[1] VOL. 21 NO. 1 MAR. 2011 1

チュートリアル

精度保証付き数値計算 (4)
—区間演算と有限次元問題の精度保証

渡部 善隆

1 はじめに

最終回となる今回は, 精度保証付き数値計算を実現するための基盤となる区間演算の概念と, Krawczyk 法による有限次元非線形連立方程式の精度保証について説明します．あわせて，第 2 回および第 3 回の積み残しである連立 1 次方程式と行列のスペクトルノルムの精度保証法を紹介します．なお，行列解析に関する用語や性質は，最低限の記述にとどめています．詳しくは文献 [1, 2] を参照してください.

2 区間演算

区間演算（ interval arithmetic）は，故・須永 照雄 氏により初めて導入され [3]，R.E. Moore により体系的な萌芽をみた手法であり,「計算機で表現できる数を用いて無限桁の実数を包み込む」という発想から生まれました．区間演算の歴史・文献については，文献 [4, 1.5 節], [5, 2.5 節] を参照してください.

2.1 区間表現

$$X = [\underline{x}, \overline{x}] = \{x \in \mathbb{R} \mid \underline{x} \le x \le \overline{x},\quad \underline{x}, \overline{x} \in \mathbb{R}\}$$

で表現される閉集合 X を区間と呼び，区間全体の集合を $\mathbb{IR}$ で表記します．$\underline{x}, \overline{x} \in \mathbb{R}$ $(\underline{x} \le \overline{x})$ を区間 X の下限・上限あるいは下端・上端と呼びます．$\underline{x} = \overline{x}$ となる区間 X を点区間と呼びます．したがって，実数 $\mathbb{R}$ は特別な場合として区間に含まれます.

わたなべ よしたか．九州大学情報基盤研究開発センター.

2.2 区間に対する四則演算

区間 $X = [a, b]$, $Y = [c, d] \in \mathbb{IR}$ と演算 $* \in \{+, -, \cdot, /\}$ （乗算記号 “$\cdot$” は省略する場合があります）に対し，2 項演算 “$*$” を

$$X * Y \equiv \{x * y \mid x \in X, y \in Y\} \tag{2.1}$$

で定義します．ただし，除算の場合は $0 \notin Y$ とします．このとき，$\mathbb{IR}$ は演算 $*$ に関して閉じていること，すなわち $X * Y \in \mathbb{IR}$ を示すことができます．具体的には，四則演算の結果は

$$\begin{aligned} X + Y &= [a + c, b + d] \\ X - Y &= [a - d, b - c] \\ X \cdot Y &= [\min\{ac, ad, bc, bd\}, \\ &\qquad \max\{ac, ad, bc, bd\}] \\ X/Y &= [a, b] \cdot [1/d, 1/c] \qquad (0 \notin Y) \end{aligned}$$

となります．区間および区間に対する四則演算を用いて，区間ベクトル・区間行列とそれらの演算を，自然な拡張として定義することができます．また，複素区間への拡張も可能です．以降，実区間ベクトルを $\mathbb{IR}^n$，実区間行列を $\mathbb{IR}^{n\times n}$ と表記します.

2.3 区間演算の実装

区間演算を実現するためには，区間の上限・下限および演算結果の上限・下限を，計算機で取り扱い

可能な数で表現する必要があります．このような区間演算を機械区間演算または丸め区間演算と呼びます．現在，機械区間演算を実現する多くのソフトウェアパッケージが開発・提供されています．詳しいソフトウェアの情報は，web サイト Interval Computation

`http://www.cs.utep.edu/interval-comp/`

から入手可能です．

2.4 区間演算の性質

区間演算は，実数における四則演算の拡張となっています．しかし，《すべての値を包み込む》という演算のため，必ずしも実数における四則演算と同じ性質を持つとは限りません．

区間演算は包含関係における単調性を持ちます．つまり，$* \in \{+, -, \cdot, /\}$ に対し，$A \subset A', B \subset B'$ ならば，$A * B \subset A' * B'$ となり，区間幅は計算が進むにつれて増大する傾向を持ちます．

また，加法に関する逆元が存在せず，$[1,2]-[1,2] = [-1,1]$ のように，$X-X$ は 0 になりません．さらに，乗法に関する逆元も存在せず，$[1,2]/[1,2] = [1/2,2]$ のように，X/X は 1 を含む区間になります．

