一般化固有値問題の精度保証付き計算とその応用

渡部 善隆* 山本 野人** 中尾 充宏***

*九州大学大型計算機センター **電気通信大学情報工学科 ***九州大学大学院数理学研究科

Verification Methods of Generalized Eigenvalue Problems and its Applications

Yoshitaka Watanabe* Nobito Yamamoto** Mitsuhiro T. Nakao***

*Computer Center, Kyushu University

**Department of Computer Science and Information Mathematics,
The University of Electro-Communications

***Graduate School of Mathematics, Kyushu University

Abstract. We consider numerical verification methods to obtain the maximum absolute value of generalized eigenvalue problems. We present four kinds of methods and compare the performance in various situations as well as give evaluation of the advantage and disadvantage of these methods. All numerical results have been calculated by the interval arithmetic software for considering the rounding error occuring in the calculation. Finally, we will present an application to an eigenvalue problem appeared in some a priori error estimates for the finite element solution of the Stokes equations.

1 はじめに

本論文では $n \times n$ の実対称行列 A と $n \times n$ の実対称正定値行列 B に対する一般化固有値問題:

$$A\boldsymbol{x} = \lambda B\boldsymbol{x} \qquad (\lambda \in \boldsymbol{R},\ \ \boldsymbol{0} \neq \boldsymbol{x} \in \boldsymbol{R}^n) \tag{1.1}$$

の固有値の絶対値最大の上界を精度保証付きで評価するいくつかの手法を提案する．

一般化固有値問題 (1.1) は微分方程式，差分近似方程式系の安定性， Markov 連鎖，経済理論，振動解析，主成分分析，熱伝導問題，化学反応系など，科学の分野に広く現れる [14], [25], [22], [28]．また多くの場合 A が対称行列， B が対称かつ正定値行列となることが知られている．さらに固有値の絶対値最大を数値的に厳密に見積もることにより，偏微分方程式の離散解と真の解との定量的誤差評価が可能になるなどの応用例も報告されている [16], [17], [19], [30]．

高次の行列に対する固有値問題の直接解法は一般に存在しない．現在広く使われている科学技術計算ソフトウェア: LAPACK[1], NAG ライブラリ [15], IMSL[6], NUMPAC[21] などで採用されている標準固有値問題 ($A\boldsymbol{x} = \lambda\boldsymbol{x}$) の計算方法は QR 法, Householder-bisection 法, Householder-QR 法, Jacobi 法, ベキ乗法, 逆反復法, Lanczos 法などである．一般化固有値問題に関しては，行列 B が正定値対称であるという条件のもと Cholesky 分解により標準固有値問題に帰着させることが多い．標準固有値問題を介さない解法としては QZ 法がよく知られている (固有値問題の数値解法については例えば [4], [25], [27], [29] を参照されたい)．

しかしこれらの手法はある収束条件を課した反復近似であり，その結果は (収束性・安定性の議論が十分になされているとしても) 厳密に正しいとはいえない．計算機による固有値問題の数値計算を精度保証付きで行なうためには，浮動小数点演算によって発生する丸め誤差の見積りに加えて反復法の打ち切り誤差をも考慮する必要がある．

我々は本論文において， Cholesky 分解による標準固有値問題への変形を通して (1.1) を満たす固有値の絶対値最大の上界を評価する既存の 2 つのアルゴリズムを紹介し，それぞれを一般化固有値問題の

特質に着目することにより計算精度・速度両面から改良した方法を提案する．さらに各手法を計算機上に実装し性能評価を行って得られた知見を報告する．数値実験では浮動小数点演算の結果を常に包含する区間演算ライブラリを用いた．従って得られた数値結果は厳密に精度保証されたものである．最後に応用例として Stokes 方程式の有限要素解に対する a priori 誤差評価定数を厳密に評価した結果を紹介する．

2 アルゴリズム

この章では一般化固有値問題の固有値の絶対値最大の上界を精度保証付きで評価するアルゴリズムを提案する．

2.1 アルゴリズムに関する注釈

(1.1) の固有値の絶対値最大を評価する問題は

$$\gamma := \sup_{\boldsymbol{0}\neq\boldsymbol{x}\in\boldsymbol{R}^n} \left| \frac{\boldsymbol{x}^T A\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}^T B\boldsymbol{x}} \right| \tag{2.1}$$

を評価することと同値である [7], [31]．ここで上つきの "T" は転置記号とする．以下 γ にできるだけ近い上界を精度保証付きで求める方法を考える．

浮動小数点演算による数値計算の結果に含まれる丸め誤差の厳密な評価を得るために区間演算 (interval arithmetic) を用いる [18], [20]．区間演算では数値に含まれる誤差を考慮するため実数 x を下限 $\underline{x}$ と上界 $\overline{x}$ による区間 (interval)

$$[\,\underline{x}, \overline{x}\,] = \{x \mid \underline{x} \le x \le \overline{x}\,\}$$

で表現し，すべての演算を区間に対する演算に置き換える．従って以降，行列 A, B は各成分が区間となる区間行列とし，A に含まれるすべての実対称行列および B に含まれるすべての実対称正定値行列に対して (2.1) を評価するアルゴリズムを考える．

アルゴリズム中の "(*interval*)" は区間演算による丸め誤差を考慮した厳密な計算を，"(*floating*)" は浮動小数点演算による近似計算を表す．ここでの「厳密」とは，丸め誤差のない無限桁の計算を行なった結果が区間演算によって真に包み込まれているという意味である．例えば「B を区間演算により CC^T と Chokesky 分解する」とは「B に含まれる正定値対称行列を丸め誤差なく Chokesky 分解して得られる下三角行列をすべて含むような区間行列 C を求める」ことである．また区間 $x = [\,\underline{x}, \overline{x}\,]$ の絶対値を $|x| := \max\{|\underline{x}|, |\overline{x}|\}$ と定義する．正のスカラーとして計算する値 (λ_1, λ_2, $\lambda_1\lambda_2$ など) は，区間演算の結果として決まる区間の上界を採用する．

区間行列に対して浮動小数点演算による近似計算を行なう場合は，各要素の中点をとった行列を用いる．また "$\tilde{T}$" のようにチルダ付きのものは近似計算により得られた行列を，"C" のようににチルダが付いていない行列は各要素が区間となる行列を表す．スカラーについても同様とする．

行列の 2-ノルムを

$$\|A\|_2 := \sup_{\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{x}=1} \|A\boldsymbol{x}\|_2$$

(ベクトルノルムはユークリッドノルム)，l_∞-ノルム (∞-ノルム) を

$$\|A\|_\infty := \max_{1\le i\le n} \sum_{j=1}^{n} |A_{ij}|$$

で定義する．また A_{ij} は行列の成分をあらわす．

固有値・固有ベクトルの近似計算は，実装する計算機などに応じて「好み」の方法を選択する．

2.2 近似対角化法

一般化固有値問題 (1.1) は正定値対称行列 B の Cholesky 分解 $B = CC^T$ により標準固有値問題:

$$C^{-1}AC^{-T}\boldsymbol{x} = \lambda\boldsymbol{x}$$

に変形することができる．ここで C は正則な下三角行列，$C^{-T} := (C^{-1})^T$ である．

近似対角化法 (*approximate diagonalization method*)[30] は，一般化固有値問題を標準固有値問題に変形したのちに近似的な対角化を行い，行列ノルムの計算により固有値を評価する方法である．

アルゴリズム: **ADM(近似対角化法)**

Step 1. B を CC^T と Cholesky 分解 (*interval*).

