二分法による固有値の精度保証付き計算
STURM 列の区間演算

2006MI058 菅野　直樹
指導教員：杉浦　洋

1　はじめ

固有値は線形代数の基本的な概念で，数理科学において多くの応用をもつ．多くの応用では, 固有値は数値計算によって求められる．固有値の分布が解析対象の特性を決定付けることも多いので，その精度保証は非常に重要である. 本論文では，対称 3 重対角行列の固有値を二分法を用いて精度保証付きまで求めるアルゴリズムを研究する．

2　三重対角行列

n 次の対称な三重対角行列を

$$S = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & & & \\ \beta_1 & \alpha_1 & \beta_1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \beta_{n-2} & \alpha_{n-1} & \beta_{n-1} \\ & & & \beta_{n-1} & \alpha_n \end{bmatrix}$$

とする．$\lambda I - S$ の k 次の首座小行列式を $\varphi_k(\lambda)$ とすれば，これはつぎの漸化式にしたがう．

$$\varphi_0(\lambda) = 1, \varphi_1(\lambda) = \lambda - \alpha_1 \qquad (1)$$

$$\varphi_k(\lambda) = (\lambda - \alpha_k)\varphi_{k-1}(\lambda) - \beta_{k-1}^2 \varphi_{k-2}(\lambda)$$
$$(k = 2, 3, \cdots, n). \qquad (2)$$

S の固有値は n 次多項式 $\varphi_n(\lambda)$ の零点であることは言うまでもない．ある β_i が零ならば，S の固有多項式は i 次の三重対角行列 S_1 と $n - i$ 次の三重対角行列 S_2 の固有多項式の積

$$\det(\lambda I - S) = \det(\lambda I - S_1)\det(\lambda I - S_2)$$

に分解されるので，S の固有値問題は低次の固有値問題に退化する．

そこで以下すべての $\beta_i \neq 0$ と仮定する．このとき，次の定理が成立する．
[定理]$\beta_i \neq 0$ $(1 \leq i \leq n)$ なら $\varphi_k(\lambda)$ は Sturm 列である．//
Sturm 列とは，以下の 3 条件を満たす連続関数の列

$$f_0(x), f_1(x), \cdots f_n(x) \equiv f(x)$$

である．
(1) $f_0(x)$ は定符号の関数である．
(2)$1 < k < n$，$\alpha \in \mathbb{R}$ に対し，$f_k(\alpha) = 0$ なら

$$f_{k-1}(\alpha) f_{k+1}(\alpha) > 0.$$

(3)$\alpha \in \mathbb{R}$ に対し，$f(\alpha) = 0$ なら $f'(\alpha) f_{n-1}(\alpha) > 0$.

$x \in \mathbb{R}$ に対し，Sturm 列から 0 を除いた数列の符号変化数を $V(x)$ で表す．このとき次の定理が成り立つ．

> 任意の区間 $(a, b]$ 内に存在する $f(x)$ の零点の個数は $V(a) - V(b)$ で与えられる．

この定理により，対象三角行列の固有値は二分法によって求めることができる．

3　Sturm 列の区間計算

二分法により，固有値の精度保証付き計算を行うためには，符号交代数 $V(\lambda)$ を論理的に正確に求める必要がある，そのためには Sturm 列の各要素の符号を正確に求める必要がある．この目的のために，我々は漸化式 (1), (2) を区間計算することにした．もし，区間 $[\varphi_k(\lambda)]$ の上端 $\overline{\varphi_k(\lambda)}$ と下端 $\underline{\varphi_k(\lambda)}$ が同符号なら，$\varphi_k(\lambda)$ の符号は，その符号で確定する．また，上端と下端が異符号なら区間 $[\varphi_k(\lambda)]$ は 0 を含むので $\varphi_k(\lambda)$ を 0 とみなし，Sturm 列から除いて符号数を数える．この措置は区間幅が小さいときには妥当で，二分法はうまく収束した．収束後，収束点の近傍で Sturm 列のすべての要素の符号が確定する点を選び，求める固有値の上界と下界を確定する．

大石 [1] によれば漸化式 (1)，(2) は数値的に安定なので区間幅は常に十分小さく保たれる．しかし，後の実験で見るように n が大きくなると区間幅は無視できないほど大きくなり，我々のアルゴリズムは破たんした．