2.5 区間演算の注意点

前節で見たように，区間演算は “包含単調性” と呼ばれる性質を持つため，演算結果を完全に保証するものの，場合によっては保証区間の幅が非常に大きくなる可能性があります．そのため，例えば，通常の浮動小数点を用いたプログラムの変数の宣言を一律区間変数型に置き直すだけでは，実用的な結果が得られないことがしばしばです．今日では，包含単調性を克服するための様々な手段が講じられ，効率的な機械区間演算の実現技術が整えられています [4, 6]．

3 Krawczyk 法による有限次元問題の精度保証

この章では，有限次元問題の精度保証でよく用いられる，Krawczyk 法を紹介します[†1]．なお，以下の議論は，そのまま複素数にも拡張可能です．有限次元問題の精度保証の詳細は，文献 [6, 4, 5] をご覧ください．また，Krawczyk 法と並ぶ基礎的な精度保証法である Newton-Kantrovich の定理については文献 [7] を参照願います．以降，I は単位行列とします．また，包含記号 $\subset$ は等号も含む意味で用います．

3.1 問題設定

$\boldsymbol{f}$ を $\mathbb{R}^n$ から $\mathbb{R}^n$（$n \geq 1$）への連続微分可能な写像とし，

$$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{0} \tag{3.1}$$

を満たす $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ を求める問題を考えます．$\boldsymbol{f}$ の $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ における微分すなわち Jacobi 行列 $\boldsymbol{f}'[\boldsymbol{x}]$ を，$(\boldsymbol{f}'[\boldsymbol{x}])_{ij} = \partial f_i(\boldsymbol{x})/\partial x_j$ $(1 \leq i,j \leq n)$ で表します．また，$\boldsymbol{X} \in \mathbb{IR}^n$ に対して，$\boldsymbol{f}'[\boldsymbol{X}]$ を，その値域 $\{\boldsymbol{f}'[\hat{\boldsymbol{x}}] \in \mathbb{R}^n \mid \hat{\boldsymbol{x}} \in \boldsymbol{X}\}$ を区間行列として拡張したもの（区間包囲）として表すことにします．

次に，問題 (3.1) の近似解 $\tilde{\boldsymbol{x}} \in \mathbb{R}^n$ と，近似解 $\tilde{\boldsymbol{x}}$ における Jacobi 行列の逆行列の近似 $R \approx \boldsymbol{f}'[\tilde{\boldsymbol{x}}]^{-1}$ を取ります．R は点区間行列でよく，正確に Jacobi 行列の逆行列である必要はありません．

3.2 Krawczyk-Moore 作用素

ゼロベクトル $\boldsymbol{0} \in \mathbb{R}^n$ を包含する $\boldsymbol{X} \in \mathbb{IR}^n$ に対し，$\tilde{\boldsymbol{x}}$ と R を用いた写像 $\boldsymbol{K} : \mathbb{IR}^n \to \mathbb{IR}^n$ を，

$$\boldsymbol{K}(\boldsymbol{X}) := -R \cdot \boldsymbol{f}(\tilde{\boldsymbol{x}}) + \{I - R \cdot \boldsymbol{f}'[\tilde{\boldsymbol{x}} + \boldsymbol{X}]\}\boldsymbol{X} \tag{3.2}$$

で定義します．$\boldsymbol{K}$ は Krawczyk-Moore 作用素あるいは Krawczyk 作用素と呼ばれる作用素を少し修正したものです．

$\tilde{\boldsymbol{x}}$ は方程式 (3.1) の近似解ですので，$\boldsymbol{K}(\boldsymbol{X})$ の定義 (3.2) の第 1 項 $R \cdot \boldsymbol{f}(\tilde{\boldsymbol{x}})$ は小さいことが期待

†1 発音をそのままカタカナ表記に敢えてあてると「クラフチック」が比較的近いようです．

されます．また，$\mathbf{0} \in \boldsymbol{X}$ となる区間 $\boldsymbol{X}$ の幅が小さいならば，R の定義より，$R \cdot \boldsymbol{f}'[\tilde{\boldsymbol{x}} + \boldsymbol{X}] \approx I$ であることが期待されます．つまり，$\boldsymbol{K}$ は，集合（ここでは区間ベクトル）をより小さな集合に移す「縮小性」[†2]を持つことが期待されます．

