一般化固有値問題の精度保証付きプログラム

A Verification Program for Generalized Eigenvalue Problems

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でテスト公開中の実対称行列の正定値判定プログラム`vpdsm`(cf.[18]) の応用として，一般化固有値問題に対する固有値の絶対値最大の上限を精度保証付きで求めるプログラム `vpgep` を VPP700/56 上でテスト公開します．`vpgep` による計算結果は区間演算による丸め誤差の考慮を行なっているため，出力される値は数学的に厳密な意味で固有値の絶対値最大の上限となります．

本プログラムは，平成 6 年度後期〜平成 9 年度前期のプログラムライブラリ開発課題『精度保証付き数値計算システム』によって得られた成果の一部です．

1　プログラムの概要

この章では `vpgep` の概要を説明します．なお，対象とする行列はすべて正方行列とします．

1.1　一般化固有値問題

以下の問題を考えます:

問題

$n \times n$ の実対称行列 A と $n \times n$ の実対称正定値行列 B に対し

$$\sup_{0 \neq x \in \mathbb{R}^n} \left| \frac{x^T A x}{x^T B x} \right| \tag{1}$$

の上限を数値的に厳密に評価せよ．

ここで $\mathbb{R}^n$ は n 次元 Euclid 空間，“T” は転置記号とします[1]．

(1) は次の**一般化固有値問題** (*generalized eigenvalue problem*) に対する λ の絶対値最大を評価する問題と考えることもできます:

一般化固有値問題

$n \times n$ の実対称行列 A と $n \times n$ の実対称正定値行列 B に対し

$$Ax = \lambda B x \tag{2}$$

を満たすような $\lambda \in \mathbb{R}$, $0 \neq x \in \mathbb{R}^n$ を求めよ．

ただし $\mathbb{R} \equiv \mathbb{R}^1$ とします． (1) と (2) の同値性の証明は7章の Lemma 3を参照してください．

(2) を満たすスカラー λ を**固有値** (*eigenvalue*)，特に絶対値最大の固有値を**優越固有値**と呼びます．また，固有値に対応するベクトル x を**固有ベクトル** (*eigenvector*) と呼びます．

3.2節の Lemma 1より， (2) は実対称行列に対する固有値問題として考えることができます．従って固有値はすべて実数となります (cf.[18]7 章・性質 2)．

一般化固有値問題 (2) 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ます (例えば [3], [10], [13], [16] を参照)．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して与えられます．そしてそれらの行列に対する優越固有値を数値的に厳密に見積もることにより，離散化にともなう打ち切り誤差の定量的評価が可能になるなどの応用例も報告されています (例えば [20])．

従って本稿では一般化固有値問題 (2) を， A が対称行列， B が対称かつ正定値行列に限定します．

`vpgep` の具体的な適用例は 6章で紹介します．

1.2　優越固有値の評価プログラム

`vpgep` は利用者が用意した実対称行列データまたは対称行列を含む区間データ読み込み， (1) の上限，すなわち一般化固有値問題 (2) の優越固有値の絶対値の上限を厳密に与えます．

`vpgep` は内部で実対称行列の正定値性判定プログラム `vpdsm` を呼び出します．利用者は， 2 つのパラメータを調節することによって優越固有値の絶対値の上限をより “シャープ” にすることも可能です．

以降 2章で `vpgep` の利用方法を説明します． 3章ではこれまでに提案された (1) の評価方法を簡単に紹介し，その中の手法の一つである Rump の方法の改良版として得られた `vpgep` のアルゴリズムを 4章で説明します．さらに数値例・応用例を 5 章と 6 章で，最後に補足事項と一般化固有値問題の数値解法の紹介を 7 章で述べます．

[†]九州大学大型計算機センター
e-mail:watanabe@cc.kyushu-u.ac.jp
[‡]九州大学大学院数理学研究科
e-mail:{yamamoto, mtnakao}@math.kyushu-u.ac.jp

[1]転置記号は “${}^tA$”，“A^t” なども使われますが，本稿では “A^T” に統一します．

2　利用方法

この章ではvpgepの利用方法を説明します.

2.1　動作環境

vpgep (/usr/local/bin/vpgep) はVPP700/56 (ホスト名kyu-vpp, IPアドレス133.5.9.70) の1PEで動作します．作成言語はFortran 90です.

利用者は5種類の形式のどれかを選択し，対応する行列データを用意します．データはkyu-vppのエディタであるemacsまたはviで作成するか ftp(/bin/ftp) などでkyu-vppに転送します.

ただし，汎用計算機のUNIXシステム (kyu-cc) からの vpgepの利用はできません.

2.2　入力形式

vpgepの入力形式は

vpgep ␣*size*␣*type*␣*delta1*␣*delta2*␣*file1*␣*file2*

です．それぞれ空白で区切ります．順序の入れ換えはできません.

