

新しい特異値計算ルーチンによる 対称 3 重対角行列の固有値計算の評価

高山 智史[†] 合田 紘章[†] 高田 雅美^{‡,†}
岩崎 雅史^{‡,†} 中村 佳正^{†,‡}

ynaka@i.kyoto-u.ac.jp

[†] 京都大学大学院 情報学研究科 数理工学専攻

[‡] 独立行政法人 科学技術振興機構

概要

対称 3 重対角行列の固有値計算については既にいくつかの定評ある手法がある。本論文は、2 重対角行列の特異値計算法として開発された mdLVs 法 [7] を対称 3 重対角行列の固有値問題に適用し、新しい固有値計算法として LAPACK のいくつかのルーチンと比較する。その結果、高精度と高速性をともに必要とする場合、正定値行列に対しては mdLVs 法が優れていることが示された。

Evaluation of Eigenvalue Computation for Symmetric Tridiagonal Matrices in Terms of New Routine for Singular Value Computation

Tomofumi Takayama[†] Hiroaki Goda[†] Masami Takata^{‡,†}
Masashi Iwasaki^{‡,†} Yoshimasa Nakamura^{†,‡}

[†] Department of Applied Mathematics and Physics
Graduate School of Informatics, Kyoto University

[‡] PRESTO, JST

Abstract

There are some approved methods for computing eigenvalues of symmetric tridiagonal matrices. In this paper the mdLVs scheme [7] for computing singular values of bidiagonal matrices is applied to the symmetric tridiagonal eigenvalue problem and is compared with the several routines of LAPACK as a new algorithm for eigenvalues. When one needs both accuracy and computational time, the mdLVs scheme is shown to be better for the positive-definite case.

1 はじめに

対称な正方行列 $A \in \mathbf{R}^{m \times m}$ は、適切な直交行列 $U \in \mathbf{R}^{m \times m}$ と対角行列 $\Lambda \equiv \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m)$ によって、

$$A = U\Lambda U^T$$

のように分解可能である。これが A の対角化であり、 λ_k は A の固有値と呼ばれる。

行列の固有値計算は、本質的な特徴が抽出できるため極めて重要である。固有値により微分および差分方程式モデルの解析が可能で、基礎から実用レベルまでさまざまな利用法があり、その応用分野も多岐にわたる。また、固有値は統計データの主成分分

析と関連深く、情報検索のための潜在的意味インデキシング技術 [1] や 2 次元画像から 3 次元元画像を復元する技術 [12] といった次世代技術の核となる演算でもある。

行列の次数 m が大きくなるにつれて、行列の固有値計算は極端に困難になる。わずか 10 次行列でも、10 次の特性多項式を解かなければならない。ときには数 10 万回以上もの大規模行列を扱うこともあり、計算機なしでは現実的な時間で計算することはできない。計算機上の演算では、処理速度や記憶容量の限界を超えないよう十分注意する必要がある。さらに、数値安定性や収束性が保証された計算手法を選択することが理想的である。

実対称正方行列 A を実対称 3 重対角化することが、計算機で A の固有値を求める優れた前処理の 1 つとされている。この前処理には、中規模ならば Householder 法 [2, 5] が、大規模ならば Lanczos 法 [13] が用いられることが多い。実対称 3 重対角行列

$$T = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 & & & 0 \\ a_2 & a_3 & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ 0 & & & a_{2m-2} & \\ & & & a_{2m-2} & a_{2m-1} \end{pmatrix}$$

の固有値計算法としては、2 分法 [2, 13, 14], root-free QR 法 [2, 3, 5], Jacobi 法 [2, 5, 13, 14] などが代表的であるが、どれも計算速度・精度および信頼性のいずれかに弱点がある。ゆえに、ユーザーが計算手法の違いについて十分考慮した上で、用途に応じた適切な手法の選択が必要不可欠となる。

一方、特異値を求める手法には、高速高精度な dqds 法 [4, 10] や、速度ではやや劣るものの高精度かつ信頼性の高い mdLVs 法 [6, 7] などがある。本論文では、これらの高性能な特異値計算法を拡張して固有値を計算する方法を示し、数値実験によってその有効性を評価する。

2 章において、既存の特異値計算法に少しだけ演算を追加すれば、実対称 3 重対角行列の固有値が求まることを理論的に示す。3 章では、2 分法, root-free QR 法および dqds 法との比較実験を行い、mdLVs 法の計算速度・精度に関する特性を明確にする。

2 実対称 3 重対角行列の固有値

数値計算ライブラリ LAPACK[8] では、実対称 3 重対角行列の固有値を求めるルーチンとしていくつか公開されている。ところが、高精度に計算できるが時間がかかる、高速だが精度が悪い、あるいは高速高精度だが数値安定性が保証されていないなど、決定的なルーチンが存在しないのが現状であろう。本章では、高性能な特異値計算法によって、実対称 3 重対角行列の固有値が計算可能であることを数学的に示す。

まず、 T が正定値、すなわち、すべての固有値 λ が正の場合について述べる。このとき、上 2 重対角行列によって、 T の Cholesky 分解

$$T = B^T B$$

$$B \equiv \begin{pmatrix} b_1 & b_2 & & & \\ & b_3 & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ 0 & & & b_{2m-2} & \\ & & & & b_{2m-1} \end{pmatrix}$$