3.3 解の存在条件

次の定理により，解の存在条件を確認することができます．

定理 3.1 式 (3.2) で定義された作用素 $\boldsymbol{K}$ と $\mathbf{0} \in \boldsymbol{X} \in \mathbb{IR}^n$ に対し，

$$\boldsymbol{K}(\boldsymbol{X}) \subset int(\boldsymbol{X}) \tag{3.3}$$

が成立するとき，R および $\boldsymbol{f}'[\tilde{\boldsymbol{x}} + \boldsymbol{X}]$ に含まれるすべての行列は正則であり，かつ，方程式 (3.1) の解 $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ が $\tilde{\boldsymbol{x}} + \boldsymbol{K}(\boldsymbol{X})$ の中に局所一意に存在する．

$\mathrm{int}(\boldsymbol{X})$ は X の内点全体を意味します．したがって，式 (3.3) は，$\boldsymbol{K}(\boldsymbol{X})$ が $\boldsymbol{X}$ に完全に包含されていることを意味します．定理 3.1 の証明は，文献 [8, 定理 2.9, pp.19], [4, Theorem 13.3] を参照してください．証明には，第 1 回で紹介した Schauder の不動点定理の有限次元版である Brouwer の不動点定理 [6] を用います．

3.4 検証アルゴリズム

定理 3.1 に基づく解の検証アルゴリズムを右に示します． ε を用いた候補者集合の拡張技法は，“epsilon-inflation” と呼ばれる加速法のひとつです．具体的な $\varepsilon > 0$ の値は，与えられた問題によって応じて設定します．ステップ 4) の (b) は，前のステップで求めた $\boldsymbol{Y}$（ $\boldsymbol{X}$に置き直されています）が $\mathbf{0}$ を含まない場合を想定した措置です．

†2 数学用語としては不変写像に対応する「不変性」を使う方が適切かもしれません．ここでは，動的なイメージを重視しました

有限次元非線形方程式の解の検証アルゴリズム

1） $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) = \mathbf{0}$ の近似解 $\tilde{\boldsymbol{x}}$ を計算．

2） $\boldsymbol{f}'[\tilde{\boldsymbol{x}}]$ の近似逆行列 R を計算．

3） $\boldsymbol{Z} := -R \cdot \boldsymbol{f}(\tilde{\boldsymbol{x}})$ を精度保証付きで計算．初期区間ベクトル $\boldsymbol{X}$ と反復数 $k := 0$ をセット．

4） (a) ある定数 $\varepsilon > 0$ に対し区間拡大 $\hat{\boldsymbol{X}} := (1 + [-\varepsilon, \varepsilon])\boldsymbol{X}$ を行う．

(b) $\hat{\boldsymbol{X}}$ と $\mathbf{0}$ を含む最小の区間ベクトルをあらためて $\boldsymbol{X}$ と置く．

(c) $\boldsymbol{Y} := \boldsymbol{Z} + \{I - R \cdot \boldsymbol{f}'[\tilde{\boldsymbol{x}} + \boldsymbol{X}]\}\boldsymbol{X}$ を精度保証付きで計算．

5） $\boldsymbol{Y} \subset \mathrm{int}(\boldsymbol{X})$ ならば検証完了．このとき $\tilde{\boldsymbol{x}} + \boldsymbol{Y}$ 内に解が局所一意に存在．そうでなければ $k := k + 1, \boldsymbol{X} = \boldsymbol{Y}$ として 4) に戻る．k があらかじめ定めた最大反復回数に到達した場合や設定した閾値を超えた場合は反復終了，検証失敗．

3.5 連立 1 次方程式の精度保証

Krawczyk 法の特別な場合として，$A \in \mathbb{IR}^{n \times n}$, $\boldsymbol{b} \in \mathbb{IR}^n$ に対する連立 1 次方程式:

$$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \tag{3.4}$$

の精度保証定理を導くことができます．

定理 3.2 方程式 (3.4) の近似解 $\tilde{\boldsymbol{x}} \in \mathbb{R}^n$ と A の近似逆行列 $R \in \mathbb{R}^{n \times n}$ を定める．$\boldsymbol{X} \in \mathbb{IR}^n$ に対し，

$$\boldsymbol{Y} := R(\boldsymbol{b} - A\tilde{\boldsymbol{x}}) + (I - RA)\boldsymbol{X} \subset int(\boldsymbol{X}) \tag{3.5}$$