各パラメータ，ファイル名の内容は次の通りです.

size	行列の次数 (整数)
type	行列の種類 (1 ～ 5 の整数)
	1 ··· 整数または実数データ
	2 ··· 区間データ
	3 ··· 有理数データ
	4 ··· バイナリデータ
	5 ··· バイナリ区間データ
delta1	パラメータ δ_1 ($0 < \delta_1 \ll 1$ の実数)
delta2	パラメータ δ_2 ($0 < \delta_2 \ll 1$ の実数)
file1	行列 A のデータを格納したファイル名
file2	行列 B のデータを格納したファイル名

*size*は行列のサイズ (次数) を指定します．例えば20×20の場合は20です．整数以外の値 (例えば20.0) を指定すると，読み込み時にエラーとなります．また，行列サイズと*file1*, *file2*のデータとの整合性がとれていない場合にもエラーとなるか誤った結果を返すため注意が必要です.

*type*は入力する行列の種類を整数で指定します．整数以外の値を指定すると読み込み時にエラーとなります．1 ～ 5以外の整数を指定した場合は1が指定されたものとして処理が続行されます.

*delta1*は4章で紹介する微小な値δを入力します．例えば$\delta = 10^{-2}$の場合，0.01，1.0E-2, 1.0D-2などと指定します.

*delta2*は vpgep内で行列の正定値性を判定する際に用いる微小な値です．vpdsm([18]) で指定するパラメータδと同じです． *delta1*, *delta2*は行列の性格 (条件数, サイズなど)，およびどれくらい優越固有値の評価を精度よく求めたいかに応じて適宜使い分けてください.

file1, *file2*はそれぞれ行列A, Bのデータの格納されたファイル名です．形式は*type*で指定した行列の種類に応じて異なります．入力データの形式はそれぞれ[18]の2.5節に従って作成します.

2.3　対話型での利用

vpgepのあと，一つ以上のスペースをおいてパラメータとファイル名を入力します.

以下は次元数10の有理数データ，$\delta_1 = 10^{-1}$，$\delta_2 = 10^{-2}$，ファイル名が“a.data”, “b.data” の例です:

```
kyu-vpp% vpgep 10 3 0.1 0.01 a.data b.data ↵
```

処理結果は標準出力に書き出されます．結果をファイルに落とすにはリダイレクション “>” を用います．以下はファイル “out” への出力例です:

```
kyu-vpp% vpgep 10 3 0.1 0.01 \ ↵ ⟵ 継続
? a.data b.data > out ↵
```

処理結果の見方は2.5節を参照してください.

2.4　バッチ処理での利用

行列のサイズが大きい場合はバッチ処理をお勧めします．利用方法は vpdsmと同様です．ここでは基本的な手順を紹介します.

まず「バッチリクエスト」と呼ばれるシェルスクリプトをkyu-vppのファイルとして作成します．例ではファイル名を “a.sh” とします．ファイル a.shには，kyu-vppのホームディレクトリから行列データのあるディレクトリへの移動 (cdコマンド) に続けて対話型の処理手順を記述します.

```
#                                   ⟵ cshで記述
cd EXAMPLE                          ⟵ ディレクトリの移動
vpgep 100 3 0.01 0.001 a.data b.data
```

次元数100の有理数データ，$\delta_1 = 10^{-2}, \delta_2 = 10^{-3}$，ファイルは EXAMPLEディレクトリの a.data, b.data としたバッチリクエストの記述例です.

次にqsub(/bin/qsub) コマンドでバッチリクエストを投入します.

```
kyu-vpp% qsub a.sh ↵
Request 42740.kyu-vpp submitted to queue: p1.
```

ジョブの処理状況は qps(/usr/local/bin/qps) コマンドで確認できます.

例では，処理結果はジョブを投入したディレクトリに “a.sh.o42740” および “a.sh.e42740” というファイル名で返却されます．返却されるファイルの名前はバッチリクエストファイル名と qsub コマンドを入力した際に自動的に発行される 5 桁の識別番号で構成されます．

“o” がつくファイルに vpgep の処理結果が，“e” がつくファイルにエラーが起きた場合のメッセージがそれぞれ出力されます．

2.5 処理結果の見方

2.5.1 上限が得られた場合

vpgep によって優越固有値の上限が求まった場合は，以下のメッセージと上限が出力されます:

```
UPPER BOUND OF THE ABSOLUTE MAXIMUM EIGENVALUE
IS RIGOROUSLY:
 1.492353232543013
```

一度上限が求まった場合は，δ_1 を更に小さくすることでよりシャープな上限を得ることができます．ただし，アルゴリズムの判定条件を満たさなくなる可能性も高くなります．

2.5.2 上限が求まらなかった場合

vpgep は 4章で紹介する一般化 Rump 法のアルゴリズムで優越固有値の絶対値の上限を求めます．その際，実対称行列の正定値性判定プログラム vpdsm を内部で 2 度呼び出します．vpdsm が正定値性判定に失敗した場合のメッセージと対処方法は [18] に従ってください．また，

- 近似最小固有値が負であるというメッセージが出力された場合は δ_1 を大きめに設定してみる
- 近似 Cholesky 分解に失敗した場合および最後の検証条件を満たさなかった場合は δ_2 を大きめに設定してみる