Step 2. $E := C^{-1}AC^{-T}$ を計算 (*interval*).

Step 3. E の正規化された固有ベクトルにより近似対角化行列 $\tilde{T}$ を作成 (*floating*).

Step 4. $D := \tilde{T}^T E\tilde{T}$, $\lambda_1 := \max\limits_{1\le i\le n}\sum\limits_{j=1}^{n}|D_{ij}|$ を計算 (*interval*).

Step 5. $I := (\tilde{T}\tilde{T}^T)^{-1}$, $\lambda_2 := \max\limits_{1\le i\le n}\sum\limits_{j=1}^{n}|I_{ij}|$ を計算 (*interval*).

Step 6. $\lambda_1\lambda_2$ を計算 (*interval*).

Theorem 1 アルゴリズム ADM で得られた $\lambda_1\lambda_2$ は (2.1) の γ の上界を与える．

証明 (cf.[30]): A に含まれる任意の対称行列を A_0, B に含まれる任意の正定値対称行列を B_0 とする．B_0 の正定値性と Step 1 より，C に含まれる正則な下三角行列 C_0 が存在し $B_0 = C_0C_0^T$ と書ける．$\boldsymbol{y} := C_0^T\boldsymbol{x}$ とおけば，

$$\sup_{\mathbf{0}\neq\boldsymbol{x}\in\boldsymbol{R}^n}\left|\frac{\boldsymbol{x}^TA_0\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}^TB_0\boldsymbol{x}}\right| = \sup_{\mathbf{0}\neq\boldsymbol{y}\in\boldsymbol{R}^n}\left|\frac{\boldsymbol{y}^TC_0^{-1}A_0C_0^{-T}\boldsymbol{y}}{\boldsymbol{y}^T\boldsymbol{y}}\right|$$

を得る．ここで $E_0 := C_0^{-1}A_0C_0^{-T}$ とおくと E_0 は E に含まれる対称行列である．$\boldsymbol{z} := \tilde{T}^{-1}\boldsymbol{y}$ とおくと

$$\sup_{\mathbf{0}\neq\boldsymbol{y}\in\boldsymbol{R}^n}\left|\frac{\boldsymbol{y}^TE_0\boldsymbol{y}}{\boldsymbol{y}^T\boldsymbol{y}}\right| = \sup_{\mathbf{0}\neq\boldsymbol{z}\in\boldsymbol{R}^n}\left|\frac{\boldsymbol{z}^T\tilde{T}^TE_0\tilde{T}\boldsymbol{z}}{\boldsymbol{z}^T\tilde{T}^T\tilde{T}\boldsymbol{z}}\right|$$

となる．よって $\boldsymbol{\xi} := \tilde{T}\boldsymbol{z}$ とおき正規化を行なうことで，

$$\begin{aligned}\sup_{\mathbf{0}\neq\boldsymbol{z}\in\boldsymbol{R}^n}\left|\frac{\boldsymbol{z}^T\tilde{T}^TE_0\tilde{T}\boldsymbol{z}}{\boldsymbol{z}^T\tilde{T}^T\tilde{T}\boldsymbol{z}}\right| &= \sup_{\mathbf{0}\neq\boldsymbol{z}\in\boldsymbol{R}^n}\left|\frac{\boldsymbol{z}^T\tilde{T}^TE_0\tilde{T}\boldsymbol{z}}{\boldsymbol{z}^T\boldsymbol{z}}\frac{\boldsymbol{z}^T\boldsymbol{z}}{\boldsymbol{z}^T\tilde{T}^T\tilde{T}\boldsymbol{z}}\right| \\ &\le \sup_{\boldsymbol{z}^T\boldsymbol{z}=1}\left|\boldsymbol{z}^T\tilde{T}^TE_0\tilde{T}\boldsymbol{z}\right| \sup_{\boldsymbol{\xi}^T\boldsymbol{\xi}=1}\left|\boldsymbol{\xi}^T(\tilde{T}\tilde{T}^T)^{-1}\boldsymbol{\xi}\right|\end{aligned}$$

を得る．ここで対称行列 $\tilde{T}^TE_0\tilde{T}$, $(\tilde{T}\tilde{T}^T)^{-1}$ の 2 次形式の絶対値が行列の 2-ノルム (この場合スペクトル半径と一致) で上から評価されることから

$$\sup_{\mathbf{0}\neq\boldsymbol{x}\in\boldsymbol{R}^n}\left|\frac{\boldsymbol{x}^TA_0\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}^TB_0\boldsymbol{x}}\right| \le \|\tilde{T}^TE_0\tilde{T}\|_2\ \|(\tilde{T}\tilde{T}^T)^{-1}\|_2$$

が成立する．さらに Gerschgorin の定理よりスペクトル半径の上界は行列の l_∞-ノルムで与えられる (例えば [7]) ことより結論が導かれる．□

近似対角化法は，近似対角化行列の作用により標準固有値問題を対角行列であることが期待される行列と単位行列であることが期待される行列の固有値評価に帰着させる手法である．問題点として行列の対角成分が非対角成分に比べて小さい場合 (詳しくは数値例を参照) に区間演算による Cholesky 分解が破綻すること，Step 5 の I の計算において逆行列を厳密に評価する必要があることなどがあげられる．

2.3 Rump の方法

Rump の方法 (*Rump's method*)[24] も近似対角化法と同様，まず一般化固有値問題を標準固有値問題に変形する．次に固有値の絶対値最大を近似計算し，真の値を上回ることを期待して僅かに膨らませる処理により上界であることを判定する．なお I_n は $n \times n$ の単位行列とする．

アルゴリズム: Rump(Rump の方法)

Step 1. B を CC^T と Cholesky 分解 (*interval*).

