2. 鳥内に対する討論

松 谷 泰 行(東大工)

「Jacobi の方法」についての文献紹介

ま え が き

シンポジウムで紹介した文献の抄訳をここに述べることとする。筆者の思い違いから，シンポジウムでは〔3〕Pope & Tompkins の文献についての報告は正確でなかつた。この報告に述べられた事柄が，文献から得られた正しい情報である。誤つた報告により迷惑をかけた事をおわびする次第である。

§1. 文　献

Jacobi の方法について論じた文献として，最も詳細なものは，

〔1〕 H.H.Goldstein, F.J.Murray and J.von Neuman
The Jacobi Method for Real Symmetric Matrices
— Journal of the Association for Computing Machinery Vol.6 No. 1, January 1959, pp.59~96 —

である。〔1〕の文献目録中，Jacobi の方法について述べたものとして

〔2〕 W.Givens
Numerical computation of the characteristic values of a real symmetric matrix
— Oak Ridge National Laboratory, ORNL-1574, 1954.

Jacobi の方法を実施するにあたつての 1 つの technique についての研究と実験を述べたものとして，

〔3〕 D.Pope and C.Tompkins
Maximizing Functions of Rotations — Experiments

Concerning Speed of Diagonalyzation of Symmetric Matrices Using Jacobi's Method

— Journal of the Association for Computing Machinery Vol.4, No.4, October 1957, pp.459~466. —

がある。〔1〕は最も綜合的に論じたものであり，〔2〕は〔1〕の member と交流の結果生れたもので，大体の考え方は〔1〕とまつたく同じである。ただ〔1〕が「理論的」なのに対して，〔2〕は更にプログラム及びフローチャートをつけ，誤差評価に表われる数値も現実の計算機 — ORACLE — に即して述べられている。〔3〕はこれ等とは別に——実際には交流があつたかもしれぬが——なされた興味ある実験である。ここでは〔1〕,〔3〕について紹介する。

§2. 〔1〕 H.H.Goldstein, F.J.Murray and von Neuman "The Jacobi Method for Real Symmetric Matrices"

まず real symmetric Matrix の固有値を求めるのに，Frame 法その他の欠点を指摘し，Jacobi の方法がよい事を強調している。

$$A\boldsymbol{x}=\lambda \boldsymbol{x} \qquad (2.1)$$

A : real symmetric matrix, $\boldsymbol{x}$: vector

λ : 固有値

を解くのに，Jacobi の方法は

$$A^{(i')}=V^{(i')*}A^{(i'-1)}V^{(i')} \qquad i'=1,2,\cdots\cdots \qquad (2.2)$$

$$V^{(i')}= \begin{array}{c} \\ j \\ k \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{cc} j & k \end{array} \\ \left(\begin{array}{cc} \cos\varphi_i & \sin\varphi_i \\ -\sin\varphi_i & \cos\varphi_i \end{array} \right) \end{array}$$

但し $a_{jk}^{(i'-1)}$ は $A^{(i'-1)}$ の off diagonal element で最大のもの。

を $A^{(0)}=A$ として行うことである。

この時 $\sum_{j \neq k} (a_{jk}^{(i')})^2 = \tau(A^{(i')})$ とおけば

$$0 \leqq \tau(A^{(i')}) \leqq \tau(A)\exp(-2i'/n(n-1)) \qquad (2.3)$$

n は行列の次元

が成り立ち, $A^{(i)} \rightarrow I_\lambda$ （$i \rightarrow$ 十分大）

$$I_\lambda = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & & 0 \\ & \lambda_2 & & \\ & & \cdots & \\ 0 & & & \lambda_n \end{pmatrix} \qquad \lambda_j \text{ : 固有値}$$

となる。又

$$U^{(i)} = V^{(1)}V^{(2)} \cdots\cdots V^{(in(n-1)/2)}$$

$$= U^{(i-1)}V^{((i-1)n(n-1)/2+1)} \cdots\cdots V^{(in(n-1)/2)} \qquad \cdots\cdots(2.4)$$