ことで検証が成功することがあります．一般に δ_1 を大きくとれば正定値性が強くなり上限を得ることができます．しかし，最大固有値の絶対値により近い値を得るためにはできるだけ δ_1 を小さくする必要があります．

2.5.3 エラーメッセージ

“jwe” で始まるメッセージが標準エラー出力に書き出されている場合は，Fortran 90/VP が何らかのエラーを検出しています．入出力に関するメッセージの場合，入力パラメータと行列データとの整合性がとれていないことが考えられます．

その他，指数アンダーフローやオーバーフローを起こして実行が打ち切られた旨のメッセージが書き出されている場合は，対象とする行列が vpgep が扱える実数の範囲を超えている可能性が高くなります．

3 従来の手法の紹介

この章では (1) の評価を厳密に行なうための vpgep 以外の解法を紹介し，その特徴・問題点を述べます．

[18] でも触れたように，5 次以上の固有値問題を一定回数の操作で完全に解くことは不可能です．従って何らかの不等式評価が必要になります．

3.1 区間演算

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は，実数を下限と上限による区間で表現し，すべての演算を区間に対する演算で置き換えます．この計算法を**区間演算** (*interval arithmetic*) と呼びます．区間演算の概要は [18] の 4 章を御覧ください．

以下，アルゴリズム中の用語 “*rigorously*” は区間演算による丸め誤差を考慮した厳密な計算を，また “*approximately*” は浮動小数点演算などによる近似計算を意味します．

3.2 標準固有値問題への変形

一般化固有値問題 (2) は正定値対称行列 B を Cholesky 分解することによって標準固有値問題に変形することができます．(1) の評価は，問題を標準固有値問題に帰着させるか，それとも一般化固有値問題の形を生かした手法を用いるのかで分けることができます．

標準固有値問題への変形は次の Lemma を用います:

Lemma 1 $n \times n$ の実対称行列 A と $n \times n$ の実対称正定値行列 B に対し，一般化固有値問題:

$$Ax = \lambda Bx$$

は B を $B = CC^T$ と Cholesky 分解した時の標準固有値問題:

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

と同値．ただし $C^{-T} \equiv (C^{-1})^T$．

[理由] B は正定値対称行列であるため，正則な下三角行列 C により $B = CC^T$ と Cholesky 分解可能です (証明は例えば [4] を参照)．ここで，$Ax = \lambda Bx$ の両辺に左から C^{-1} をかけ，$x = C^{-T}y$ とおくと，

$$C^{-1}AC^{-T}y = \lambda C^{-1}\underbrace{CC^T}_{B}C^{-T}y = \lambda y$$

を得ます．□[2]

3.3 標準固有値問題に対する解法

この節では，標準固有値問題に対する優越固有値を評価する手法を 2 つ紹介します．

[2] “□” は説明，証明の終りの記号の意味で用います．

なお A, B は各要素が区間となる行列に拡張して考えます．従って，アルゴリズムは A に含まれる実対称行列と B に含まれる実対称正定値行列すべてに対する評価になります．

3.3.1 近似対角化法

近似対角化法 (*approximate diagonalization method*) ([20]) は，一般化固有値問題を標準固有値問題に変形したのち近似的な対角化を行い，行列ノルムの定義から優越固有値を評価します．

Algorithm(近似対角化法)

1. Cholesky 分解 $B = CC^T$ を行う． *rigorously*
2. $E \equiv C^{-1}AC^{-T}$ を計算． *rigorously*
3. E の正規化された固有ベクトルを計算し，固有ベクトルを並べた近似対角化行列 $\tilde{T}$ を計算． *approximately*
4. $D \equiv \tilde{T}^T E\tilde{T}$, $\lambda_1 \equiv \max_{1\le i\le n} \sum_{j=1}^{n} |D_{ij}|$ を計算． *rigorously*
5. $I \equiv (\tilde{T}\tilde{T}^T)^{-1}$, $\lambda_2 \equiv \max_{1\le i\le n} \sum_{j=1}^{n} |I_{ij}|$ を計算． *rigorously*
6. $\lambda_1\lambda_2$ が (1) の上限を与える． *rigorously*

●アルゴリズムに関する注釈

- 行列のうち "C" のようににチルダが付いていない行列は，各要素が区間であるような行列 (区間行列) です．また，"$\tilde{T}$" のようにチルダ付きのものは，浮動小数点演算などの近似計算により得られた行列を表します．スカラー量 (例えば λ_1 や後ほど登場する $\tilde{\beta}$) についても同様です．
- Cholesky 分解は区間演算で行ないます．従って，"$B = CC^T$" は，"正定値対称行列 B が CC^T に包含されるような区間行列 C を定める" という意味です．
- 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[3]をとった行列を用います．
- 近似的な固有値，固有ベクトルの計算は既知の数値計算方法 (cf.7.2節) を用います．
- 固有値の絶対値最大は区間の積 $\lambda_1\lambda_2$ の上限によって上から評価されます．