が成り立てば，R および A に含まれるすべての行列は正則であり，A に含まれる任意の $\hat{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ と $\boldsymbol{b}$ に含まれる任意の $\hat{\boldsymbol{b}} \in \mathbb{R}^n$ に対して，$\hat{A}\hat{\boldsymbol{x}} = \hat{\boldsymbol{b}}$ となる唯一の元 $\hat{\boldsymbol{x}} \in \mathbb{R}^n$ が $\tilde{\boldsymbol{x}} + \boldsymbol{Y}$ に存在する．

証明は，文献 [8, 系 2.5, pp.15], [4, Theorem 10.8] を，検証アルゴリズムは [4, Algorithm 10.7]

を参照してください．

定理 3.2 を実装する場合には，A が疎行列であったとしても，一般に近似逆行列 R は密行列となることに注意してください．また，疎行列の特性を生かした連立 1 次方程式の高速な精度保証方式については，文献 [9] を参照してください．

3.6 固有値問題の精度保証

（一般化）固有値問題:

$$A\boldsymbol{x} = \lambda B\boldsymbol{x} \tag{3.6}$$

は，固有ベクトルに対する正規化条件を追加することで，式 (3.1) に帰着することができます[†3]．特に A が Hermite または対称行列で B が正定値行列（正定値の定義は次章参照）の場合には，効率的な精度保証アルゴリズムが種々提案されています．詳しくは文献 [6, 2] を参照してください．

4 正定値性の判定

行列の正定値性の判定は，次章の行列のスペクトルノルム評価をはじめとする行列解析において，重要な役割を担います．なお，本章と次章で紹介する定理は，この分野で創造的な仕事をされているドイツ・Rump 教授によるものです．

4.1 正定値性・半正定値性の定義

Hermite 行列 $A^H = A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ に対し，

$$\boldsymbol{x}^H A\boldsymbol{x} > 0, \qquad \forall \boldsymbol{x}(\neq \boldsymbol{0}) \in \mathbb{C}^n \tag{4.1}$$

が成り立つとき，A は正定値行列であるといい，$A \succ 0$ で表記します．^{H} は共役転置記号です．また，

$$\boldsymbol{x}^H A\boldsymbol{x} \ge 0, \qquad \forall \boldsymbol{x} \in \mathbb{C}^n \tag{4.2}$$

が成り立つとき，A は半正定値行列であるといい，$A \succeq 0$ で表記します．正定値行列は $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$ ならば $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$ となるため正則です．また，$A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ が正則行列ならば，$A^H A$ は Hermite 正定値行列となります．

†3 「形式的には」です．固有値の多重度などによっては必ずしも解が求まらない可能性もあります．

4.2 行列ノルムの定義

以降の節で用いる 2 つの行列ノルムを定義します．$A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ です．ベクトルに対する $\|\cdot\|_2$ は，通常の Euclid ノルムです．

$$\left[\begin{array}{l} \|A\|_2 \ := \max\limits_{\boldsymbol{x}^H\boldsymbol{x}=1} \|A\boldsymbol{x}\|_2 = \sqrt{A^H A \text{ の最大固有値}} \\ \qquad\quad = A \text{ の最大特異値}, \\ \|A\|_\infty := \max\limits_{1\le i\le n} \sum\limits_{j=1}^{n} |A_{ij}|. \end{array}\right.$$

それぞれ，スペクトルノルム（2 ノルム），最大値ノルムと呼ばれます．特に

$$\|A\|_2 \le \|A\|_\infty, \qquad A = A^H \in \mathbb{C}^{n\times n} \tag{4.3}$$

はよく知られた評価です．

4.3 正定値性の判定法

Hermite 行列が正定値であることの判定方法として，以下の定理があります [10].