とおくと, $U^{(i)}$ は固有 vector の作る行列に限りなく近づく。

この演算を行うにあたつて詳細な，わずらわしいまでの誤差解析がなされているわけである。ただ根本としては fixed-point の計算機を仮定しており，$\cos\varphi_i$，$\sin\varphi_i$ については三角公式を利用して導かれこのとき入つてくる平方根その他についての詳細な誤差の解析が行われているわけである。

拘束条件としては $N(A^{(i)}) = \sum_{j,k} a_{jk}^{(i)2}$ に対し

$$\frac{1}{2} \leqq N(A^{(i)}) \leqq 1$$

となるよう，絶えず normalization が行われるよう述べている。（理論的には $N(A^{(i)}) = \text{const.}$）

誤差公式も導かれているが，著者によれば over-estimate の感があるとの事である。

$E_{n,q,s}$; 求められた固有値の真値に対する誤差

$F_{n,q,s}$; 求められた固有ベクトルの行列の真の固有ベクトルの行列への誤差

$G_{n,q,s}$; $|\overline{A}\overline{Y}-\overline{Y}\overline{D}|$ の誤差

$\overline{A}$: π の行列, $\overline{Y}$: 固有ベクトルの行列

$\overline{D}$: 固有値の行列

n : 次元, s : 計算機のケタ数, q : 最適反復回数

とすると, 10進計算機では表1のようになる。(最適反復数をとつたとする)

(表1)

	$n=16, s=8, q=20$	$n=100, s=20, q=22$	$n=400, s=12, q=25$
$E_{n,q,s}$	$7\ \times 10^{-4}$	5.4×10^{-4}	1.6×10^{-4}
$F_{n,q,s}$	4.2×10^{-4}	6.0×10^{-4}	1.7×10^{-4}
$G_{n,q,s}$	2.8×10^{-3}	1.9×10^{-3}	1.4×10^{-2}

§ 3. D. Pope and C. Tompkins "Maximizing Functions of Rotations"

Jacobi の方法については次のように述べている。

行列(対称) A について

(1) $M(R)=RAR^{T}$

R^{T} は R の transposed. $R=r_{ij}=\begin{array}{c|cc} & i & j \\ \hline i & \cos\theta & \sin\theta \\ j & -\sin\theta & \cos\theta \end{array}$ $(i<j)$

の変換を行つても $M(R)$ は対称行列である。

$X=(x_{ij})=M(R)$

とおき

(2) $N(X)=\sum_{i,j} x_{ij}^2$ ＝一定

(3) $D(X)=\sum_{i} x_{ii}^2$

(4) $E(X)=\sum_{i\neq j} x_{ij}^2$

とおく。 $N=D+E$ である。

$D(S_k)\longrightarrow N(A)$

なるような S_R を rotation matrix R を使つて求めるのである。

(5) $S_k=R_k S_{R-1} R_k^{-1}$

$S_0=A$

とする。 $S_{k-1}=X$, $Y=S_k$ とおくと, X, Y は共に対称で, R_k としては(1)の $R_{ij}(\theta)$ をとつて

$$Y=R_{ij}(\theta)X\,R_{ij}^T(\theta)$$

と記すことが出来る。Y, Xの間には次の関係がある。

(6) $$\begin{cases} y_{ii}=x_{ii}+p_{ij} \\ y_{jj}=x_{jj}-p_{ij} \\ y_{ij}=x_{ij}(1-\varepsilon_{ij})\cos 2\theta \qquad (i<j) \end{cases}$$

但し

(7) $$\rho_{ij}=x_{ij}\left(\sin 2\theta-\frac{2\sin^2\theta}{\tan 2\theta}\varepsilon_{ij}\right)$$

$$\varepsilon_{ij}=k_{ij}\tan 2\theta$$

$$k_{ij}=\frac{x_{ii}-x_{jj}}{2x_{ij}}$$

Dの増加は

(10) $$\varDelta D=y_{ii}^2+y_{jj}^2-x_{ii}^2-x_{jj}^2$$

$$=2x_{ij}^2\left[\sin^2 2\theta+(2\varepsilon-\varepsilon^2)\cos^2 2\theta\right]$$

$$=2x_{ij}^2\left[\frac{(k^2-1)\varepsilon^2+2\varepsilon}{k^2\varepsilon^2+1}\right]$$