◇アルゴリズムの説明

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 とします．Lemma 1より C に含まれる正則な下三角行列 C_0 が存在し $B_0 = C_0C_0^T$ と書けます．よって $y = C_0^T x$ とおけば，

$$\sup_{0\ne x\in\mathbb{R}^n}\left|\frac{x^TA_0x}{x^TB_0x}\right| = \sup_{0\ne y\in\mathbb{R}^n}\left|\frac{y^TC_0^{-1}A_0C_0^{-T}y}{y^Ty}\right|$$

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

$$\sup_{0\ne y\in\mathbb{R}^n}\left|\frac{y^TE_0y}{y^Ty}\right| = \sup_{0\ne z\in\mathbb{R}^n}\left|\frac{z^T\tilde{T}^TE_0\tilde{T}z}{z^T\tilde{T}^T\tilde{T}z}\right|,$$

となります．さらに $\xi = \tilde{T}z$ とおき，正規化を行なうことで，

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

を得ます．ここで，行列 $\tilde{T}^TE_0\tilde{T}$, $(\tilde{T}\tilde{T}^T)^{-1}$ が対称であることより，2 次形式の絶対値は行列の 2 ノルム[4]即ちスペクトル半径で上から評価されます (例えば [17] を参照)．よって，

$$\sup_{0\ne x\in\mathbb{R}^n}\left|\frac{x^TA_0x}{x^TB_0x}\right| \le \|\tilde{T}^TE_0\tilde{T}\|_2\ \|(\tilde{T}\tilde{T}^T)^{-1}\|_2.$$

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[5]で与えられます (例えば [5] を参照)．従って，任意の $A_0 \in A$, $B_0 \in B$ に対して決まる l_∞ ノルムがアルゴリズムの 4, 5 で評価される λ_1, λ_2 で押えられることから結論を得ます．□

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 (D) と単位行列であることが期待される行列 (I) の優越固有値の評価に帰着する手法です[6]．

近似対角化法の問題点として，区間演算での Cholesky 分解が一般化固有値問題であることを意識した手法に比べて計算コスト的に不利であること，また，行列の対角成分が非対角成分に比べて小さい場合は区間 Cholesky 分解が破綻することがあげられます[7]．

3.3.2 Rump の方法

Rump の方法 (Rump's method)([15]) も近似対角化法と同じく一般化固有値問題を標準固有値問題に直します．それから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限であることを判定します．

[3] 区間 $X = [\underline{x}, \overline{x}]$ に対し $(\underline{x}+\overline{x})/2$ を近似的に求め中点とします．

[4] $\|A\|_2 \equiv \sup_{x^Tx=1} \|Ax\|$, ただし $\|\cdot\|$ はユークリッドノルム．

[5] $\|A\|_\infty \equiv \max_{1\le i\le n}\sum_{j=1}^{n}|A_{ij}|$

[6] 無限桁を持つ理想的な計算機を用いると，真に一致します．また直接 Gerschgorin の定理を適用してしまうと，優越固有値はとんでもなく過大な評価になります．

[7] 区間 Cholesky 分解が失敗する理由は，区間演算を繰り返すうちに区間幅が拡大し，区間内に 0 を含むようになり，除算が不可能になるからです．

Algorithm(Rump の方法)

1. Cholesky 分解 $B = CC^T$ を行う. *rigorously*
2. $E \equiv C^{-1}AC^{-T}$ を計算. *rigorously*
3. E の固有値の絶対値最大 $\tilde{\beta}$ を近似計算. *approximately*
4. ある微小な数 $0 < \delta \ll 1$ により $\beta = (1+\delta)\tilde{\beta}$ とする. *rigorously*
5. $X_1 \equiv -E + \beta I$, $X_2 \equiv E + \beta I$ を計算. *rigorously*
6. Cholesky 分解 $X_i \approx \tilde{C}_i\tilde{C}_i^T (i = 1, 2)$ を計算. *approximately*
7. $Y_i \equiv \tilde{C}_i\tilde{C}_i^T - X_i$, $\lambda_i \equiv \max_{1\le i\le n} \sum_{j=1}^{n} |(Y_i)_{ij}|$ $(i = 1, 2)$ を計算. *rigorously*
8. $\beta + \max\{\lambda_1, \lambda_2\}$ が (1) の上限を与える. *rigorously*

ここでは I を $n \times n$ の実単位行列とします.

◇アルゴリズムの説明

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 が存在します. ここで対称行列の 2 次形式の絶対値が行列の 2 ノルムで押えられること, また行列の 2 ノルムがさらに行列の l_∞ ノルムで押えられること, さらに 5, 6, 7 の計算方法より, $x^Tx = 1$ なる $x \in \mathbb{R}^n$ に対し,

$$\left|x^T(\tilde{C}_1\tilde{C}_1^T + E_0 - \beta I)x\right| \le \lambda_1,$$

$$\left|x^T(\tilde{C}_2\tilde{C}_2^T - E_0 - \beta I)x\right| \le \lambda_2$$

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

$$\begin{aligned}\lambda_1 &\ge x^T(\tilde{C}_1\tilde{C}_1^T + E_0 - \beta I)x \\ &= x^T(\tilde{C}_1\tilde{C}_1^T)x + x^T(E_0 - \beta I)x \\ &\ge x^TE_0x - \beta,\end{aligned}$$

