二分法による固有値の精度保証付き計算
—スツルム列の精度保証付き計算—

2007MI183 岡山亮士

指導教員：杉浦洋

1　はじめに

本論文では，対称三重対角行列における固有値問題の精度保証付き計算法について研究を行った．そして, 対称三重対角行列式の固有値を二分法によって計算し, その際に発生する丸め誤差を Mathematica を用いて厳密に評価することを目標とする．そのために，二分法の事前誤差解析の理論を研究する．

2　IEEE754

IEEE754 は，多くのコンピュータで標準的に用いられている浮動小数点数システムの規格である．IEEE754 は, 機械実数と機械演算に関する規格であり，現在ほとんどの計算機がこれに従って設計されている．機械実数はビット数により，単精度，拡張単精度，倍精度，拡張倍精度の規格に分けられる．ここでは倍精度について述べる．

2.1　機械実数の規格

IEEE754 に基づく機械実数システムは，機械実数の集合とその上の演算によって定義される．IEEE754 によって規定される機械実数としては正規数,$\pm\infty$，± 0，副正規数，NaN の 4 つのタイプの数が用意されている．

2.2　丸めモード

一般の実数は丸めてメモリに格納される．IEEE754 では, 丸め上げ, 丸め下げ, 丸め込み, 切捨ての 4 つの丸めモードが指定できる．本研究は数値計算において丸め込みモードを用いる．実数 x を丸め込んだ結果を□ x と書く．丸め込みモードにおける丸め誤差評価に関しては次の定理が成り立つ．

2.3　四則演算の丸め誤差解析

IEEE756 における丸め込みモードの四則演算は $x \boxdot y = \square(x \cdot y)$, $\cdot \in \{+, -, \times, \div\}$ で定義される．ゆえに (1) より

$$x \boxdot y = (x \cdot y)(1+\varepsilon_1), \qquad x \boxdot y \quad = \frac{(x \cdot y)}{1+\varepsilon_2}.$$

が成立するような ε_1,ε_2 が存在する．//

定理 2.4.1　n を $nu < 1$ を満たす自然数とする．実数 δ_i $(1 \le i \le n)$ が $|\delta_i| \le n$ を満たすとき

$$1 + \theta_n = \Pi_{i=1}^{n}(1+\delta_i)$$

とすると，以下が成立する．

$$|\theta_n| \le \gamma_n \equiv \frac{nu}{1-nu}.//$$

3　対称行列の固有値

3.1　レイリー商

$A \in \mathbb{R}^{n\times n}$，$\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$，$\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0}$ に対し，以下をレイリー商と言う．

$$R(\boldsymbol{x}) = \frac{\boldsymbol{x}^T A\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{x}}, \qquad (\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0}).$$

定理 3.1

$$|R(\boldsymbol{x})| \le \|A\|_2 \ //$$

定理 3.2（Courant-Fisher のミニ・マックス定理）
A:実対称，固有値 $\lambda_1 \ge \lambda_2 \ge \cdots \ge \lambda_n$ とすると

$$\lambda_k = \max_{V_k}\left\{\min_{\boldsymbol{x}\in V_k-\{\boldsymbol{0}\}} \frac{|\boldsymbol{x}^T A\boldsymbol{x}|}{|\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{x}|}\right\},$$

$$\lambda_{n-k+1} = \min_{V_k}\left\{\max_{\boldsymbol{x}\in V_k-\{\boldsymbol{0}\}} \frac{|\boldsymbol{x}^T A\boldsymbol{x}|}{|\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{x}|}\right\}.$$

両域で V_k は $\mathbb{R}_n$ の k 次元部分空間全体を動く．//

定理 3.5　A，$\tilde{A}$ を実対称行列．$\lambda_1 \ge \lambda_2 \ge \cdots \ge \lambda_n$, $\tilde{\lambda}_1 \ge \tilde{\lambda}_2 \ge \cdots \ge \tilde{\lambda}_n$ をそれらの固有値とする．また, $\Delta A = \tilde{A} - A$ とする．このとき

$$|\tilde{\lambda}_k - \lambda_k| \le |\Delta A|_2.//$$

4　対称三重対角行列の固有値

さて，本題の対称三重対角行列について述べる．
n 次の対称三重対角行列を

$$S = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & & & & 0 \\ \beta_1 & \alpha_2 & \beta_2 & & & \\ & \beta_2 & \alpha_3 & \beta_3 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & \beta_{n-2} & \alpha_{n-1} & \beta_{n-1} \\ 0 & & & & \beta_{n-1} & \alpha_n \end{pmatrix}$$

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．

$$\varphi_0(\lambda) = 1, \qquad \varphi_1(\lambda) = \lambda - \alpha_1,$$
$$\varphi_k(\lambda) = (\lambda - \alpha_k)\varphi_{k-1}(\lambda) - \beta_{k-1}^2\varphi_{k-2}(\lambda),$$
$$k = 2, 3, \cdots, n.$$

5　首座小行列式は Sturm 列をなす

対称三重対角行列は，その首座小行列式が Sturm 列をなすので，二分法によって固有値を求めることができる．準備として，Sturm の定理と二分法について述べる．

5.1　Sturm の定理

ある区間で定義されている方程式 $f(x) = 0$ のすべての根を必要な精度で求めるためには，滑らかな関数 $f(x)$ の定義域の任意の区間内に存在する $f(x)$ の零点の個数を知ればよい．

連続関数の列

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

がつぎの 3 条件を満たすとき，これを Sturm 列という．

条件 1　$f_0(x)$ は定符号の関数である．

条件 2　$0 < k < n$ と $\alpha \in \mathbb{R}$ に対し，$f_k(\alpha) = 0$ なら，$f_{k-1}(\alpha) f_{k+1}(\alpha) < 0$.

