon}{1-\epsilon}\lambda_i(B). \tag{7}$$

[定理 2] ベクトル $\boldsymbol{q} \in \mathbb{R}^n$ について，$H = I - \boldsymbol{q}\boldsymbol{q}^T$ とすると

$$\|HH^T - I\|_2 \leq (\|\boldsymbol{q}\|_2^2 - 2)\|\boldsymbol{q}\|_2^2. \tag{8}$$

[定理 3] 行列 $H \in \mathbb{R}^{n\times n}$　$(1 \in i \in k)$ に対して

$$Q = H_{n-2} \cdots H_2H_1, \tag{9}$$
$$\|H_iH_i^T - I\|_2 \leq \delta_i \quad (1 \leq i \leq k) \tag{10}$$

なら

$$\|QQ^T - I\| \leq \prod_{i=1}^{k}(1 + \delta_i) - 1 =: \epsilon_2 \tag{11}$$

5 精度保証のアルゴリズム

対称行列 A の Householder 三重対角化を数値的に実行して求めた行列を

$$\tilde{H}_i = \begin{pmatrix} I_i & O \\ O & H(\tilde{\boldsymbol{a}}_i) \end{pmatrix} (1 \le i \le n-2) \tag{12}$$

とし，

$$\tilde{Q} = \tilde{H}_{n-2} \cdots \tilde{H}_1 \tag{13}$$

とする．
このとき，

$$\left(\|\tilde{a}_i\|_2^2 - 2\right) \|\tilde{a}_i\|_2^2 \le \delta_i \quad (1 \le i \le n-2) \tag{14}$$

となる δ_i を Mathematica の区間計算で求め，

$$\|\tilde{H}_i \tilde{H}_i^{\mathrm{T}} - I\|_2 \le \delta_i \quad (1 \le i \le n-2) \tag{15}$$

を得る．これと定理 3 より

$$\|\tilde{Q}\tilde{Q}^{\mathrm{T}} - I\| \le \prod_{i=1}^{k} (1+\delta_i) - 1 =: \epsilon_2 \tag{16}$$

を得る．また Q による A の三重対角化

$$B = \tilde{Q} A \tilde{Q}^{\mathrm{T}} \tag{17}$$

を区間演算で求め，B の包囲

$$B \subset [B] = [\underline{B}, \overline{B}] \tag{18}$$

を計算する．B はほぼ三重対角行列であるから，三重対角行列 $\tilde{T} = (\tilde{T}_{ij})$

$$\tilde{T}_{ij} = \begin{cases} (\underline{B}_{ij} + \overline{B}_{ij})/2, & (|i-j| \le 1), \\ 0, & (|i-j| > 2) \end{cases} \tag{19}$$

で定め，

$$\epsilon_1 = \|\tilde{T} - B\|_\infty \tag{20}$$

と置くと，ϵ_2 は小さくなることが予測される．また定理 4 より

$$|\lambda_i(\tilde{T}) - \lambda_i(B)| \le \epsilon_1 \tag{21}$$

さらに，(16)，(17) と定理 1 より

$$|\lambda_i(B) - \lambda_i(A)| \le \frac{\epsilon_2}{1-\epsilon_2} |\lambda_i(B)| \tag{22}$$

として，(21) より

$$|\lambda_i(B)| \le |\lambda_i(\tilde{T})| + \epsilon_1 \tag{23}$$

ゆえに

$$|\lambda_i(\tilde{T}) - \lambda_i(A)| \le \epsilon_1 + \frac{\epsilon_2}{1-\epsilon_2} (|\lambda_i(\tilde{T})| + \epsilon_1) \tag{24}$$

となる．これにより，$\lambda_i(A)$ が $\lambda_i(\tilde{T})$ により精度保証される．

6 Householder による結果

数値実験によく用いられる Frank 行列 $A = (a_{ij}) \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $a_{ij} = \min\{i, j\}$ を取り上げる．次数 n は $5 \le n \le 30$ とする．
A から式 (19) で得られた三重対角行列 $\tilde{T}$ について $|\lambda_i(A) - \lambda_i(\tilde{T})|$ を評価する．評価式 (24) の右辺を計算し, i に関する最大値を $r_{\max}$ とする．$\lambda_i(\tilde{T})$ は Mathmatica の固有値関数 Eigenvalues で求めた値を用いた.

式 (24) の $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ と $r_{\max}$ の n による変化を表に示す. 表の一番右の欄の True は全固有値の精度保証が成功したことを示す．表をみると，ϵ_2 は n の増大による影響をあまり受けないが，ϵ_1 は急激に増大し，その影響で精度保証区間の半径 $r_{\max}$ が大きくなる．今回の方法は $n = 10$ 程度ならほぼ実用的な精密さを持つが，$n = 30$ あたりで保証区間 $r_{\max}$ が非現実的な大きさとなり，実質的に役に立たなくなっている．

n	ϵ_1	ϵ_2	$r_{\max}$	Success
5	1.27×10^{-12}	1.53×10^{-14}	1.46×10^{-12}	True
6	3.88×10^{-12}	1.89×10^{-14}	4.21×10^{-12}	True
7	1.13×10^{-11}	2.42×10^{-14}	1.19×10^{-11}	True
8	2.59×10^{-11}	2.82×10^{-14}	2.68×10^{-11}	True
9	6.42×10^{-11}	3.49×10^{-14}	6.55×10^{-11}	True
10	4.82×10^{-10}	3.97×10^{-14}	4.84×10^{-10}	True
11	6.83×10^{-9}	4.64×10^{-14}	6.83×10^{-9}	True
12	7.96×10^{-9}	5.22×10^{-14}	7.96×10^{-9}	True
13	3.62×10^{-8}	5.44×10^{-14}	3.62×10^{-8}	True
14	5.41×10^{-8}	5.93×10^{-14}	5.41×10^{-8}	True
15	1.45×10^{-7}	6.51×10^{-14}	1.45×10^{-7}	True
16	1.39×10^{-6}	7.26×10^{-14}	1.39×10^{-6}	True
17	1.32×10^{-5}	7.75×10^{-14}	1.32×10^{-5}	True
18	1.19×10^{-5}	8.42×10^{-14}	1.19×10^{-5}	True
19	7.25×10^{-5}	8.73×10^{-14}	7.25×10^{-5}	True
20	7.50×10^{-5}	9.39×10^{-14}	7.50×10^{-5}	True
21	2.31×10^{-4}	1.00×10^{-13}	2.31×10^{-4}	True
22	1.78×10^{-3}	1.11×10^{-13}	1.78×10^{-3}	True
23	3.07×10^{-3}	1.15×10^{-13}	3.07×10^{-3}	True
24	1.03×10^{-2}	1.21×10^{-13}	1.03×10^{-2}	True
25	2.33×10^{-2}	1.29×10^{-13}	2.33×10^{-2}	True
26	1.10×10^{-2}	1.29×10^{-13}	1.10×10^{-2}	True
27	2.10×10^{-1}	1.37×10^{-13}	2.10×10^{-1}	True
28	2.49	1.48×10^{-13}	2.49	True
29	1.68	1.46×10^{-13}	1.68	True
30	6.61	1.58×10^{-13}	6.61	True

参考文献

[1] Beresford N Parlett : The Symmetric Eigenvalue Problem，SIAM(1998).