および

$$\begin{aligned}\lambda_2 &\ge x^T(\tilde{C}_2\tilde{C}_2^T - E_0 - \beta I)x \\ &= x^T(\tilde{C}_2\tilde{C}_2^T)x - x^T(E_0 + \beta I)x \\ &\ge -x^TE_0x - \beta,\end{aligned}$$

従って,

$$-\beta - \lambda_2 \le x^TE_0x \le \beta + \lambda_1$$

となり,

$$\left|x^TE_0x\right| \le \beta + \max\{\lambda_1, \lambda_2\}$$

を得ます. 以上が任意の $A_0 \in A$, $B_0 \in B$ に対して成立することより, 結論が導かれます. □

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あります. 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, 標準固有値問題に適用するには優れたアルゴリズムであることが知られています. また, A が正定値の場合, アルゴリズム中の X_2 に関する手順は省略可能です.

3.3.3 その他の解法

標準固有値問題の固有値, 固有関数の厳密な誤差限界 (つまり精度保証付き数値計算法) を与える方法には [7], [8], [9], [23], [24] などがあります. これらの手法は固有値, 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るため, スペクトル半径の上限を評価する問題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ます. これらの手法は, 例えば 2 番目の固有値の誤差評価などに有効です.

3.4 一般化固有値問題に対する解法

この節では, 標準固有値問題を経由せずに直接一般化固有値問題の優越固有値を評価する手法の特徴と問題点について説明します.

3.5 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す. 近似対角化行列は近似的に求めるだけでよい点に着目し区間 Cholesky 分解を近似計算に置き換えます.

Algorithm(改良近似対角化法)

1. Cholesky 分解 $B \approx \tilde{C}\tilde{C}^T$ を行う. *approximately*
2. $\tilde{C}^{-1}A\tilde{C}^{-T}$ を計算. *approximately*
3. $\tilde{C}^{-1}A\tilde{C}^{-T}$ の正規化された固有ベクトルを計算し, 固有ベクトルを並べた近似対角化行列 $\tilde{T}$ を計算. *approximately*
4. $\tilde{P} \equiv \tilde{T}^T\tilde{C}^{-1}$ を計算. *approximately*
5. $D \equiv \tilde{P}A\tilde{P}^T$, $\lambda_1 \equiv \max_{1\le i\le n} \sum_{j=1}^{n} |D_{ij}|$ を計算. *rigorously*
6. $I \equiv (\tilde{P}B\tilde{P}^T)^{-1}$, $\lambda_2 \equiv \max_{1\le i\le n} \sum_{j=1}^{n} |I_{ij}|$ を計算. *rigorously*
7. $\lambda_1\lambda_2$ が (1) の上限を与える. *rigorously*

◇アルゴリズムの説明

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 とします. $z = \tilde{P}^{-T}x$ とすれば,

$$\sup_{0\ne x\in\mathbb{R}^n}\left|\frac{x^TAx}{x^TBx}\right| = \sup_{0\ne z\in\mathbb{R}^n}\left|\frac{z^T\tilde{P}A\tilde{P}^Tz}{z^T\tilde{P}B\tilde{P}^Tz}\right|$$

となります. あとは近似対角化法と同様です. □

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す. 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区間 Cholesky 分解をする必要がなく, 従ってそれらの方法に比べて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す.

またvpgepのアルゴリズムである一般化Rump法(後述)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ります．しかし，アルゴリズム6の逆行列の区間計算に多くのコストが必要なことからライブラリとして採用しませんでした．

3.6 その他の手法

標準固有値問題に変形することなく固有値，固有関数の精度保証付き計算を与える方法には [1], [2], [14] などがあります．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証明する手法であるため，優越固有値の評価を効率良く行なう手法とはいえません．

4 vpgep のアルゴリズム

この章では vpgepに用いた**一般化 Rump 法** ([21]) (*generalized Rump's method*) のアルゴリズムを述べます．

4.1 一般化 Rump 法

一般化Rump法は， 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す．これまでの手法と同様に，アルゴリズムの A, B は各要素が区間となる行列に拡張して考えます．従って A に含まれる実対称行列と B に含まれる実対称正定値行列すべてに対する固有値の絶対値最大の評価になります．

Algorithm(一般化 Rump 法)

1. (1) の近似 $\tilde{\beta}$ を計算． *approximately*
2. ある微小な数 $0 < \delta \ll 1$ により $\beta = (1+\delta)\tilde{\beta}$ とする． *rigorously*
3. $X_1 \equiv -A + \beta B$, $X_2 \equiv A + \beta B$ を計算． *rigorously*
4. X_1, X_2 に含まれるすべての対称行列が正定値であれば β が (1) の上限を与える．

X_1, X_2 の正定値判定は [18]・5章のアルゴリズムを用います． (1) の近似 $\tilde{\beta}$ の計算は7.2節の適当な数値解法で求めます．

◇アルゴリズムの説明

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 とします． $-A_0+\beta B_0$, $A_0+\beta B_0$ は対称行列であるので，仮定と正定値性の定義より，$x^Tx = 1$ なる x に対し，

