対称行列に対する Householder 三重対角化の精度保証

2011SE217 小澤 大地

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

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

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 三重対角化

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

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

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 $H(\boldsymbol{q}) \in \mathbb{R}^{n\times n}$ が存在し,

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

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

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

を定め

$$\begin{aligned} QAQ^{\mathrm{T}} &= T, \\ Q &= H(\boldsymbol{q})_{n-2}, \cdots, H(\boldsymbol{q})_2 H(\boldsymbol{q}) \end{aligned} \tag{4}$$

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,

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

を満たす w 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,

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

のとき，$B = QAQ^T$ とすると

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

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

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

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

$$Q = H(\boldsymbol{q})_{n-2} \cdots H(\boldsymbol{q})_2 H(\boldsymbol{q})_1, \tag{9}$$

$$\|H(\boldsymbol{q})_i H(\boldsymbol{q})_i^T - I\|_2 \le \delta_i \quad (1 \le i \le k) \tag{10}$$

なら

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

5 Householder 三重対角化に対する今回の精度保証アルゴリズム

与えられた対称行列 $A \in \mathbb{F}^{n\times n}$ について，$A^{(1)} = A$ とする．(4.13) の Householder 変換 $H_1(\boldsymbol{q}_1)$ を数値的に求めたものを

$$H_1(\tilde{\boldsymbol{q}}_1) = \left(\begin{array}{c|c} 1 & \mathbf{0}^T \\ \hline \mathbf{0} & H(\tilde{\boldsymbol{q}}_1) \end{array}\right),\quad \tilde{\boldsymbol{q}}_1 \in \mathbb{F}^{(n-1)}$$

とする．さらに，

$$|\tilde{\boldsymbol{q}}_1^T\tilde{\boldsymbol{q}}_1 - 2| \parallel \tilde{\boldsymbol{q}}_1 \parallel_2 \le \varepsilon_1^{(1)}$$

となる．$\varepsilon_1^{(1)}$ を区間演算で求める．ここで，$H_1(\tilde{\boldsymbol{q}}_1)^T A^{(1)} H_1(\tilde{\boldsymbol{q}}_1)$ を区間演算したものを

$$\begin{aligned}[A^{(2)}] &= H_1([\tilde{\boldsymbol{q}}_1])^T[A^{(1)}]H_1([\tilde{\boldsymbol{q}}_1]) \\ &= \begin{pmatrix} a_{11} & [b_1] & [\boldsymbol{b}_2^T] \\ [b_1] & & \\ [\boldsymbol{b}_2^T] & & \Large{[A_2]} \end{pmatrix}\end{aligned}$$

とする．そして

$$A^{(2)} = \left(\begin{array}{c|c} a_{11} & b_1 \quad \mathbf{0}^T \\ \hline b_1 & \\ \mathbf{0} & \Large{A_2} \end{array}\right)$$

とする．ここで，$b_1 = mid[b_1]$，$A_2 = mid[A_2]$ である．このとき

$$|\lambda_i(A^{(2)}) - \lambda_i(A^{(1)})| \le \frac{\varepsilon_1^{(1)}}{1-\varepsilon_1^{(1)}}||A^{(1)}||_2 + \varepsilon_1^{(2)} \qquad (12)$$

を得る．$A^{(2)}$ は $A^{(1)}$ の第 1 列の第 3〜n 行が消去された対称行列であり，以上の操作は Householder 変換の代替となる．しかも，不等式 (3) が得られる．これを修正 Householder 変換と呼ぶ．

Householder 三重対角化で，Householder 変換を，修正 Householder 変換で置き換えると，行列の列

$$A^{(1)}, A^{(2)}, \cdots, A^{(n-1)}$$

と $1 \le k \le n-2$ における不等式

$$|\lambda_i(A^{(k+1)}) - \lambda_i(A^{(k)})| \le \frac{\varepsilon_k^{(1)}}{1-\varepsilon_k^{(1)}}||A^{(k)}||_2 + \varepsilon_k^{(2)}$$

を得る．$T = A^{(n-1)}$ は三重対角行列であり，ゆえに，$\alpha_1 = ||A^{(1)}||_\infty$ とし

$$\alpha_k = \frac{1}{1-\varepsilon_{k-1}^{(1)}}\alpha_{k-1} + \varepsilon_{k-1}^{(2)} \qquad (k = 2, 3, \cdots, n-2) \qquad (13)$$

とすれば

$$||A^{(k)}||_2 \le \alpha_k \qquad (k = 1, 2, \cdots, n-2)$$

である．これを (4) に代入して

$$|\lambda_i(T) - \lambda_i(A)| \le \sum_{k=1}^{n-2}\frac{\varepsilon_k^{(1)}}{1-\varepsilon_k^{(1)}}\alpha_k + \varepsilon_1^{(2)}$$

を得る．これが今回のアルゴリズムである．

表 1 計算結果 (乱数行列)

n	w	w_{old}	W
4	3.47×10^{-14}	5.43×10^{-14}	1.10×10^{-15}
8	2.01×10^{-13}	6.98×10^{-12}	2.62×10^{-15}
16	1.09×10^{-12}	4.33×10^{-8}	1.32×10^{-15}
32	7.26×10^{-12}	11.560	2.84×10^{-15}
64	5.18×10^{-11}	1.16×10^{15}	2.79×10^{-15}
128	4.35×10^{-10}	2.53×10^{43}	4.84×10^{-15}

6 数値実験

7 章のアルゴリズムを Mathematica で実現し，数値実験を行った．区間演算は Mathematica の区間演算機能を用いた．$n \times n$ 対称行列 A はその成分を $[-1, 1]$ 区間の一様乱数で生成した．
今回のアルゴリズムで求めた三重対角行列を T，誤差の上界を ω とする．

$$|\lambda_i(T) - \lambda_i(A)| \le \omega \ (1 \le i \le n)$$

が保証される．青山 [1] のアルゴリズムで求めた誤差の上界を ω_{old} とする．また

$$W = \max_{1\le i\le n}|\lambda_i(T) - \lambda_i(A)|$$

を Mathematica の多倍長機能を用い，10 進 100 桁計算したものを用い，仮に真値とした．
$n = 2^m (2 \le m \le 8)$ で行った実験の結果を表 1 に示す．
青山のアルゴリズムは $n \ge 30$ では有効な左上を作れない．また $n \le 20$ でも一貫して今回のアルゴリズムより劣る．
今回のアルゴリズムは，$n = 128$ でも有効な上昇を計算することに成功している．

7 おわりに

Householder 三重対角化の精度保証の新しいアルゴリズムを構成した．今回のアルゴリズムは昨年の青山のアルゴリズムより精度が高く，大きな n でも有効であった．

参考文献

[1] 青山 亨：対称行列に対する Householder 三重対角化の精度保証，南山大学 (2014).