Step 2. $E := C^{-1}AC^{-T}$ を計算 (*interval*).

Step 3. E の固有値の絶対値最大 $\tilde{\beta}$ を近似計算 (*floating*).

Step 4. ある微小な数 $0 < \delta \ll 1$ により $\beta := (1+\delta)\tilde{\beta}$ とする (*interval*).

Step 5. $X_1 := -E + \beta I_n, \quad X_2 := E + \beta I_n$ を計算 (*interval*).

Step 6. X_k $(k = 1, 2)$ を Cholesky 分解 ($X_k \approx \tilde{C}_k \tilde{C}_k^T$) する (*floating*). Cholesky 分解が失敗する場合は δ の値を大きくして **Step 4** に戻るか停止.

Step 7. $Y_k := \tilde{C}_k \tilde{C}_k^T - X_k, \quad \lambda_k := \max\limits_{1 \le i \le n} \sum\limits_{j=1}^{n} |(Y_k)_{ij}|$ $(k = 1, 2)$ を計算 (*interval*).

Step 8. $\beta + \max\{\lambda_1, \lambda_2\}$ を計算 (*interval*).

Theorem 2 アルゴリズム Rump で得られた $\beta + \max\{\lambda_1, \lambda_2\}$ は (2.1) の γ の上界を与える．

証明 (cf.[24]): A に含まれる任意の対称行列を A_0, B に含まれる任意の正定値対称行列を B_0 とすれば，近似対角化法と同様に E に含まれる対称行列 E_0 が存在する．対称行列の 2 次形式の絶対値が行列の 2-ノルムで，またさらに l_∞-ノルムで押えられることより，$\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{x} = 1$ なる任意の $\boldsymbol{x} \in \boldsymbol{R}^n$ に対し

$$\left|\boldsymbol{x}^T(\tilde{C}_1\tilde{C}_1^T + E_0 - \beta I_n)\boldsymbol{x}\right| \le \lambda_1, \qquad \left|\boldsymbol{x}^T(\tilde{C}_2\tilde{C}_2^T - E_0 - \beta I_n)\boldsymbol{x}\right| \le \lambda_2$$

を得る．$\tilde{C}_i\tilde{C}_i^T$ $(i = 1, 2)$ の正定値性と $\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{x} = 1$ であることを用いると，

$$\lambda_1 \ge \boldsymbol{x}^T(\tilde{C}_1\tilde{C}_1^T + E_0 - \beta I_n)\boldsymbol{x} \ge \boldsymbol{x}^T E_0 \boldsymbol{x} - \beta,$$

および

$$\lambda_2 \ge \boldsymbol{x}^T(\tilde{C}_2\tilde{C}_2^T - E_0 - \beta I_n)\boldsymbol{x} \ge -\boldsymbol{x}^T E_0 \boldsymbol{x} - \beta,$$

従って

$$-\beta - \lambda_2 \le \boldsymbol{x}^T E_0 \boldsymbol{x} \le \beta + \lambda_1$$

となり結論が導かれる．□

Rump の方法は近似対角化法と同じく区間演算による Cholesky 分解を行うという問題点がある．ただしこれは標準固有値問題のアルゴリズムを一般化固有値問題に適用したからであり，標準固有値問題のスペクトル半径を評価するには優れた手法である．なお Step 4 の δ は行列の性質・次元数・欲しい精度に応じて慎重に選択する必要がある．また A が正定値の場合にはアルゴリズム中の X_2 に関する手順は省略可能である．

標準固有値問題の固有値・固有関数の厳密な誤差限界を与える方法は，そのほか [10], [12], [13], [32], [33] などがある．これらは個々の固有値・固有ベクトルの存在を厳密な誤差限界とともに証明する手法であり何れもそれぞれの特徴をもつ手法である．しかし (2.1) に適用するためには n 個の固有値を分離した形で包み込む必要があり必ずしも効率的とはいえない．

2.4 改良近似対角化法

改良近似対角化法 (*approximate diagonalization method-advanced*) は近似対角化法の修正版である．近似対角化行列を近似的に求めればよい点に着目し，区間演算による Cholesky 分解を近似計算に置き換えることが特徴である．

アルゴリズム: ADM-a(改良近似対角化法)

Step 1. Cholesky 分解 $B \approx \tilde{C}\tilde{C}^T$ を行う (*floating*).

Step 2. $\tilde{E} := \tilde{C}^{-1}A\tilde{C}^{-T}$ を計算 (*floating*).

Step 3. $\tilde{E}$ の正規化された固有ベクトルにより近似対角化行列 $\tilde{T}$ を作成 (*floating*).

Step 4. $\tilde{P} := \tilde{T}^T\tilde{C}^{-1}$ を計算 (*floating*).

Step 5. $D := \tilde{P}A\tilde{P}^T$, $\lambda_1 := \max\limits_{1\le i\le n}\sum\limits_{j=1}^{n}|D_{ij}|$ を計算 (*interval*).

Step 6. $I := (\tilde{P}B\tilde{P}^T)^{-1}$, $\lambda_2 := \max\limits_{1\le i\le n}\sum\limits_{j=1}^{n}|I_{ij}|$ を計算 (*interval*).

Step 7. $\lambda_1\lambda_2$ を計算 (*interval*).

Theorem 3 アルゴリズム ADM-a で得られた $\lambda_1\lambda_2$ は (2.1) の γ の上界を与える．

証明: A に含まれる任意の対称行列を A_0, B に含まれる任意の正定値対称行列を B_0 とする．$\boldsymbol{z} = \tilde{P}^{-T}\boldsymbol{x}$ とすれば，

$$\sup_{\mathbf{0}\neq\boldsymbol{x}\in\boldsymbol{R}^n}\left|\frac{\boldsymbol{x}^TA_0\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}^TB_0\boldsymbol{x}}\right| = \sup_{0\neq\boldsymbol{z}\in\boldsymbol{R}^n}\left|\frac{\boldsymbol{z}^T\tilde{P}A_0\tilde{P}^T\boldsymbol{z}}{\boldsymbol{z}^T\tilde{P}B_0\tilde{P}^T\boldsymbol{z}}\right|$$

を得る．以下近似対角化法と同様．□

行列 $\tilde{P}$ はその作り方より A を対角行列，B を単位行列に変形することが期待される行列である．改良近似対角化法は近似対角化法や Rump の方法のような標準固有値問題への変換の際に生じる Cholesky 分解を近似的に行なえばよく，そのため区間拡大による計算の破綻が起こりにくいことが特徴である．また Rump の方法のように適当なパラメータを設定する必要がないという利点もある．近似対角法と比較すると，区間演算による Cholesky 分解が必要ない反面，行列積計算が一つ増える．従って計算コストの面ではそれほど効率がよいとはいえない．