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

即ち

$$-\beta x^T B_0 x < x^T A_0 x < \beta x^T B_0 x$$

が成立します．ここで B_0 は正定値であるので $x^T B_0 x > 0$ です．従って，両辺を $x^T B_0 x$ で割り sup を取ると，

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

が成立します．以上が任意の $A_0 \in A$, $B_0 \in B$ に対して成立することより，結論が導かれます． □

一般化Rump法の特徴は，区間Cholesky分解，区間逆行列の評価が必要ないことから，計算コストに優れていることです．ただしアルゴリズム中の δ の選択，および [18] の正定値判定プログラム`vpdsm`のパラメータの選択は慎重に選ぶ必要があります．

また， A が正定値の場合， Rumpの方法と同じようにアルゴリズム中の X_2 に関する手順は省略可能です．

5 数値例

この章ではvpgepを用いた簡単な数値例を紹介します．次の行列を考えます:

$$A = \begin{pmatrix} 10 & 2 & 3 & 1 & 1 \\ 2 & 12 & 1 & 2 & 1 \\ 3 & 1 & 11 & 1 & -1 \\ 1 & 2 & 1 & 9 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & 1 & 15 \end{pmatrix},$$

$$B = \begin{pmatrix} 12 & 1 & -1 & 2 & 1 \\ 1 & 14 & 1 & -1 & 1 \\ -1 & 1 & 16 & -1 & 1 \\ 2 & -1 & -1 & 12 & -1 \\ 1 & 1 & 1 & -1 & 11 \end{pmatrix}.$$

[19] によれば A, B に対する一般化固有値問題の優越固有値の絶対値最大は1.49235323254，また [1] によれば優越固有値は区間

$$[1.492353232542, 1.492353232544]$$

内に存在します．

$\delta_2 = 10^{-3}$ に対し， δ_1 の値で以下の評価を得ました．下線は [19] と一致した桁を示しています．

δ_1	上限値
10^{-2}	$\underline{1}.507276764868428$
10^{-6}	$\underline{1.49235}4724896230$
10^{-10}	$\underline{1.492353232}692233$
10^{-14}	$\underline{1.49235323254}3013$

次に [2] よる 10×10 の以下の行列を考えます:

$$A = \begin{pmatrix} 5 & -4 & 1 & & & & \\ -4 & 6 & -4 & 1 & & & \\ 1 & -4 & 6 & -4 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & 1 & -4 & 6 & -4 & 1 \\ & & & 1 & -4 & 6 & -4 \\ & & & & 1 & -4 & 5 \end{pmatrix},$$

$$B = \left(\frac{232792560}{i+k-1} \right)_{i,k=1,\cdots,10}.$$

優越固有値は区間

$[5.5057910226402047 \times 10^5, 5.5057910226402060 \times 10^5]$

内に存在します．行列 B は Hilbert 行列 (cf.[18]) の定数倍であり条件数は大きくなります[8].

vpgep では $\delta_1 = 0.085$, $\delta_2 = 10^{-2}$ に対し

$$5.974134703963243 \times 10^5$$

を上限として得ました.

6 適用例

この章では vpgep のアルゴリズムを具体的な問題に適用して得られた応用例を紹介します.

6.1 Stokes 方程式の誤差評価

次の同次境界条件を持つ Stokes 問題を考えます:

$$\begin{cases} -\nu \Delta u + \nabla p = f & \text{in} \quad \Omega, \\ \operatorname{div} u = 0 & \text{in} \quad \Omega, \\ u = 0 & \text{on} \quad \partial\Omega. \end{cases} \tag{3}$$

領域 Ω は $\mathbb{R}^2$ 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, $\nu > 0$ です．未知関数は速度場を表す u と圧力場を表す p です.

$H^k(\Omega)$ 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 セミノルムで定義します．このとき (3) の弱形式は $H_0^1(\Omega)^2 \times L_0^2(\Omega)$ 内に一意の解 $[u, p]$ を持ちます.

さらに $\mathcal{T}_h$ を領域 $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ の三角形または四角形分割， h を $\mathcal{T}_h$ の scale parameter とします． $h > 0$ は領域の分割幅を通常表します．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 (3) 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ちます (証明は [11]):

Lemma 2 任意の $f \in L^2(\Omega)^2$ に対し

$$\begin{cases} |u - u_h|_1 \le \left(\frac{1}{\nu^2} + \frac{1}{\beta^2} \right)^{\frac{1}{2}} C(h) \, |f|_0, \\ |p - p_h|_0 \le \left(\frac{1}{\beta} + \frac{\nu}{\beta^2} \right) C(h) \, |f|_0, \end{cases} \tag{4}$$

ただし

$$C(h) \equiv \sqrt{(C_0 h K_2 + K_1)^2 + (C_0 h)^2}, \tag{5}$$

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, K_2 は Ω, X_h, Y_h によって決まる定数.

