三重対角行列の固有値の精度保証

2008M029 橋本侑奈
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従来の方法を詳しく研究し改良を行った．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の影響を Mathematica を用いて厳密に評価することを目標とする．そして，正定値問題において従来の二分法の事前誤差解析の理論を改善し，より高精度な精度保証プログラムを作成する．

2　対称行列の固有値

$A \in \mathbb{R}^{n\times n}$，$\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$，$\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0}$ 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 3.4（Courant-Fisher のミニ・マックス定理 [2]）
A:実対称，固有値 $\lambda_1 \ge \lambda_2 \ge \cdots \ge \lambda_n$ とすると

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

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

両式で 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

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

3　Sturm の定理と二分法

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．

3.1　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．//

3.2　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 $(\alpha_i] = (\underline{\alpha_i}, \overline{\alpha_i}]$ を次のようにして計算する．解 α_i $(1 \le i \le n)$ を含む初期区間を $(\alpha_i] = (\underline{\alpha_i}, \overline{\alpha_i}]$ とする．何の情報もなければ $(\alpha_i] = (a, b]$ $(1 \le i \le n)$ とする．
$i = 1, 2, \cdots, n$ の順に以下の操作を行う．

操作 1　$x = \frac{\underline{\alpha_i}+\overline{\alpha_i}}{2}$，$\mu = \mu(x)$.

操作 2　$j = 1, 2, \cdots, \mu$ で $(\alpha_j]$ を更新：
$(\alpha_j] \longleftarrow (\underline{\alpha_j}, \min\{\overline{\alpha_j}, x\}]$.

操作 3　$j = \mu + 1, \mu + 2, \cdots, n$ で $(\alpha_j]$ を更新：
$(\alpha_j] \longleftarrow (\max\{\underline{\alpha_j}, x\}, \overline{\alpha_j}]$.

操作 4　$\overline{\alpha_i} - \underline{\alpha_i} \le \delta$ なら終了．そうでなければ操作 1 にもどる．

この方法を二分法 (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．

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．

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

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．

5　機械 Sturm 列の事前誤差解析

定理 6.2　A に対する数値 Sturm 列 $\tilde{\varphi}_0(\lambda), \tilde{\varphi}_1(\lambda), \cdots, \tilde{\varphi}_n(\lambda)$ は，$A+\Delta A$ の正確な Sturm 列である．ここで，摂動 ΔA の対角要素 $\Delta\alpha_i (1 \le i \le n)$，副対角要素 $\Delta\beta_i (1 \le i \le n-1)$ は,

$$\Delta\alpha_1 = (\alpha_1 - \lambda)\varepsilon_1, |\varepsilon_1| \le \tau_1 = \mathrm{u},$$
$$\Delta\alpha_i = (\alpha_i - \lambda)\varepsilon_i, |\varepsilon_i| \le \tau_2 = \frac{3\mathrm{u}}{1-3\mathrm{u}} \quad (2 \le i \le n-1),$$
$$\Delta\beta_i = \beta_i\delta_i, |\delta_i| \le \tau_3 = \frac{\tau_2}{\sqrt{1-\tau_2}+1} \quad (1 \le i \le n-1)$$

である．ここで，u は丸め誤差である．//

定理 6.3 A に対する数値 Sturm 列 $\tilde{\varphi}_0(\lambda), \tilde{\varphi}_1(\lambda), \cdots, \tilde{\varphi}_n(\lambda)$ は，$A+\Delta A$ の正確な Sturm 列であり，その固有値は,

$$|\lambda_i(A+\Delta A) - \lambda_i(A)| \le E_0(\lambda) = \|A\|_\infty \tau_4 + \lambda\tau_2 \quad (1)$$

を満たす．ここで,

$$\tau_2 = \frac{3\mathrm{u}}{1-3\mathrm{u}}, \tau_3 = \frac{\tau_2}{\sqrt{1-\tau_2}+1}, \tau_4 = \tau_2 + 2\tau_3$$

である．//

定理 6.4　$\lambda = a$ で数値 Sturm 列の符号交替数 $V(a) = i$, $\lambda = b$ で数値 Sturm 列の符号交替数 $V(b) = i-1$ なら,

$$a - E_0(a) < \lambda_i \le b + E_0(b).$$

である．//

6　縮尺行列の固有値

6.1　縮尺行列の固有値の誤差解析

行列 $H \in \mathbb{R}^{n\times n}$ と対角行列 $D \in \mathbb{R}^{n\times n}$ によりつくられる行列 $A = DHD$ を H の縮尺行列という．また，H から A をつくる操作を対角スケーリングという．