2.5 対称行列の正定値性判定法

最後に提案する一般化 Rump 法の前に，アルゴリズム中で用いる実対称行列の正定値性を判定する手法を述べる．

行列の正定値性の判定法には [9], [11], [26] などがある．しかしこれらの手法は限定された行列に対して適用可能であったり，置換行列の存在や反復法の収束を判定条件とするなど，必ずしも汎用性と厳密性を持つアルゴリズムとはいえない．アルゴリズム VPD は区間演算による丸め誤差の考慮を行なっているため，正定値性が判定された場合には数学的な厳密性を保証する．またあわせて最小固有値の下界を得ることができる．以下，正定値性を判定する区間行列を X とする．

アルゴリズム: **VPD**(正定値性判定法)

Step 1. X の最小固有値 $\tilde{\rho}$ を求める (*floating*). $\tilde{\rho} \leq 0$ の場合停止.

Step 2. ある微小な数 $0 < \delta \ll 1$ により $\rho := (1-\delta)\tilde{\rho} > 0$ とする (*interval*).

Step 3. $Y := X - \rho I_n$ を計算 (*interval*).

Step 4. Y を Cholesky 分解 ($Y \approx \tilde{C}\tilde{C}^T$) する (*floating*). Cholesky 分解が失敗する場合は δ の値を大きくして **Step 2** に戻るか停止.

Step 5. $Z := \tilde{C}\tilde{C}^T - Y, \quad \lambda := \max\limits_{1\leq i\leq n} \sum\limits_{j=1}^{n} |Z_{ij}|$ を計算 (*interval*).

Step 6. $\rho - \lambda > 0$ ならば終了．そうでない場合は δ の値を大きくして **Step 2** に戻るか停止.

Theorem 4 アルゴリズム VPD の Step 6 で $\rho - \lambda > 0$ が成立するならば，X に含まれるすべての実対称行列は正定値である．また，$\rho - \lambda$ は X の最小固有値の下界を与える．

証明: X に含まれる任意の実対称行列を X_0 とおく．$\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{x} = 1$ なる任意の $\boldsymbol{x} \in \boldsymbol{R}^n$ に対し 2 次形式の絶対値 $|\boldsymbol{x}^T(\tilde{C}\tilde{C}^T - (X_0 - \rho I_n))\boldsymbol{x}|$ は Z の l_∞-ノルムで上から評価される．よって

$$|\boldsymbol{x}^T(\tilde{C}\tilde{C}^T - (X_0 - \rho I_n))\boldsymbol{x}| \leq \lambda$$

が成立する．さらに $\tilde{C}\tilde{C}^T$ が正定値であることより，

$$\boldsymbol{x}^T(X_0 - \rho I_n)\boldsymbol{x} \geq -\lambda$$

となる．従って $\boldsymbol{x}^T X_0 \boldsymbol{x} \geq \rho - \lambda > 0$ となり結論を得る．□

2.6 一般化 Rump 法

一般化 **Rump** 法 (*generalized Rump's method*) は Rump の方法をもとに区間演算による Cholesky 分解を回避した方法である．

アルゴリズム: **G-Rump**(一般化 **Rump** 法)

Step 1. (2.1) の γ の近似値 $\tilde{\beta}$ を計算 (*floating*).

Step 2. ある微小な数 $0 < \delta \ll 1$ により $\beta := (1+\delta)\tilde{\beta}$ とする (*interval*).

Step 3. $X_1 := -A + \beta B, \quad X_2 := A + \beta B$ を計算 (*interval*).

Step 4(*interval*): VPD により X_1, X_2 の正定値性を判定．ともに正定値ならば終了．正定値性が得られなかった場合は δ の値を変えて **Step 2** に戻るか停止．

Theorem 5 アルゴリズム G-Rump の Step 4 で $X_1,\ X_2$ の正定値性が判定されたならば，β が (2.1) の上界を与える．

証明: A に含まれる任意の対称行列を A_0, B に含まれる任意の正定値対称行列を B_0 とする．X_1, X_2 に含まれるすべての対称行列は正定値であることから $\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{x} = 1$ なる任意の $\boldsymbol{x} \in \boldsymbol{R}^n$ に対し

$$\boldsymbol{x}^T(-A_0 + \beta B_0)\boldsymbol{x} > 0, \qquad \boldsymbol{x}^T(A_0 + \beta B_0)\boldsymbol{x} > 0,$$

すなわち

$$-\beta\boldsymbol{x}^T B_0\boldsymbol{x} < \boldsymbol{x}^T A_0\boldsymbol{x} < \beta\boldsymbol{x}^T B_0\boldsymbol{x}$$

が成立する．ここで B_0 は正定値であるので両辺を $\boldsymbol{x}^T B_0\boldsymbol{x} > 0$ で割り $\boldsymbol{x}$ についての sup を取ると，

$$\sup_{\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{x}=1} \left| \frac{\boldsymbol{x}^T A_0\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}^T B_0\boldsymbol{x}} \right| \leq \beta$$

を得る．□

一般化 Rump 法は区間演算による Cholesky 分解および逆行列の区間評価が必要ないことから計算コストの面で優れている．ただし VPD とあわせた 2 つのパラメータ δ は慎重に選ぶ必要がある．また A が正定値の場合は Rump の方法と同様，アルゴリズム中の X_2 に関する手順は省略可能である．

標準固有値問題を介することなく (1.1) の固有値・固有関数を精度保証付きで与える方法には [2], [3], [23] などがある．しかしこれらの手法は標準固有値問題と同様，固有値・固有ベクトルの存在を厳密な誤差限界とともに検証する手法であるため (2.1) の評価を効率良く行なう手法とはいえない．

3 各手法の評価

この章では前章の 4 つのアルゴリズムを計算機上に実装し数値実験を行なった結果を述べる．

3.1 実験環境

数値実験では区間演算ライブラリ `INTLIB_90`[8] を用いた．`INTLIB_90` は倍精度実数を上限・下限とする区間および丸め誤差の厳密な評価を可能とする区間演算を実現する関数ライブラリ INTLIB を Fortra 90 のモジュール機能に拡張したものである．

計算機はベクトル並列計算機 FUJITSU VPP700/56 および Sun Ultra Enterprise 450 の単一 CPU を用いた．詳細は Table 1 の通りである．