4　数値実験

テスト行列として，

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

を用いた．A の固有値は大きい順に

$$\lambda_i = 2(1 + \cos \frac{\pi_i}{n+1}) \quad (1 \leq i \leq n)$$

である．

4.1　実験 1

次数 $n = 10$ までを実験した．$n = 10$ までは精度保証は良好であった．$n = 10$ においての結果の 1 部を示す．

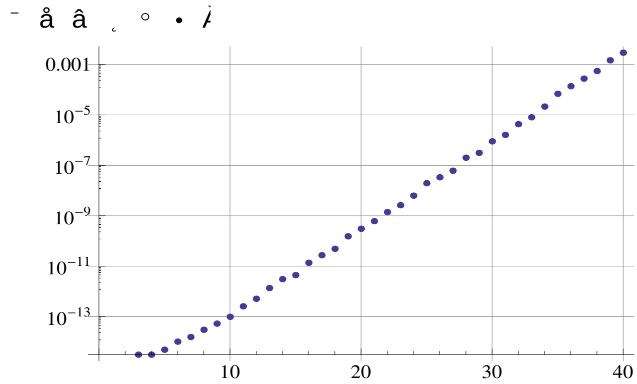
固有値番号	近似固有値	絶対誤差上界
1	3.918985947	$7.549516567 * 10^{-}14$
2	3.682507066	$9.858780459 * 10^{-}14$
⋮	⋮	⋮
9	0.3174929343	$6.405986852 * 10^{-}14$
10	0.08101405277	$7.463474283 * 10^{-}14$

4.2 実験 2

次数 $n = 40$ まで実験した．ここまでは，すべての固有値の精度保証に成功した．

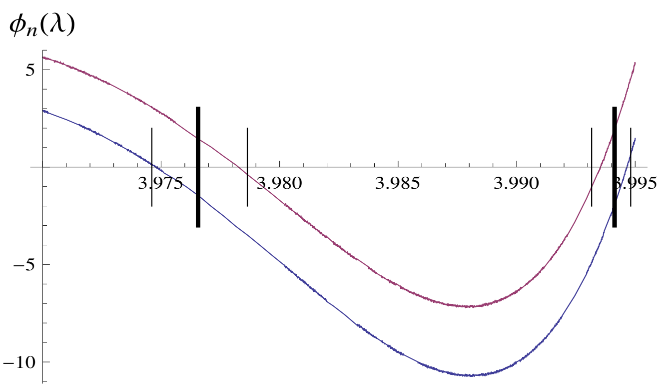
固有値	最大絶対誤差限界
3	$3.10862 * 10^{-}15$
4	$3.10862 * 10^{-}15$
5	$4.88498 * 10^{-}15$
⋮	⋮
38	0.000549316
39	0.00146484
40	0.00292969

（実験 2 のグラフ）



4.3 実験 3

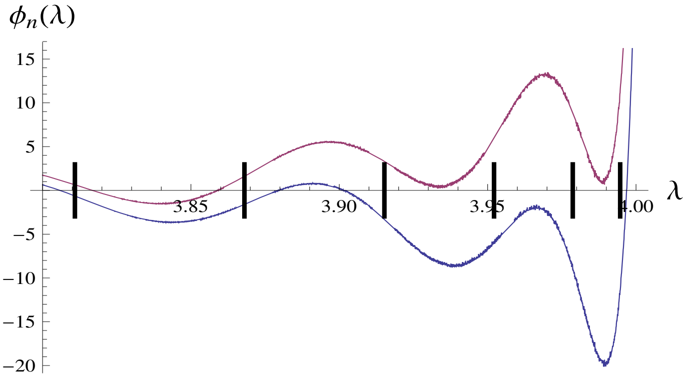
次数 $n = 40$ のとき固有多項式 $\phi_n(\lambda)$ の値を包囲する．



このグラフから固有多項式の値を包囲する区間が広いことがわかる．
また，このグラフでは太い縦棒は固有値の位置を，細い縦棒では求めた区間の上下限である．

4.4 実験 4

次数 $n = 42$ のときの固有多項式 $\phi_n(\lambda)$ を包囲する．



このグラフから区間はもっと広くなり，区別がつかなくなる．
このグラフでは太い縦棒は固有値の位置である．第 1 〜 4 固有値近辺では，$\varphi_n(\lambda)$ の符号は判定できなくなっている．

4.5 実験 5

次数 $n = 42$ のとき．

固有値番号	近似固有値	絶対誤差上界
19	2.363273702	$1.927347171 * 10^{-}13$
20	2.218742417	$1.687538997 * 10^{-}14$
21	2.073044046	$2.220446049 * 10^{-}15$
22	1.926955954	$1.554312234 * 10^{-}15$
23	1.781257583	$9.769962617 * 10^{-}15$
24	1.636726298	$1.070254996 * 10^{-}13$

次数 $n = 42$ のときでも中位の固有値は小さい誤差上界計算出来る．
これは，今後の課題にしていく．

5 おわりに

これまでの実験で，次数 $n = 10$ までででは精度保証の結果は良好であることがわかった．だが，ここから $n = 40$ までで精度は徐々に悪くなってく．これは固有多項式の値を包囲すると区間が広くなっていることからもわかる．また，次数 $n = 42$ はもっと区間が広くなり区別がつかなくなった．しかし，中位の固有値は誤差が小さくなることが分かった．これがなぜ発生するのかが今後の課題である．

参考文献

[1] 大石　進一：「精度保証付き計算」．コロナ社，東京，2000

[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] 稲垣　康之：「南山大学数理情報学部数理科学科卒業論文」(2009)

[4] 斉藤　裕樹：「南山大学数理情報学部数理科学科卒業論文」(2009)