定理 4.1 $A = A^H \in \mathbb{C}^{n\times n}$ に対し，A の最小固有値の近似値を $\tilde{a} > 0$，その $\varepsilon > 0$ 縮小を $a := (1-\varepsilon)\tilde{a} > 0$ とする．このとき，$A - aI$ の近似 *Cholesky* 分解: $\tilde{C}\tilde{C}^H \approx A - aI$ に対し，

$$a > \|\tilde{C}\tilde{C}^H - A + aI\|_\infty \tag{4.4}$$

ならば，$A \succ 0$ である．また，

$$a - \|\tilde{C}\tilde{C}^H - A + aI\|_\infty > 0$$

は A の最小固有値の下界を与える．

証明: $\boldsymbol{x}^H\boldsymbol{x} = 1$ となる任意の $\boldsymbol{x} \in \mathbb{C}^n$ に対し，Hermite 行列 $\tilde{C}\tilde{C}^H - A + aI$ の 2 次形式の絶対値は最大値ノルムで上から押さえられる（式 (4.3), (5.3)）．よって，

$$|\boldsymbol{x}^H(\tilde{C}\tilde{C}^H - A + aI)\boldsymbol{x}| \le \|\tilde{C}\tilde{C}^H - A + aI\|_\infty.$$

ここで $\tilde{C}\tilde{C}^H \succeq 0$ を用いて[†4]，

$$\boldsymbol{x}^H(A - aI)\boldsymbol{x} \ge -\|\tilde{C}\tilde{C}^H - A + aI\|_\infty,$$

†4 実際の計算では近似 Cholesky 分解による $\tilde{C}$ の正則性を前提に計算を行いますので $\tilde{C}\tilde{C}^H \succ 0$ です．

すなわち

$$\boldsymbol{x}^H A\boldsymbol{x} \geq a - \|\tilde{C}\tilde{C}^H - A + aI\|_\infty$$

となり，条件 (4.4) より結論を得る．□

また，文献 [11] では，定理 4.1 の Cholesky 分解の過程で発生する誤差を IEEE 標準 754 規格の倍精度演算において事前に見積もることにより, 式 (4.4) での最大値ノルムの評価を回避する高速なアルゴリズムが提案されています.

5　スペクトルノルムの評価

この章では，精度保証付き数値計算の過程で必要となる行列のスペクトルノルムの厳密な上界を与える計算手法について紹介します.

5.1　一般の行列の場合

スペクトルノルムの評価では，行列の対角シフトと，シフトした行列の（半）正定値性の確認が基本となります [10, 12].

定理 5.1　$A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ に対し，$\|A\|_2$ の近似値を $\tilde{\rho} \geq 0$，その $\varepsilon > 0$ 拡大を $\rho := (1+\varepsilon)\tilde{\rho}$ とする．このとき，

$$\rho^2 I - A^H A \succeq 0 \tag{5.1}$$

ならば，$\|A\|_2 \leq \rho$ が成立する．

証明:　式 (5.1) より，$\boldsymbol{x}^H\boldsymbol{x} = 1$ となる任意の $\boldsymbol{x} \in \mathbb{C}^n$ に対し，

$$\boldsymbol{x}^H(\rho^2 I - A^H A)\boldsymbol{x} = \rho^2 - \boldsymbol{x}^H A^H A\boldsymbol{x} \geq 0.$$

また，$A^H A \succeq 0$ より，その 2 次形式は非負であることから，

$$\|A\|_2 = \max_{\boldsymbol{x}^H\boldsymbol{x}=1} \|A\boldsymbol{x}\|_2 = \max_{\boldsymbol{x}^H\boldsymbol{x}=1} \sqrt{\boldsymbol{x}^H A^H A\boldsymbol{x}} \leq \rho$$

が導かれる．□

拡大パラメータ $\varepsilon > 0$ は，どのくらいシャープにノルムの上界を評価したいかに応じて調整します．近似値 $\tilde{\rho}$ は，$A^H A \succeq 0$ の最大固有値の近似計算ですので，冪乗法などで求めることができます.

5.2　Hermite 行列の場合

一般の行列の場合，$A^H A$ の計算が必要になります．Hermite 行列の場合は，半正定値性判定 2 回に置き換えることができます.