Table 1. Specification of numerical environment

machines	VPP700/56	Ultra Enterprise 450
OS	UXP/V V10L20(X97121)	SunOS 5.5.1
software	Fortran90/VP V10L10(L97121)	WorkShop Compiler Fortran 90 1.2
performance	2.2GFLOPS/PE	UltraSPARC-II 300MHz

3.2　テスト行列の作成方法

一般化固有値問題の精度を調べるため，以下の手順で行列を作成する:

1. $D := \mathrm{diag}[\lambda_1, \cdots, \lambda_n]$ をランダムに定める．
2. $\boldsymbol{v} \in \boldsymbol{R}^n$ をランダムに定める．
3. $\boldsymbol{u} := \dfrac{\boldsymbol{v}}{\|\boldsymbol{v}\|_2}$ を区間演算により求める．
4. $M := I_n - 2\boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^T$ を区間演算により求める．
5. Q をランダムな下三角行列に定める．
6. $A := QM^TDMQ^T, \quad B := QQ^T$ を区間演算により求める．

上の手順で生成された一般化固有値問題に対し，区間行列 A, B の中に $\lambda_1, \cdots, \lambda_n$ を固有値に持つ行列が存在する．実際 M は直交行列 M_0 を含むことから

$$QM_0^TDM_0Q^T\boldsymbol{x} = \lambda QQ^T\boldsymbol{x}$$

の左側から Q^{-1} を掛け $Q^T\boldsymbol{x}$ をあらためて $\boldsymbol{x}$ とおくと，$M_0^TDM_0\boldsymbol{x} = \lambda\boldsymbol{x}$ となる．ここで M_0 が直交行列であることから固有値問題は $D\boldsymbol{x} = \lambda\boldsymbol{x}$ と同値となる．これらのテスト行列はランダムに生成されていながらあらかじめ固有値がわかるという利点がある．テストでは B の対角成分の「優位さ」を測る

$$\mathrm{domi}(B) := \min_{1\le i\le n} \frac{|B_{ii}|}{\sum_{j\neq i}|B_{ij}|}$$

を行列 B の性質として定義する．テスト行列で Q を定めるとき対角成分と非対角成分の比を調整することで $\mathrm{domi}(B)$ を変えることができる．$\mathrm{domi}(B) > 1$ となれば B は狭義優対角行列となる．

乱数発生は Fortran 90 の組み込み関数 `RANDOM_NUMBER` を，アルゴリズム ADM, ADM-a で必要になる逆行列の区間評価は Brouwer の不動点定理にもとづく連立 1 次方程式の解の検証アルゴリズム [18], [24] を拡張して用いた．

3.3　区間演算による Cholesky 分解

近似対角化法・ Rump の方法は区間演算による Cholesky 分解を用いて標準固有値問題へと帰着する．しかし $\mathrm{domi}(B)$ が小さいと演算の過程で区間幅が拡大し精度が悪くなる，もしくはピボットが 0 を含むことより区間の除算が不可能になり計算が打ち切られる可能性が高くなる． Fig. 1 は 3.2節の手順で作成したテスト行列に対し， B を区間演算により Cholesky 分解して得られた下三角行列 $(:= \hat{Q})$，および B の各成分の中点をとった行列を Fortran の IEEE 倍精度浮動小数点演算により Cholesky 分解して得られた行列 $(:= \tilde{Q})$ と Q との相対誤差 $(\|\hat{Q} - Q\|_\infty/\|Q\|_\infty,\ \|\tilde{Q} - Q\|_\infty/\|Q\|_\infty)$ をそれぞれプロットしたものである．テストは $\mathrm{domi}(B)$ を変えながら 500 回行なった． $n = 100$ である． Cholesky 分解のアルゴリズムは [29] を用いた．

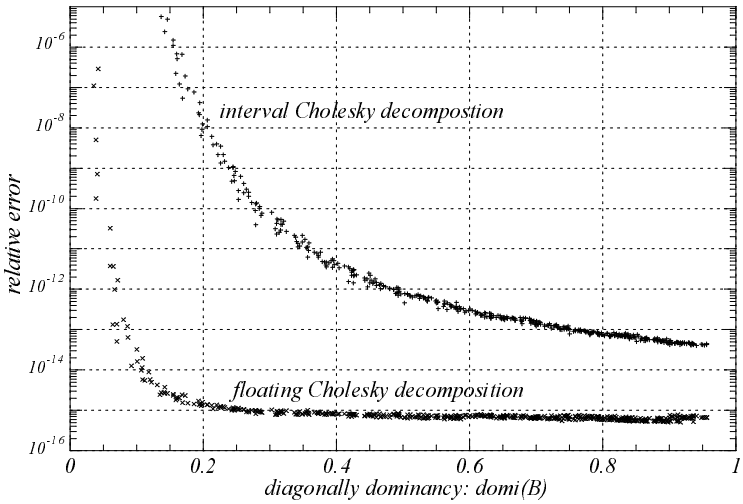

Fig. 1. Relative error for interval Cholesky decomposition

$\mathrm{domi}(B) < 0.1$ ではすべての区間演算による Cholesky 分解が失敗した．$\mathrm{domi}(B)$ が小さい場合は，分解が成功したとしても区間の拡大により誤差が生じることがわかる．これらを回避するためには適切なピボット選択の導入を検討するか他の手法を選択する必要がある．

3.4 性能比較

Fig. 2 は 110 個のテスト行列に対し 2 章で提案した 4 つの手法を適用して得られた固有値の絶対値最大の上界と真の値との相対誤差をプロットしたものである．$n = 100$ である．Rump の方法と一般化 Rump 法のパラメータは，幾つかの値の中から相対誤差が最小となるものを選んでいる．

$\max_{1\le i\le n}|\lambda_i| / \min_{1\le i\le n}|\lambda_i|$ の平均は 62300 であった． 一般化 Rump 法で用いる VPD のパラメータは 10^{-2} に設定した．浮動小数点演算による固有値・固有ベクトルの計算は倍精度の Householder-bisection 法を用いた．