（ε_{ij}，k_{ij} の添数はわずらわしいので省略する）

$\varepsilon_{ij}=0$ or $\varepsilon_{ij}=2/(1-k^2)$ ならば $\Delta D=0$ で $|y_{ij}|=|x_{ij}|$ となる。

ε の取り方により，次のように変換される。

(i) $\varepsilon=1$，$y_{ij}=0$，$\Delta D=2x_{ij}$ 最もよい選び方である。

(ii) $0<\varepsilon<1$，$|x_{ij}|$ 減少 但し符号変らず (under relaxation)

(iii) $1<\varepsilon<\begin{cases}2/(1-k^2) & |k|<1\\ \infty & |k|\geqq 1\end{cases}$

$|x_{ij}|$ 減少 D 増加， 但し x_{ij} の符号が変る。

(over relaxation)

(iv) $\varepsilon<0$ 間違つた方向へ rotation している。

(i)が Jacobi's original method である。Jacobi's original method にあつては rotation の対称となる element として S_R の off-diagonal element のうち絶達値最大のものを選ぶ。これにより ΔD は最大となり，収束が最も早い結果になる。

しかしながら，off-diagonal element の絶対値最大のものをさがすという事はかなりの時間の浪費である。そこでここでは次の方法をとる事にし，これを modified Jacobi method と名づける。以下この方法によつて実験を行うものとする。

まず減少正項数列をとり，順次その数をとつてくる。それより絶対値大なる element について回転を行う。数列の一つの値について，それより絶対値最大のものがないならば，数列の次の値をとり，同じように行う。—Fig. 2-1 参照 —

以上の modified Jacobi method をとる事にし，回転角の計算の仕方を考える。(10) より $0<\varepsilon<2$ ととれば常に $\Delta D>0$ となり，収束が得られる。従つて次のような4つの計算の仕方を考える事にしよう。

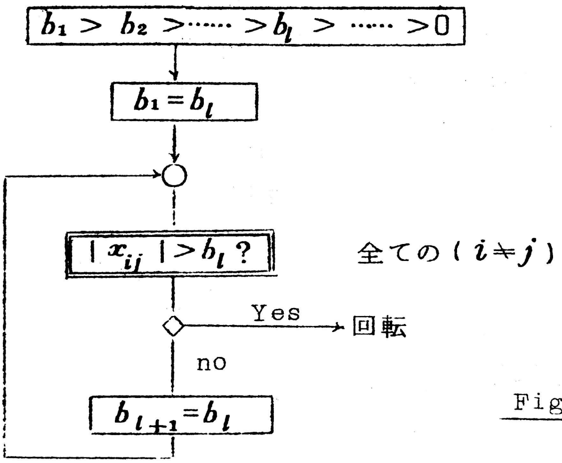

Fig.2 − 1

Method 1 : Original Jacobi angle

(11) $\tan 2\theta = 2x_{ij}/(x_{ii} - x_{jj})$

より回転角を定める。

Method 2 : Over-relaxed Angle

(12) $\tan\theta/2 \begin{cases} = x_{ij}/2(x_{ii} - x_{jj}) \\ = \mathrm{sgn}[x_{ij}/(x_{ii} - x_{ii})] \tan\pi/8 \end{cases}$ 絶対値の小さい方

この意味は x_{ij} が diagonal element にくらべて小さいときは，$\tan\theta \fallingdotseq \theta$ の関係から，$x_{ij}/2(x_{ii} - x_{jj}) \fallingdotseq \theta/2 \fallingdotseq \tan\theta/2$ となつて，(11) と一致する。そうでないと $\theta = \pm\pi/4$，$2\theta = \pm\pi/2$ から over relaxation を起す。

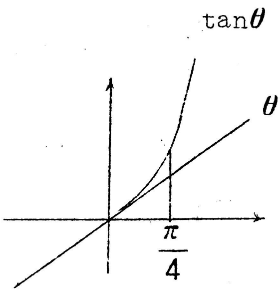

Fig. 2−2

この方法の長所は

$$\begin{cases} (13) & \sin\theta = 2\tan(1/2\,\theta)/(1+\tan^2(1/2\,\theta)) \\ (14) & \cos\theta = (1-\tan^2(1/2\,\theta))/(1+\tan^2(1/2\,\theta)) \end{cases}$$