6.2　対称正定値三重対角行列の Sturm 二分法への応用

J.Demmel と K.Veselić[1] による縮尺行列の固有値に関する摂動理論より次の定理が証明できる．

定理 7.3 A に対する数値 Sturm 列 $\tilde{\varphi}_0(\lambda), \tilde{\varphi}_1(\lambda), \cdots, \tilde{\varphi}_n(\lambda)$ は，$A+\Delta A$ の正確な Sturm 列であり，その固有値は,

$$\left|\frac{\lambda_i(A+\Delta A) - \lambda_i(A)}{\lambda_i(A)}\right| \le E_1(\lambda) \equiv \frac{\lambda\tau_2}{\lambda_i(A)} + \tau_5,$$
$$\tau_5 = \frac{\|\Delta H\|_\infty}{\lambda_n(H)}(\tau_2 + 2\tau_3)$$

を満たす．ここで，τ_2, τ_3 は定理 6.2 で定義した．//

これより，次の定理を得る．

定理 7.4 $\lambda = a$ で数値 Sturm 列の符号交替数 $V(a) = i$, $\lambda = b$ で数値 Sturm 列の符号交替数 $V(b) = i-1$ なら,

$$\frac{1-\tau_2}{1+\tau_5}a < \lambda_i \le \frac{1+\tau_2}{1-\tau_5}b$$

である．//

k	λ_k	w_0	w_1
1	1.000000238419439	1.78×10^{-14}	2.11×10^{-14}
2	$3.576278804000687 \times 10^{-6}$	1.33×10^{-15}	5.04×10^{-20}
3	$1.358178757944498 \times 10^{-11}$	1.33×10^{-15}	1.92×10^{-25}
4	$5.179388664892389 \times 10^{-17}$	1.33×10^{-15}	7.33×10^{-31}
5	$1.975734745414585 \times 10^{-22}$	1.33×10^{-15}	2.80×10^{-36}
6	$7.536817542893755 \times 10^{-28}$	1.33×10^{-15}	1.07×10^{-41}
7	$2.875067387952502 \times 10^{-33}$	1.33×10^{-15}	4.07×10^{-47}
8	$1.096751161038517 \times 10^{-38}$	1.33×10^{-15}	1.55×10^{-52}
9	$4.183773652539617 \times 10^{-44}$	1.33×10^{-15}	5.92×10^{-58}
10	$1.595982554049792 \times 10^{-49}$	1.33×10^{-15}	2.26×10^{-63}

表 1　$n = 10, \gamma = \frac{1}{4}, d = \frac{1}{512}$ のときの結果

7　Mathematica による数値実験

$A = DHD$ で,

$$H = \begin{pmatrix} 1 & \gamma & & 0 \\ \gamma & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & \gamma \\ 0 & & \gamma & 1 \end{pmatrix}, D = \begin{pmatrix} d^0 & & & 0 \\ & d^1 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & d^{n-1} \end{pmatrix}$$

また,

$$\|H\|_\infty = 1 + \gamma,$$
$$\lambda_n(H) = 1 - 2|\gamma|\cos\frac{\pi}{n+1}$$

である．

7.1　実験結果

$n = 10, d = 1, d = \frac{1}{8}, d = \frac{1}{64}, d = \frac{1}{512}$ で，定理 7.5 による精度保証は，小さい固有値の相対誤差を定理 6.4 より正確に評価することが出来た．実験結果の一部を表 1 に示す．

8　おわりに

本研究では，対称三重対角行列における固有値の精度保証付き計算法について研究を行った．特に，正定値対称縮尺行列に対し，Sturm 二分法の特性を詳しく分析し，従来の理論を改善し，圧倒的に小さい精度保証区間幅を得る理論を示した．それにより，従来の精度保証付き固有値計算アルゴリズムよりも高精度なアルゴリズムを構築し，Mathematica 上でプログラムの作成し，数値実験をした．今後の課題としては，理論を拡張し行列に対する制約をゆるめることである．

参考文献

[1] J.Demmel and K.Veselić：『Jacobi's Method is More Accurate than QR』．SIAM J.Matrix.Anal.Appl.,Vol.13,No.4.pp.1204-1245, 1992.

[2] 山本哲朗：『数値解析入門 [増訂版]』．サイエンス社, 1976.