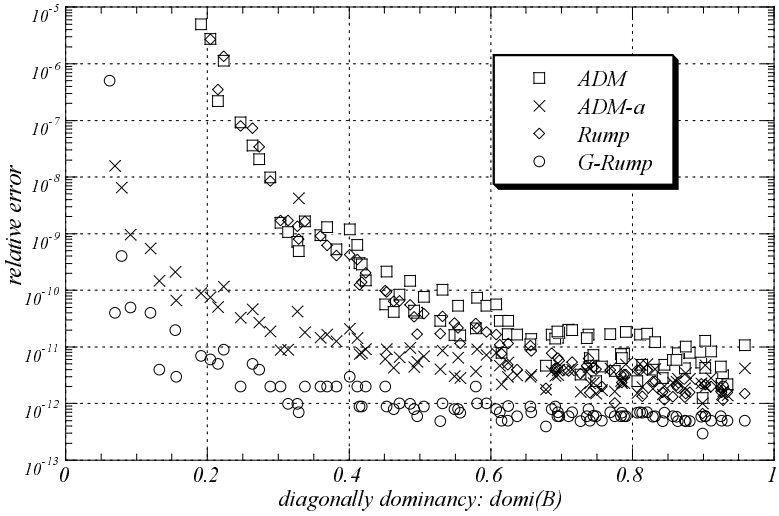

Fig. 2. Relative error for test matrices

$\mathrm{domi}(B)$ が小さい場合，標準固有値問題を経由する方法はよい精度が得られない．一般化 Rump 法は改良近似対角法よりよい精度を与える．$\mathrm{domi}(B)$ が 1 に近付くと各手法の誤差は接近する．しかし一般化 Rump 法がよい精度を与えている．

Table 2 はあるテスト行列に対する各手法の経過時間を Fortran 90 の組み込み関数 SYSTEM_CLOCK で計測したものである．実際には反復回数の差などにより多少の差が出る．

Table 2. Elapsed time for each algorithms(sec.)

computer(sizes)	ADM	ADM-a	Rump	G-Rump
VPP700/56(100×100)	39	40	5.3	2.8
VPP700/56(200×200)	337	313	41	19
Ultra Enterprise 450(100×100)	22	23	3.6	3.2
Ultra Enterprise 450(200×200)	169	183	24	23

VPP700/56 で一般化 Rump 法が最も速い理由は，浮動小数点演算による近似計算をベクトル演算により高速に処理できる部分が多いためである．区間演算は演算子を再定義することから VPP700/56 ではベクトル化の対象外となる．そのためスカラー性能に勝る Ultra Enterprise 450 が他の手法では優位である．手法の比較ではどちらの計算機による実験でも一般化 Rump 法が最も効率よく実行された．

3.5 正定値性の判定

Table 3 は対称な正定値行列であることが解析的に分かっているものの条件数が指数関数的に増大する Hilbert 行列:

$$A_{ij} = \frac{1}{i+j-1} \quad i,j = 1,2,\ldots,n$$

に対し VPD を適用した結果である．$n = 10$ までの正定値性が判定できた．$\delta = 10^{-6}$，下限との相対誤差は [5] での値を真値として求めた．条件数は最大固有値を最小固有値で除した値である．

Table 3. Verification of positive-definiteness for Hilbert matrix

n	minimum eigenvalue	condition number	relative error
3	$2.687340355773529 \times 10^{-3}$	5.24057×10^{2}	1.00000×10^{-6}
4	$9.670230402258689 \times 10^{-5}$	1.55137×10^{4}	1.00004×10^{-6}
5	$3.287928772171863 \times 10^{-6}$	4.76607×10^{5}	1.00139×10^{-6}
6	$1.082799484565550 \times 10^{-7}$	1.49511×10^{7}	1.04452×10^{-6}
7	$3.493898605991218 \times 10^{-9}$	4.75367×10^{8}	2.40610×10^{-6}
8	$1.111538966372442 \times 10^{-10}$	1.52576×10^{10}	4.62505×10^{-5}
9	$3.499676402911493 \times 10^{-12}$	4.93155×10^{11}	1.56398×10^{-3}
10	$1.093153819379666 \times 10^{-13}$	1.60263×10^{13}	5.07078×10^{-2}

4 応用例

この章では 2 章のアルゴリズムを具体的な問題に適用した結果を紹介する．

4.1 Stokes 方程式の誤差評価

次の同次境界条件を持つ Stokes 問題を考える:

$$\begin{cases} -\nu\Delta u + \nabla p = f & \text{in} \quad \Omega, \\ \operatorname{div} u = 0 & \text{in} \quad \Omega, \\ u = 0 & \text{on} \quad \partial\Omega. \end{cases} \tag{4.1}$$

領域 Ω は $\boldsymbol{R}^2$ の凸多角形，$u=(u_1,u_2)^T$, $f=(f_1,f_2)^T$ は 2 次元ベクトル値関数, $\nu>0$ とする．未知関数は速度場を表す u と圧力場を表す p である． $H^k(\Omega)$ を通常の k 次 Sobolev 空間とし，関数空間を

$$\begin{aligned} H_0^1(\Omega) &\equiv \{v\in H^1(\Omega)\ ;\ v=0 \text{ on } \partial\Omega\},\\ L_0^2(\Omega) &\equiv \{v\in L^2(\Omega)\ ;\ \int_\Omega v\,dx\,dy=0\}, \end{aligned}$$

$|\cdot|_0$ を Ω 上の L^2 ノルム, $|\cdot|_1$ を Ω 上の H_0^1 セミノルムで定義する．このとき (4.1) の弱形式は $H_0^1(\Omega)^2\times L_0^2(\Omega)$ 内に一意の解 $[u,p]$ を持つ．

さらに $\mathcal{T}_h$ を領域 $\Omega\subset\boldsymbol{R}^2$ の三角形または四角形分割， h を $\mathcal{T}_h$ の scale parameter とする． $h>0$ は通常領域の分割幅を表す．ここで $X_h\subset H_0^1(\Omega)\cap C(\bar\Omega)$ を速度場 u の各成分を近似する有限要素部分空間， $Y_h\subset L_0^2(\Omega)\cap C(\bar\Omega)$ を圧力場 p を近似する有限要素部分空間とするとき，適当な仮定のもと (4.1) の有限要素近似解 $[u_h,p_h]\in X_h^2\times Y_h$ と真の解 $[u,p]$ に対し次の誤差評価が成り立つ [19]:

Lemma 1 任意の $f\in L^2(\Omega)^2$ に対し

$$\text{(4.2)}\qquad \begin{cases} |u-u_h|_1 \le \left(\dfrac{1}{\nu^2}+\dfrac{1}{\beta^2}\right)^{\frac12} C(h)\,|f|_0,\\ |p-p_h|_0 \le \left(\dfrac{1}{\beta}+\dfrac{\nu}{\beta^2}\right) C(h)\,|f|_0, \end{cases}$$

ただし

$$\text{(4.3)}\qquad C(h):=\sqrt{(C_0hK_2+K_1)^2+(C_0h)^2},$$

および $\beta>0$, $C_0>0$ は領域 Ω にのみ依存する算定可能な定数， $K_1>0$, $K_2>0$ は Ω, X_h, Y_h によって決まる定数.