により平方根を経ず $\sin\theta$，$\cos\theta$ が求められる点である。

Method 3 : Sequence of Angles-
Under relaxed

あらかじめ定められた減少する角の数列がある。回転を行うべき element について，全てこの角による回転を行う。回転を行うべき element 全部がこの角で回転を行い終つたら次の小さい角をとつてくる。$0<\varepsilon_{ij}<1$ となるような範囲の回転を行う。 — Fig.2−3 参照—

Method 4 : Sequence of Angles-
Over relaxed

3と同じ，但し $0<\varepsilon_{ij}<2$ まで許すとする。

以上の各4つの方法について，いずれも modified Jacobi method を用い，比較実験を行つた。実験の材料は次の5つである。

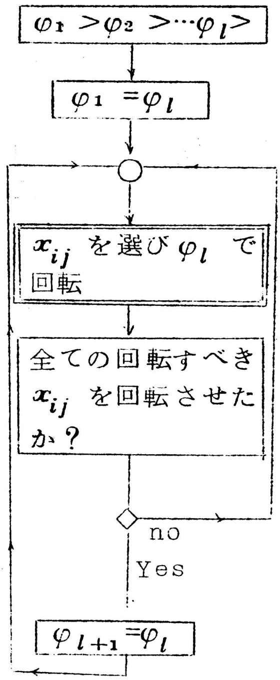

Fig. 2−3

Matrix A ; order 10. Laplace equation を difference equation で近似したときの行列。triangular grid に適応する。
対角要素 6×10^{-8} off-diagonal 中36ケが -2^{-8} 残りは0。

Matrix B ; order 11, element は全て 2^{-4}

Matrix C ; Hilbert matrix. order 11, $a_{ij}=[2(i+j)]^{-1}$
$i, j=1, \cdots\cdots, 11$

Matrix D ; Hilbert matrix, order 18, $a_{ij}=[4(i+j-1)]^{-1}$
$i, j=1, \cdots\cdots, 18$

Matrix E ; "poorly conditioned" matrix of order 6, given by Lotkin 〚1〛

Matrix F ; singular matrix of order 8, given in a paper 〚2〛

〚1〛 "A set of Test matrices" M.Lotkin, M.T.A.C. 9, 153−161(1955)

〔2〕 "Some Numerical Examples on Solving Systems of Linear Equations by the Conjugate Gradient Method for Non-symmetric Systems of Equations"

M.R.Hestenes. V.W.Hochstrassen and L.S.Wilson

— an NBS working paper (1912) —

なお使用計算機はSWAC である。

結果はrotation の回数及び $\log_{10}(E_0/E)$ の graph で表わされる。(Fig.2−4 参照) Eは $E=\sum_{i\neq j} x_{ij}^2$ $E_0=\sum_{i\neq j} a_{ij}^2$ である。