さらに 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 L に対して

$$K_i \le \left(\sup_{x \in \mathbb{R}^n} \frac{x^T A_i x}{x^T L x} \right)^{\frac{1}{2}}$$

で評価することができます．従って vpgep のアルゴリズムにより K_1, K_2 の厳密な上限が見つかれば, (5) によって $C(h)$ が決まり，さらに (4) によって， Stokes 方程式の有限要素解に対する定量的な a priori な誤差評価が可能になります.

6.2 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 個の矩形に分割します．このとき $h = 1/L$ となります． 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とします.

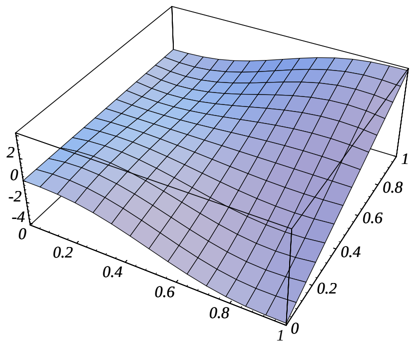
パラメータは $\nu = 1$, $C_0 = 1/(2\pi)$, $1/\beta^2 = 4 + 2\sqrt{2}$ とします.

数値計算はライブラリ・サーバー wisdom 上で C++ による区間演算ライブラリ PROFIL([6]) を用いて行ないました． K_1, K_2 は vpgep のアルゴリズムを PROFIL に実装して評価しました.

次の表は $\delta_1 = 10^{-3}$, $\delta_2 = 10^{-1}$ に対する K_1, K_2, $C(h)$ の値です．( ) 内は FUJITSU VP2600/10 上の 64 ビット浮動小数点演算によって近似計算した値です．固有値問題は Cholesky 分解 +Householder-bisection 法によって求めています.

[8] いわゆる「性質の悪い」問題です.

L	K_1	K_2	$C(h)$
5	0.051035	1.268929	0.0968082
(floating)	(0.051008)	(1.268295)	(0.0967652)
10	0.027955	1.238731	0.0502564
(floating)	(0.027941)	(1.238111)	(0.0502339)



圧力場の近似解の形状 (例)

7 補足

この章は，これまでの章で省略したことがらについての補足説明です.

7.1 (1) と (2) の同値性

Lemma 3 $n \times n$ の実対称行列 A と $n \times n$ の実対称正定値行列 B に対し，γ を一般化固有値問題 (2) の固有値の絶対値最大，即ち

$$\gamma = \max\{\, |\lambda| \mid Ax = \lambda Bx \quad \text{for some} \quad x \neq 0\,\}$$

とおくと，

$$\gamma = \sup_{x \in \mathbb{R}^n} \left| \frac{x^T A x}{x^T B x} \right|$$

が成立する.

[理由] Lemma 1より，(2) の固有値は下三角行列 C に対し

$$B = CC^T, \quad E \equiv C^{-1} A C^{-T}$$

とおいた時の対称行列 E の固有値と一致します．よって

$$\gamma = \max\{\, |\lambda| \mid Ex = \lambda x \quad \text{for some} \quad x \neq 0\,\}$$

です．$y = C^T x$ とおき，C の正則性を用いることより

$$\begin{aligned} \sup_{x \in \mathbb{R}^n} \left| \frac{x^T A x}{x^T B x} \right| &= \sup_{x \in \mathbb{R}^n} \left| \frac{x^T A x}{(C^T x)^T C^T x} \right| \\ &= \sup_{y \in \mathbb{R}^n} \left| \frac{y^T C^{-1} A C^{-T} y}{y^T y} \right| \\ &= \sup_{y \in \mathbb{R}^n} \left| \frac{y^T E y}{y^T y} \right| \end{aligned}$$

を得ます．従って，正規化により

$$\sup_{x \in \mathbb{R}^n} \left| \frac{x^T A x}{x^T B x} \right| = \sup_{x^T x = 1} \left| x^T E x \right|$$

となります．よって，以下

$$\gamma = \sup_{x^T x = 1} \left| x^T E x \right| \tag{6}$$

を示します.

E は対称行列であるので，適当な直交行列[9] M により対角化可能[10]です (証明は例えば [5] を参照)．即ち，E の固有値 $\lambda_i (1 \leq i \leq n)$ によって構成される対角行列

$$D \equiv \mathrm{diag}[\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n]$$

に対し，

$$E = MDM^T$$

となります．ここで $z = M^T x$ とおき，M の直交性を用いることで，

$$\sup_{x^T x = 1} \left| x^T E x \right| = \sup_{x^T x = 1} \left| (M^T x)^T D M^T x \right| = \sup_{z^T z = 1} \left| z^T D z \right|$$

を得ます．次にベクトル z を成分表記; $z = (z_1, z_2, \ldots, z_n)^T$ すると,

$$\sup_{z^T z = 1} \left| z^T E z \right| = \sup_{z^T z = 1} \left| \lambda_1 z_1^2 + \lambda_2 z_2^2 + \cdots + \lambda_n z_n^2 \right|$$

と書けます．ここで，$\gamma = \max_{1 \leq i \leq n} |\lambda_i|$ であることより

$$\sup_{z^T z = 1} \left| \sum_{i=1}^n \lambda_i z_i^2 \right| \leq \gamma \sup_{z^T z = 1} \sum_{i=1}^n z_i^2 = \gamma$$

を，また，優越固有値を λ_k とするとき，$\hat{z}$ として特別に k 番目の要素が 1，その他の要素が 0 のベクトルを選ぶことにより,

$$\sup_{z^T z = 1} \left| \sum_{i=1}^n \lambda_i z_i^2 \right| \geq \left| \sum_{i=1}^n \lambda_i \hat{z}_i^2 \right| = |\lambda_k| = \gamma$$

となり，結論を得ます. □

標準固有値問題に対する (6) は，優越固有値以外の固有値に対しても拡張可能です[11].