条件 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．

定理 4.1　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．//

5.2　二分法

区間 $(a, b]$ 上で定義された方程式 $f(x) = 0$ のすべての根を $\mu(x) = V(a) - V(x)$ を用いて求める方法について述べる．

$(a, b]$ 上に存在する $f(x)$ の零点を小さい順に並べて，$\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_n$ とする．ただし，$n = \mu(b)$．許容誤差を $\delta > 0$ とし，x_i を含む幅 δ 以下の区間 $(\alpha_i] = (\underline{\alpha_i}, \overline{\alpha_i}]$ を計算する方法を二分法 (bisection method) という．二分法では，根が密集しているほど演算回数が少なくてすむ．

6　機械 Sturm 列の事前誤差解析

Sturm 列 φ_k を機械計算したもを $\tilde{\varphi}_k$ とすると，式 (2.1) より，

$$\begin{aligned}
&\tilde{\varphi}_0 = 1, \qquad \tilde{\varphi}_1 = fl(\lambda - \alpha_1) = (\lambda - \alpha_1)(1 + \varepsilon_1), \\
&\tilde{\varphi}_k = (\lambda - \alpha_k)(1 + \varepsilon_1)(1 + \varepsilon_2)(1 + \varepsilon_5)\tilde{\varphi}_{k-1} \\
&\qquad\quad - \beta_{k-1}^2 (1 + \varepsilon_3)(1 + \varepsilon_4)(1 + \varepsilon_5)\tilde{\varphi}_{k-2}.
\end{aligned}$$

ここで，ε_i ($1 \le i \le 5$ は丸めの誤差であり $|\varepsilon_i| \le u$ を満たす．また，定理 2.4.1 より

$$(1 + \varepsilon_1)(1 + \varepsilon_2)(1 + \varepsilon_5) = 1 + \delta_1, \qquad |\delta_1| \le \frac{3u}{1 - 3u},$$

$$(1 + \varepsilon_3)(1 + \varepsilon_4)(1 + \varepsilon_5) = 1 + \delta_2, \qquad |\delta_2| \le \frac{3u}{1 - 3u}.$$

であるから，

$$\begin{aligned}
&\tilde{\varphi}_1 = (\lambda - \alpha_k)(1 + \delta_1) \\
&\tilde{\varphi}_k = (\lambda - \alpha_k)(1 + \delta_1)\tilde{\varphi}_{k-1} - \beta_{k-1}^2 (1 + \delta_2)\tilde{\varphi}_{k-2}.
\end{aligned}$$

ここで，

$$(\lambda - \alpha_k)(1 + \delta_1) = \lambda - \tilde{\alpha}_k, \qquad \beta_{k-1}^2 (1 + \delta_2) \quad = \tilde{\beta}_{k-1}^2,$$

$$\begin{aligned}
&\tilde{\alpha}_k = \alpha_k + \Delta\alpha_k, \qquad \Delta\alpha_k = (\alpha_k - \lambda)\delta_1, \\
&\tilde{\beta}_k = \beta_k + \Delta\beta_k, \qquad \Delta\beta_k = \beta_k \left(\sqrt{1 + \delta_2} - 1\right)
\end{aligned}$$

と置くと，

$$\begin{aligned}
&\tilde{\varphi}_0 = 1, \qquad \tilde{\varphi}_1 = (\lambda - \tilde{\alpha}_1), \\
&\tilde{\varphi}_k = (\lambda - \tilde{\alpha}_1)\tilde{\varphi}_{k-1} - \tilde{\beta}_{k-1}^2 \tilde{\varphi}_{k-2}, \qquad (k \ge 2)
\end{aligned}$$

が成立する．ゆえに $\{\tilde{\varphi}_k\}$ は A の近似行列 $\tilde{A} = A + \Delta A$ の正確な Sturm 列である．したがって，$\{\tilde{\varphi}_k\}$ の符号交代数を $v = \tilde{V}(\lambda)$ とすると，$\tilde{\lambda}_{v+1} \le \lambda < \tilde{\lambda}_v$ であることが分かる．これと定理 3.5 より $d = \|\Delta A\|_\infty$ とすると，$d \ge \|\Delta A\|_2$ であるから

$$\begin{aligned}
\lambda_v &\ge \tilde{\lambda}_v - d > \lambda - d, \\
\lambda_{v+1} &\le \tilde{\lambda}_{v+1} + d \le \lambda + d
\end{aligned}$$

が分かる．従って, 区間 $(a, b]$ で $\tilde{V}(a) = v$，$\tilde{V}(b) = v - 1$ が成立ならば

$$a - d < \lambda_v \le b + d$$

が成立する．これが λ_v の精度保証となる．

7　おわりに

本研究では，Mathematica 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．特に，k 次の首座小行列式が Sturm 列をなすことを利用し，二分法を用いることで精度保証付き計算を研究した．そして，事前誤差解析に基づく高精度で高速な精度保証付き計算のプログラムを作成した．

プログラムにおいては，対称三重対角行列における任意の固有値を精度保証付きで求めることに成功した．しかし, 現在は大きな固有値も小さな固有値も同じ誤差評価なので, 今後の課題としては，固有値１つ１つについて誤差評価することである．

参考文献

[1] 大石進一:『精度保証付き数値計算』．コロナ社，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] 鳥居達生，牧之内三郎:『数値解析』．オーム社，1975.

[4] 山本哲朗:『数値解析入門 [増訂版]』．サイエンス社，1976.