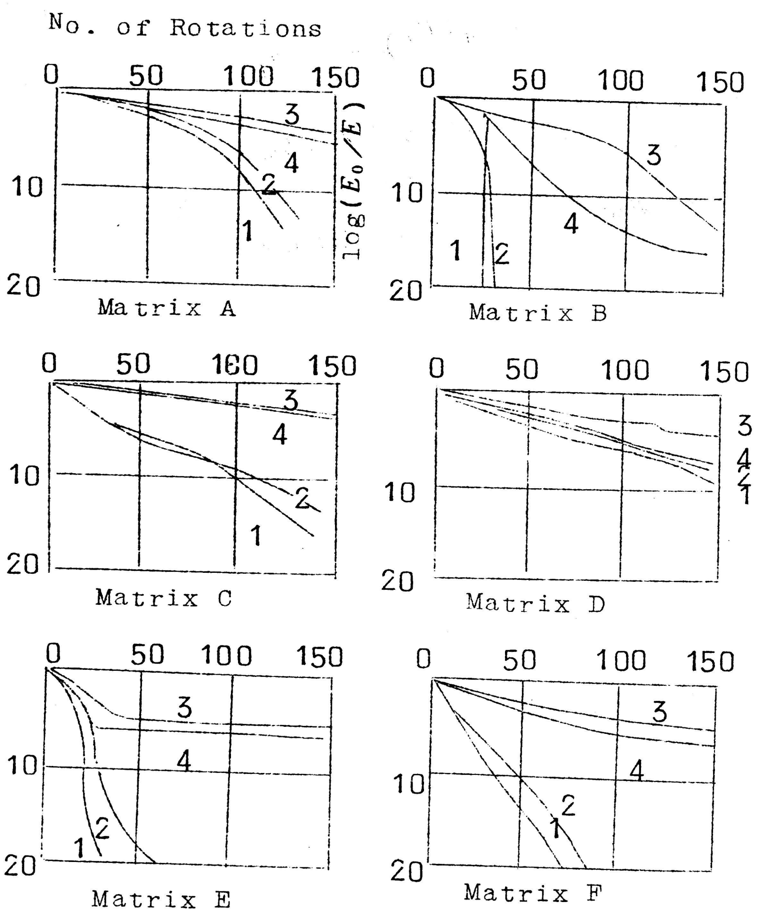

Fig. 2−4

§ 4. シンポジウム報告の訂正

シンポジウムにおいて文献〔3〕ではoriginal Jacobi methodと，〔3〕でいうmodified Jacobi methodの比較実験が行われているように述べたが，これは誤りである。

〔3〕では常にmodified Jacobi methodが使われている。modified Jacobi methodでどのような減少数列を選んだかは書かれていない。その選び方としては〔1〕に記された関係式

$$0 \leqq \tau(A^{(i')}) \leqq \tau(A)\exp(-2i/n(n-1)) \quad \cdots\cdots (2.3)$$

$$\tau(A^{(i')}) = \sum_{i \neq j} a_{ij}^{(i')2}$$

が参考になるのではないだろうか。

なお又original Jacobi methodとmodified Jacobi methodの比較を行つた報告については筆者はまだお目にかかつていない。

本 PDF ファイルは 1960 年発行の「第 1 回プログラミング–シンポジウム報告集」をスキャンし、項目ごとに整理して、情報処理学会電子図書館「情報学広場」に掲載するものです。

この出版物は情報処理学会への著作権譲渡がなされていませんが、情報処理学会公式 Web サイトの https://www.ipsj.or.jp/topics/Past_reports.html に下記「過去のプログラミング・シンポジウム報告集の利用許諾について」を掲載して、権利者の捜索をおこないました。そのうえで同意をいただいたもの、お申し出のなかったものを掲載しています。

過去のプログラミング・シンポジウム報告集の利用許諾について

情報処理学会発行の出版物著作権は平成 12 年から情報処理学会著作権規程に従い、学会に帰属することになっています。

プログラミング・シンポジウムの報告集は、情報処理学会と設立の事情が異なるため、この改訂がシンポジウム内部で徹底しておらず、情報処理学会の他の出版物が情報学広場 (=情報処理学会電子図書館) で公開されているにも拘らず、古い報告集には公開されていないものが少からずありました。

プログラミング・シンポジウムは昭和 59 年に情報処理学会の一部門になりましたが、それ以前の報告集も含め、この度学会の他の出版物と同様の扱いにしたいと考えます。過去のすべての報告集の論文について、著作権者（論文を執筆された故人の相続人）を探し出して利用許諾に関する同意を頂くことは困難ですので、一定期間の権利者捜索の努力をしたうえで、著作権者が見つからない場合も論文を情報学広場に掲載させていただきたいと思います。その後、著作権者が発見され、情報学広場への掲載の継続に同意が得られなかった場合には、当該論文については、掲載を停止致します。

この措置にご意見のある方は、プログラミング・シンポジウムの辻尚史運営委員長 (tsuji@math.s.chiba-u.ac.jp) までお申し出ください。

加えて、著作権者について情報をお持ちの方は事務局まで情報をお寄せくださいますようお願い申し上げます。

期間：2020 年 12 月 18 日 〜 2021 年 3 月 19 日
掲載日：2020 年 12 月 18 日

プログラミング・シンポジウム委員会

情報処理学会著作権規程
https://www.ipsj.or.jp/copyright/ronbun/copyright.html