定理 5.2　$A = A^H \in \mathbb{C}^{n\times n}$ に対し，$\|A\|_2$ の近似値を $\tilde{\rho}$，その $\varepsilon > 0$ 拡大を $\rho := (1+\varepsilon)\tilde{\rho}$ とする．このとき，

$$\rho I - A \succeq 0 \quad \text{かつ} \quad \rho I + A \succeq 0 \tag{5.2}$$

ならば，$\|A\|_2 \leq \rho$ が成立する．

証明:　式 (5.2) より，$\boldsymbol{x}^H\boldsymbol{x} = 1$ となる任意の $\boldsymbol{x} \in \mathbb{C}^n$ に対し，

$$\rho \geq \boldsymbol{x}^H A\boldsymbol{x}, \qquad \rho \geq -\boldsymbol{x}^H A\boldsymbol{x},$$

すなわち，$|\boldsymbol{x}^H A\boldsymbol{x}| \leq \rho$ を得る．よって，$A = A^H$ の場合，

$$\|A\|_2 = \max_{\boldsymbol{x}^H\boldsymbol{x}=1} |\boldsymbol{x}^H A\boldsymbol{x}| \tag{5.3}$$

となることから [2, 定理 6.4]，結論が導かれる．□

5.3　スペクトルノルムの下界

スペクトルノルムの下界は，$\boldsymbol{0} \neq \forall\boldsymbol{x} \in \mathbb{C}^n$ に対して

$$\|A\boldsymbol{x}\|_2/\|\boldsymbol{x}\|_2 \leq \|A\|_2$$

となることから，冪乗法的な反復により，比較的容易に算定可能です.

5.4　$\|D^{\frac{H}{2}}G^{-1}D^{\frac{1}{2}}\|_2$ の評価

この節では，第 2 回の定理 5.1 で必要となるスペクトルノルムの評価

$$\rho := \|D^{\frac{H}{2}}G^{-1}D^{\frac{1}{2}}\|_2 \tag{5.4}$$

を考えます（ρ は定理 5.1 と同じ記号を用います)．ここで，$G \in \mathbb{C}^{n\times n}$ は正則行列，$D^{\frac{1}{2}}$ と $D^{\frac{H}{2}}$ は Hermite 正定値行列 $D \in \mathbb{C}^{n\times n}$ の Cholesky 分解: $D = D^{\frac{1}{2}}D^{\frac{H}{2}}$ から得られる下三角行列です．$D^{\frac{1}{2}}$ は第 2 回の定理 5.1 の L_1 に対応します．以降,

$\lambda_{\max}(A)$, $\lambda_{\min}(A)$ をそれぞれ A の固有値の絶対値最大および絶対値最小，また，$\sigma_{\max}(A)$, $\sigma_{\min}(A)$ をそれぞれ A の最大および最小特異値とします．

◆ G が一般の行列の場合

G が一般の行列の場合，直接 D を区間 Cholesky 分解[†5]し，右辺ベクトルを行列に拡張した連立 1 次方程式 $G^{-1}D^{\frac{1}{2}}$ を精度保証付きで求め，区間行列積と定理 5.1 を適用する方法が考えられます．ただし，行列の次元が大きくなると，得られる $D^{\frac{1}{2}}$ の区間幅やメモリ・計算量が増大します．また，右辺項が行列となる連立 1 次方程式を精度保証付きで解く必要がありますので，大規模な問題に対しては限界があります．

◆ G が Hermite 行列の場合

いくつか条件が必要なものの，G と D の行列構造を保持できる次の定理が効果的です [12].

定理 5.3 $G = G^H$ とする．一般化固有値問題 $G\boldsymbol{x} = \lambda D\boldsymbol{x}$ の近似最小固有値 $\tilde{a}$ が正であり，その $\varepsilon > 0$ 縮小を $a := (1-\varepsilon)\tilde{a}$ とする．このとき，

$$G - aD \succeq 0 \tag{5.5}$$

であれば，$\rho \le a^{-1}$ が成立する．

証明: $G = G^H$ と一般に AB と BA の固有値は同じであること [2, 5 章]，$\lambda_{\max}(A^2) = \lambda_{\max}(A)^2$，および $\lambda_{\max}(A) = 1/\lambda_{\min}(A^{-1})$ を用いて，

$$\begin{aligned}\rho^2 &= \lambda_{\max}(D^{\frac{H}{2}}G^{-1}D^{\frac{1}{2}} \cdot D^{\frac{H}{2}}G^{-1}D^{\frac{1}{2}})\\ &= \lambda_{\max}(G^{-1}D)^2,\end{aligned}$$

よって，

$$\begin{aligned}\rho^{-1} &= \lambda_{\min}(D^{-1}G) \qquad (5.6)\\ &= \min\{|\lambda| \mid G\boldsymbol{x} = \lambda D\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{0} \ne \boldsymbol{x} \in \mathbb{C}^n\}\end{aligned}$$