K_1 と K_2 は X_h, Y_h の基底によって決まる対称行列 A_1, A_2 と X_h の基底によって決まる正定値対称行列 B に対して

$$K_i\le\left(\sup_{\boldsymbol{0}\neq\boldsymbol{x}\in\boldsymbol{R}^n}\frac{\boldsymbol{x}^TA_i\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}^TB\boldsymbol{x}}\right)^{\frac12}$$

で評価することができる．行列はともに密行列である．従って K_1, K_2 の厳密な上界が評価できれば (4.3) によって $C(h)$ が決まり，さらに (4.2) によって Stokes 方程式の有限要素解に対する定量的な a priori な誤差評価が可能となる．

4.2 数値例

$\Omega=(0,1)\times(0,1)$ の正方領域，区間 $(0,1)$ を L 等分し L^2 個の矩形に分割する．このとき $h=1/L$ となる． X_h は連続な区分 2 次多項式， Y_h は連続な区分一次多項式， $\nu=1$ とする．このとき $C_0=1/(2\pi)$, $1/\beta^2=4+2\sqrt{2}$ である．

Table 4 は 2 章の各手法を適用して得られた K_1, K_2 および $C(h)$ の上界である． “floating” は FUJITSU VPP700/56 上の Fortran を用い IEEE 形式の倍精度 (64 ビット) 浮動小数点演算によって近似計算した値である．近似計算における一般化固有値問題は， Cholesky 分解により標準固有値問題に変形したのち Householder-bisection 法を適用した．行列サイズは $L=5$ で 162×162, $L=10$ で 722×722, $L=15$ で 1682×1682， $\mathrm{domi}(B)\approx0.58$ である．一般化 Rump 法・ Rump の方法のパラメータは $L=5$ のとき $\delta=10^{-9}$, $L=10$ のとき $\delta=10^{-7}$, $L=15$ のとき $\delta=10^{-5}$， VPD のパラメータは L によらず $\delta=10^{-2}$ である．

Table 4. A priori error constants for Stokes equations

L	algorithms	K_1	K_2	$C(h)$
5	G-Rump	0.0510087631049135**3**	1.26829492539874**8**	0.0967651166811025**8**
	Rump	0.0510087631123835**7**	1.26829492679912**3**	0.0967651167302514**7**
	ADM	0.0510087635750482**0**	1.26829497863336**1**	0.0967651187252785**7**
	ADM-a	0.0510087640434023**0**	1.26829497955962**8**	0.0967651191954104**5**
	floating	0.0510087630794088**0**	1.26829492476460**0**	0.0967651166379544**8**
10	G-Rump	0.0279408413339388**3**	1.23811130351075**2**	0.0502338906893038**7**
	Rump	0.0279408420946870**6**	1.23811152388443**9**	0.0502338947375286**4**
	ADM	0.0279409402602783**2**	1.23812788278759**9**	0.0502342347931413**3**
	ADM-a	0.0279408531511331**2**	1.23811324905661**9**	0.0502339312668515**7**
	floating	0.0279408399368964**4**	1.23811124160519**0**	0.0502338884297323**4**
15	G-Rump	0.0189660532438912**7**	1.23801968615049**3**	0.0338098783220994**3**
	Rump	0.0189660650864544**9**	1.23802365922562**4**	0.0338099295923890**6**
	ADM	0.0189707248894951**5**	1.23861226347765**3**	0.0338202839454262**3**
	ADM-a	0.0189843406867802**2**	1.24237830764477**7**	0.0338711580690850**2**
	floating	0.0189659584143350**6**	1.23801349609852**4**	0.0338097259227335**7**

謝辞

本研究の遂行にあたり，九州大学大学院数理学研究科の田中得登氏 (現在株式会社ソフネット) には多数の有益な数値実験データを提供していただきました．また，ドイツ Hamburg-Harburg 工科大学の Siegfried M. Rump 教授には，この研究の端緒となる貴重なアドバイスと “一般化 Rump 法” と命名することへの快い許可をいただきました．この場をかりてお礼申しあげます．

参考文献

[1] Anderson, E., Bai, Z., Bischof, C., Demmel, J., Dongarra, J., Du Croz, J., Greenbaum, A., Hammarling, S., McKenney, A., Ostrouchov, S., and Sorensen, D., *LAPACK Users' Guide, Second Edition*, Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, ISBN 0-89871-345-5, 1995. (`http://www.netlib.org/lapack/`)

[2] Behnke, H., Inclusion of Eigenvalues of General Eigenvalue Problems for Matrices, in U. Kulisch and H. J. Stetter (Editors), Scientific Computation with Automatic Result Verification, *Computing, Supplement*, Vol.6 (1988) pp.69–78.

[3] Behnke, H., The Calculation of Guaranteed Bounds for Eigenvalues Using Complementary Variational Principles, *Computing*, Vol.47 (1991) pp.11–27.

[4] Golub, G. H., and Van Loan, C. F., *Matrix Computations, Third Edition*, The Johns Hopkins University Press, Baltimore, ISBN 0-8018-5413-X, 1996.

[5] Gregory, R. T., and Karney, D. L., *A Collection of Matrices for Testing Computational Algorithms*, John Wiley & Sons, New York, ISBN 0-471-32669-0, 1969.

[6] *IMSL FORTRAN, C, Java^{TM} and MPI-Enhanced Mathematics and Statistics Libraries*, `http://www.vni.com/products/imsl/`, Visual Numerics Inc., July, 1998.

[7] 伊理 正夫, 線形代数 II, 岩波講座・応用数学 基礎 1, 岩波書店, ISBN 4-00-010791-7, 1994.

[8] Kearfott, R. B., and Kreinovich, V., *Applications of Interval Computations*, Kluwer Academic Publishers, Netherland, 1996. (`http://interval.usl.edu/kearfott.html`)

[9] 李 磊, 正定値行列の実用的な判別法について, 日本応用数理学会論文誌, Vol.7, No.1, pp.91–96 (1997).

[10] Lohner, R., Enclosing all Eigenvalues of Symmetric Matrices, in Ch. Ullrich and J. Wolff von Gudenberg (Editors), *Accurate Numerical Algorithms: A Collection of Reserch Papers*, Reserch Reports ESPRIT, Project 1072, DIAMOND(Development and Integration of Accutare Mathematical Operations in Numerical Data-Processing), Vol.1, Springer-Verlag, Berlin, 1989, pp.87–103.