7.2 一般化固有値問題の数値解法

この節では，一般化固有値問題の数値解法の代表的なものを紹介します.

7.2.1 標準固有値問題への変換

3.2節での B を Cholesly 分解する手法以外に，次の手法があります:

- B が正定値行列であるので逆行列 B^{-1} が存在します．よって (2) の両辺に B^{-1} を作用させて

$$B^{-1} A x = \lambda x$$

とします．ただし A, B が対称であっても $B^{-1}A$ が対称でなくなることと B^{-1} を計算する手間，また，B が悪条件 (cf.[18]・6 章) の場合 B^{-1} に大きな誤差が混入する可能性が強いことから，実際にはあまり使われません.

[9] $M^T M = M M^T = I$

[10] 『正規行列 ($A^* A = A A^*$) はユニタリ相似変換によって固有値を対角要素にもつ対角行列に変換可能』という有名な定理です．通常，線形代数の学習の到達点です.

[11] この定理を "Courant-Fischer のミニ・マックス定理" と呼びます．詳しくは [5], [22] を参照してください.

- B が悪条件であっても A が悪条件でなければ

$$A^{-1}Bx = \frac{1}{\lambda}x$$

とすることも考えられます．問題点は上と同じです．

- B の固有値を成分にもつ対角行列 D と B の固有ベクトルを列成分に持つ直交行列 V で B を対角化して

$$B = VDV^T$$

とします． B は正定値より D の成分は正です．よって D の成分の平方根を対角要素とする行列を $D^{1/2}$ と書くと，対称行列

$$(VD^{1/2})^{-1}A(VD^{1/2})^{-T}$$

に対する標準固有値問題に帰着できます．この変形は， B が悪条件の場合でも比較的精度よく解けることが特徴です．ただし B の固有値，固有ベクトルをすべて計算する必要があることから，多くの手間がかかります．

7.2.2 QZ 法

QZ 法 (QZ algorithm) は A と B に適当な直交行列 U, V を作用させることによって上三角行列 UAV, UBV に対する一般化固有値問題に同値変形する手法です．このとき，上三角行列の対角成分の比が問題の固有値になっています．

詳しいアルゴリズムは [12], [25] を参照してください． QZ 法は直交変換だけをもちいているため，行列の条件を悪くすることなく計算できる点が優れています．

参考文献

[1] Henning Behnke: 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.

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

[3] F. シャトラン (伊里正夫，伊里由美 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.

[4] 一松 信: 数値解析, 新数学講座 13, 朝倉書店, ISBN 4-254-11443-5, 1982.

[5] 伊里 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.

[6] Olaf Knüppel: PROFIL/BIAS–A Fast Interval Library, *Computing*, Vol.53 (1994) pp.277-287.

[7] Rudolf Lohner: 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.

[8] Günter Mayer: 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.

[9] Günter Mayer: 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.

[10] 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.

[11] 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.

[12] 名取 亮: 数値解析とその応用, コンピュータ数学シリーズ 15, コロナ社, ISBN 4-339-02548-8, 1990.

[13] 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.

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

[15] Siegfried M. Rump: 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.

[16] 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.

[17] Richard S. Varga: *Matrix Iterative Analysis*, Prentice-Hall, 1962.
［邦訳］ 渋谷 政昭, 棚町 芳弘, 金子 正久, 野田 隆 訳 : 計算機による大型行列の反復解法, サイエンスライブラリ情報電算機 10, サイエンス社, 1972.

[18] 渡部 善隆, 山本 野人, 中尾 充宏: 実対称行列の正定値性判定プログラム, 九州大学大型計算機センター広報, Vol.31, No.1 (1998) pp.1–10.

[19] J. H. Wilkinson and C. Reinsch: *Linear Algebra*, Handbook for Automatic Computation Volume II, Springer-Verlag, Berlin, 1971.

[20] Nobito Yamamoto and Mitsuhiro T. Nakao: Numerical Verifications of Solutions for Elliptic Equations in Nonconvex Polygonal Domains, *Numerische Mathematik*, Vol.65 (1993) pp.503–521.

[21] 山本 野人, 渡部 善隆, 田中 得登, 中尾 充宏: 一般化固有値問題の精度保証付き解法, 日本応用数理学会 1997 年度年会講演予稿集 (1997) pp.10–11.

[22] 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.

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

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

[25] 現代数理科学事典, 大阪書籍, 1991.