を得る．ここで，$\rho > a^{-1}$ と仮定すれば，$\boldsymbol{x}^H\boldsymbol{x} = 1$ となる $\boldsymbol{x} \in \mathbb{C}^n$ に対して，条件 (5.5) と $D \succ 0$ より，

$$\begin{aligned}&\boldsymbol{x}^H(G + \rho^{-1}D)\boldsymbol{x} \ge \boldsymbol{x}^H(G - \rho^{-1}D)\boldsymbol{x}\\ &= \boldsymbol{x}^H(G - aD)\boldsymbol{x} + \boldsymbol{x}^H(a - \rho^{-1})D\boldsymbol{x} > 0\end{aligned}$$

となり，ρ^{-1} および $-\rho^{-1}$ は $G\boldsymbol{x} = \lambda D\boldsymbol{x}$ の固有値ではないことになり，矛盾する．よって $\rho \le a^{-1}$ が成立する．□

定理 5.3 は，一般化固有値問題 $G\boldsymbol{x} = \lambda D\boldsymbol{x}$ の実固有値が正であることが条件になり，式 (5.5) でその条件が確認されます．固有値が正でないときには，次の定理に切り替えます．

定理 5.4 $G = G^H$ とする．一般化固有値問題 $G^2\boldsymbol{x} = \lambda D^2\boldsymbol{x}$ の近似最小固有値 $\tilde{a}$ が正であり，その $\varepsilon > 0$ 縮小を $a := (1-\varepsilon)\tilde{a}$ とする．このとき，

$$G^2 - aD^2 \succeq 0 \tag{5.7}$$

であれば，$\rho \le 1/\sqrt{a}$ が成立する．

証明: 式 (5.6)，$\lambda_{\min}(A) \ge \sigma_{\min}(A)$[†6]，および AB と BA の固有値が同じであることより，

$$\begin{aligned}\rho^{-2} &= \lambda_{\min}(D^{-1}G)^2 \ge \sigma_{\min}(D^{-1}G)^2\\ &= \lambda_{\min}((D^{-1}G)^H D^{-1}G)\\ &= \lambda_{\min}(D^{-2}G^2),\end{aligned}$$

よって定理 5.3 より結論を得る．□

5.5 $\|D^{\frac{H}{2}}G^{-1}L^{\frac{1}{2}}\|_2$ の評価

前節に続いて，第 2 回の定理 6.2 で必要となるスペクトルノルムの評価

$$\hat{\rho} := \|D^{\frac{H}{2}}G^{-1}L^{\frac{1}{2}}\|_2 \tag{5.8}$$

を考えます．$G, D^{\frac{H}{2}}$ は 5.4 節と同じ行列，$L^{\frac{1}{2}}$ は Hermite 正定値行列 L の Cholesky 分解: $L =$

†5 正定値行列に対しては, 通常の Cholesky 分解アルゴリズムを区間変数に拡張することで破綻なく実行可能（feasible）であることが知られています．

†6 スペクトル半径とスペクトルノルムの関係 $\lambda_{\max}(A) \le \sigma_{\max}(A)$[2, 定理 4.4] を固有値問題 $A^{-1}\boldsymbol{x} = \frac{1}{\lambda}\boldsymbol{x}$ に対して適用します．Hermite 行列ならば等号が成立します．

$L^{\frac{1}{2}}L^{\frac{H}{2}}$ から得られる下三角行列です．L は第 2 回の定理 6.2 の L_2 に対応します．

◆ G が一般の行列の場合

$G \in \mathbb{C}^{n\times n}$ が一般の行列の場合，前章と同様，区間 Cholesky 分解を用いた評価が可能です．注意点も同じです．

◆ G が Hermite 行列の場合

いくつか条件が必要なものの，G, D, L の行列構造を（ある程度）保持できる次の定理が効果的です [12].