[11] Evan M. Ma, and Christopher J. Z., On Lower Bounds for the Smallest Eigenvalue of a Hermitian Positive-Definite Matrix, *IEEE Transactions on Information Theory*, Vol.41, No.2, pp.539–540 (1995).

[12] Mayer, G., Enclosures for Eigenvalues and Eigenvectors, in L. Atanassova and J. Herzberger (Editors), *Computer Arithmetic and Enclosure Methods*, (Proceedings of the Third International IMACS-GAMM Symposium on Computer Arithmetic and Scientific Computing (SCAN-91), Oldenburg, Germany, October 1st–4th, 1991), Elsevier Science, North Holland, Amsterdam, 1992, pp.49–68.

[13] Mayer, G., Result Verification for Eigenvectors and Eigenvalues, in Jürgen Herzberger (Editor), *Topics in Validated Computations* (Proceedings of the IMACS-GAMM International Workshop on Validated Computation, Oldenburg, Germany, August 30th–September 3rd, 1993), Elsevier Science, North Holland, Amsterdam, 1994, pp.209–276.

[14] 村田 健郎, 線形代数と線形計算法序説, Information & Computing 6, サイエンス社, ISBN 4-7819-0427-0, 1986.

[15] *NAG Fortran Library*, `http://www.nag.co.uk/`, The Numerical Algorithms Group Ltd, Oxford UK., March, 1998.

[16] 中尾 充宏, 山本 野人, 渡部 善隆, Stokes 方程式の有限要素解に対する a priori 誤差評価, 科学技術における数値計算の理論と応用, 京都大学数理解析研究所講究録, Vol.944 (1996) pp.41–49.

[17] 中尾 充宏, 山本 野人, A Priori 誤差評価定数の計算機による数値評価について, 科学技術における数値計算の理論と応用 II, 京都大学数理解析研究所講究録, Vol.990 (1997) pp.224–234.

[18] 中尾充宏, 山本野人, 精度保証付き数値計算 コンピュータによる無限への挑戦, チュートリアル：応用数理の最前線, 日本評論社, ISBN 4-535-78258-X, 1998.

[19] Nakao, M. T., Yamamoto, N., and Watanabe, Y., A Posteriori and Constructive A Priori Error Bounds for Finite Element Solutions of the Stokes Equations, *Journal of Computational and Applied Mathematics*, Vol.91 (1998) pp.137–158.

[20] Neumaier, A., *Interval Methods for Systems of Equations*, Cambridge University Press, ISBN 0-521-33196-X, Cambridge, 1990.

[21] NUMPAC 使用手引書 (VOL.1–3), 富士通株式会社, 1994 . (`http://cronos.fuis.fukui-u.ac.jp/numpac/`)

[22] 小国 力, Fortran 95, C & Java による新数値計算法 – 数値計算とデータ分析 –, Information & Computing 94, サイエンス社, ISBN 4-7819-0855-1, 1997.

[23] Rump, S. M., Guaranteed Inclusions for the Complex Generalized Eigenproblem, *Computing*, Vol.42 (1989) pp.225–238.

[24] Rump, S. M., Verification Methods for Dense and Sparse Systems of Equations, in Jürgen Herzberger (Editor), *Topics in Validated Computations* (Proceedings of the IMACS-GAMM International Workshop on Validated Computation, Oldenburg, Germany, August 30th–September 3rd, 1993), Elsevier Science, North Holland, Amsterdam, 1994, pp.63–135.

[25] シャトラン, F. (伊理正夫, 伊理由美 訳), 行列の固有値 最新の解法と応用, シュプリンガー・フェアラーク東京, ISBN 4-431-70597-X, 1993.

[26] Szulc, T., Testing Some Properties of Real Matrices, *Computers and Mathematics with Application*, Vol.31, No.4/5, pp.63–65 (1996).

[27] 戸川 隼人, マトリクスの数値計算, オーム社, ISBN 4-274-07008-5, 1971.

[28] 戸川 隼人, 計算機のための数値計算, サイエンスライブラリ コンピュータテキスト 5, サイエンス社, ISBN 4-7819-0291-X, 1976.

[29] Wilkinson, J. H., and Reinsch, C., *Linear Algebra*, Handbook for Automatic Computation Volume II, Springer-Verlag, NewYork, ISBN 3-540-05414-6, 1971.

[30] Yamamoto, N., and Nakao, M. T., Numerical Verifications of Solutions for Elliptic Equations in Non-convex Polygonal Domains, *Numerische Mathematik*, Vol.65 (1993) pp.503–521.

[31] 山本 哲朗, 数値解析入門, サイエンスライブラリ 現代数学への入門 14, サイエンス社, ISBN 4-7819-0155-7, 1976.

[32] Yamamoto, T., Error Bounds for Computed Eigenvalues and Eigenvectors, *Numerische Mathematik*, Vol.34 (1980) pp.189–199.

[33] Yamamoto, T., Error Bounds for Computed Eigenvalues and Eigenvectors. II, *Numerische Mathematik*, Vol.40 (1982) pp.201–206.

渡部 善隆 (正会員) 〒 812-8581 福岡市東区箱崎 6-10-1
1991 年九州大学大学院理学研究科数学専攻修士課程修了．博士 (数理学)．九州大学大型計算機センター助教授．専門は数値計算 ．精度保証付き数値計算法，偏微分方程式の数値解法の研究に従事．
e-mail: watanabe@cc.kyushu-u.ac.jp, URL: http://www.cc.kyushu-u.ac.jp/RD/watanabe/

山本 野人 (正会員) 〒 182-8585 東京都調布市調布ヶ丘 1-5-1
1986 年京都大学大学院工学研究科数理学専攻修士課程修了．博士 (理学)．電気通信大学電気通信学部情報工学科計算科学講座助教授．専門は数値解析．偏微分方程式に対する数値的検証法の研究に従事．日本数学会会員．
e-mail: yamamoto@im.uec.ac.jp, URL: http://www.cs.uec.ac.jp/cs/

中尾 充宏 (正会員) 〒 812-8581 福岡市東区箱崎 6-10-1
1974 年九州大学大学院理学研究科数学専攻修士課程修了．理学博士．九州大学院数理学研究科数理学専攻計算数理講座教授．専門は計算数学．偏微分方程式の数値解法，偏微分方程式の解に対する数値的検証法，精度保証付き数値計算法の研究に従事．日本数学会，情報処理学会，日本計算工学会会員．
e-mail: mtnakao@math.kyushu-u.ac.jp, URL: http://www.math.kyushu-u.ac.jp/rigaku/keisan/