定理 5.5 $G = G^H$ とする．一般化固有値問題 $G^2\boldsymbol{x} = \lambda D\boldsymbol{x}$ の近似最小固有値 $\tilde{a}$ が正であり，その $\varepsilon > 0$ 縮小を $a := (1-\varepsilon)\tilde{a}$ とする．このとき，

$$G^2 - aD \succeq 0 \tag{5.9}$$

であれば，

$$\hat{\rho} \le \sqrt{\frac{\|L\|_2}{a}} \tag{5.10}$$

が成立する．

証明:

$$\begin{aligned}\hat{\rho}^2 &= \lambda_{\max}(L^{\frac{H}{2}}G^{-1}D^{\frac{1}{2}} \cdot D^{\frac{H}{2}}G^{-1}L^{\frac{1}{2}})\\ &= \lambda_{\max}(LG^{-1}DG^{-1})\end{aligned}$$

より，$\lambda_{\max}(A) = 1/\lambda_{\min}(A^{-1})$ および $\lambda_{\min}(A) \ge \sigma_{\min}(A)$ を用いて，

$$\begin{aligned}\hat{\rho}^{-2} &= \lambda_{\min}(GD^{-1}GL^{-1}) \ge \sigma_{\min}(GD^{-1}GL^{-1})\\ &\ge \sigma_{\min}(GD^{-1}G)\sigma_{\min}(L^{-1})\\ &= \frac{\lambda_{\min}(GD^{-1}G)}{\|L\|_2} = \frac{\lambda_{\min}(D^{-1}G^2)}{\|L\|_2}\end{aligned}$$

を得る．以下の議論は定理 5.3 と同様．□

定理 5.5 の評価では，$\|L\|_2$ を括り出して評価していますので，問題によっては過大評価になる可能性があることに注意してください．

6 おわりに

最終回では，区間演算の概念と，第 2 回および第 3 回で必要な有限次元問題の精度保証について説明しました．

この先に待ち構えている「具体的な精度保証付き数値計算の実装方法」や，「実際にどのような問題に精度保証付き数値計算が適用可能なのか？」などについては，文献 [13] を参照していただければ幸いです†7.

最後に，チュートリアル執筆の機会を与えていただきました「応用数理」編集委員会の皆様，特に，東京女子大学の荻田 武史 様に感謝いたします．また，毎回，達意の文章の「逆」な草稿に辛抱強く目を通し，的確なアドバイスをいただいた九州大学マス・フォア・インダストリ研究所の長藤 かおり 様にも併せてお礼申し上げます．

参 考 文 献

[1] G.H. Golub, and C.F. Van Loan: *Matrix Computations*, 3rd edition, The Johns Hopkins University Press, 1996.
[2] 山本 哲朗: 行列解析の基礎− Advanced 線形代数−, サイエンス社, 2010.
[3] T. Sunaga: Theory of an interval algebra and its application to numerical analysis, *Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics*, vol. 26, no. 2-3, pp. 125–143, October, 2009. (RAAG Memoirs, 2, pp. 29-46, 1958 の再印刷)
[4] S.M. Rump: "Verification methods: Rigorous results using floating-point arithmetic," *Acta Numerica*, vol. 19, pp. 287–449, May, 2010.
[5] R.E. Moore, R.B. Kearfott, and M.J. Cloud: *Introduction to Interval Analysis*, Society for Industrial and Applied Mathematics, 2009.
[6] 大石 進一: 精度保証付き数値計算, コロナ社, 2000.
[7] 杉原 正顯, 室田 一雄: 数値計算法の数理, 岩波書店, 1994.
[8] 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—, 日本評論社, 1998.
[9] T. Ogita, and S. Oishi: "Fast verified solutions of linear systems," *Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics*, vol. 26, no. 2-3, pp. 169–190, October, 2009.
[10] S.M. Rump: "Verification methods for dense and sparse systems of equations," in *Topics in Validated Computations*, ed. J. Herzberger, pp. 63–135, Elsevier Science, North-Holland, Amsterdam, 1994.

†7 この連載と出版時期が連動しているように見えるのは，たっ，単なる偶然です．

[11] S.M. Rump: "Verification of positive definiteness," *BIT Numerical Mathematics*, vol. 46, no. 2, pp. 433–452, June, 2006.
[12] S.M. Rump: "Verified bounds for singular values, in particular for the spectral norm of a matrix and its inverse," *BIT Numerical Mathematics*, vol. 51, no. 2, pp. 367–384, June, 2011.
[13] 中尾 充宏, 渡部 善隆: 実例で学ぶ精度保証付き数値計算, サイエンス社,（ 2011 秋〜刊行予定）