ができる。ただし、 B^T は B の転置行列を表す。具

体的には、

$$b_1^2 = a_1 \quad b_{2k} = \frac{a_{2k}}{b_{2k-1}},$$

$$b_{2k+1}^2 = a_{2k+1} - b_{2k}^2, \quad k = 1, 2, \dots, m-1 \quad (1)$$

のように $b_1, b_2, \dots, b_{2m-1}$ の順に B の対角および非対角成分が求まり、 T の Cholesky 分解ができる。ここで、 T と B の小行列

$$T_j \equiv \begin{pmatrix} a_1 & a_2 & & & 0 \\ a_2 & a_3 & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ 0 & & & a_{2j-2} & \\ & & & a_{2j-2} & a_{2j-1} \end{pmatrix},$$

$$B_j \equiv \begin{pmatrix} b_1 & b_2 & & & \\ & b_3 & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ 0 & & & b_{2j-2} & \\ & & & & b_{2j-1} \end{pmatrix},$$

$j = 1, 2, \dots, m$

を導入する。ただし、 $T_m = T$, $B_m = B$ である。 T が正定値なので、すべての j の対して、小行列式は $\det(T_j) > 0$ となることに注意する。このとき、

$$0 < \det(T_j)$$

$$= \det(B_j^T B_j)$$

$$= \det(B_j^T) \det(B_j)$$

$$= \prod_{k=1}^j b_{2k-1}^2$$

となり、 $b_1, b_3, \dots, b_{2m-1}$ は明らかに実数である。対角成分 b_{2k-1} が実数ならば、(1) より非対角成分 b_{2k} も実数である。すなわち、 T が正定値ならば、成分すべてが実数である上 2 重対角行列 B によって $T = B^T B$ と Cholesky 分解できることが分かる。これは、 B の特異値を求めてその値を 2 乗すれば、 T の固有値になることを意味する。

一方、 T が不定値ならば、対角成分に T の最小固有値の絶対値 $|\lambda_{\min}|$ を加算した新たな実対称 3 重対角行列

$$\bar{T} = T + |\lambda_{\min}| I \quad (2)$$

について考えればよい。 $I \in \mathbf{R}^{m \times m}$ は単位行列であり、この操作は T の原点シフトと呼ばれる [2, 5, 10]。ここで、 \bar{T} の固有値 $\bar{\lambda}$ がすべて正、すなわち \bar{T} が正定値となることに着目する。このとき、上述したように $\bar{T} = \bar{B}^T \bar{B}$ を満たす上 2 重対角行列 \bar{B} の特異値の 2 乗を求めれば、 \bar{T} の固有値となる。さらに、(2) より $\lambda = \bar{\lambda} - |\lambda_{\min}|$ は明らかで、 $\bar{\lambda}$ の値が求まれば T の固有値が得られることが分かる。

以上より、実対称 3 重対角行列の性質によらず、上 2 重対角行列の特異値を求める手法が転用可能といえ

表 1: 各ルーチンの平均実行時間

	行列サイズ	
	5000	10000
DSTEBZ (2 分法)	34.65	134.7
DSTERF (root-free QR 法)	1.78	6.98
DLARRE (dqds 法)	4.71	17.19
mdLVs (mdLVs 法)	7.48	27.53

表 2: テスト行列

	対角成分	非対角成分	固有値分布
Type 1	200	10	[180, 220]
Type 2	20	10	[0, 40]
Type 3	20	100	[-180, 220]
Type 4	0	100	[-200, 200]

表 3: 各ルーチンによる計算値と正しい固有値との相対誤差の平均値

	Type 1	Type 2	Type 3	Type 4
DSTEBZ (2 分法)	1.50E-16	3.48E-16	1.51E-16	1.49E-16
DSTERF (root-free QR 法)	2.35E-16	3.28E-14	3.55E-16	3.53E-16
DLARRR (dqds 法)	1.45E-16	1.24E-15	4.18E-15	1.38E-15
mdLVs (mdLVs 法)	1.33E-16	1.13E-15	1.16E-15	1.18E-15

る．正定値ならば直ちに，不定値ならば原点シフト (2) 後に，Cholesky 分解によって初期行列の上 2 重対角行列を生成すればよい．特異値計算法としては，平方根計算を要する QR 法 [2, 3, 5] もあるが，高速高精度な dqds 法や mdLVs 法などが適切であろう．

3 数値実験および考察

mdLVs ルーチン [11] は，もともとは特異値を高精度に求める目的で設計されている．2 節で説明した正定値化が計算機上でうまく実現できれば，mdLVs ルーチンが実対称 3 重対角行列の固有値計算においても有効となる可能性がある．そこで，最小固有値 λ_{\min} の見積もりと正定値化演算を mdLVs ルーチンに付加して，簡単な数値実験を行った． λ_{\min} の見積もりには，停止条件を緩めに設定された 2 分法を採用した． $\lambda_{\min} > 0$ ならば Cholesky 分解によって得られる上 2 重対角行列を， $\lambda_{\min} \leq 0$ ならば正定値化後の Cholesky 分解によって得られる上 2 重対角行列を初期行列として反復計算を開始する．

性能評価のために，LAPACK ルーチンである DSTEBZ, DSTERF, および DLARRE を比較対象とした．各ルーチンはそれぞれ，2 分法，root-free QR 法，および dqds 法に基づいてプログラミングされている．DLARRE ルーチン内部では，正定値ならば特異値計算用の DLASQ ルーチン (cf.[9]) が呼び出される．正定値か否かの判別には，Gersgorin 境界条件 [4, 10] が利用される．本章では，LAPACK のルーチン名ではなく，便宜上，手法名で説明する．

数値実験は CPU: Pentium4 2.6GHz, Memory: 512MB をもつ計算機で行った．OS は Debian 3.0 Linux 2.4.24 とした．

まず，実対称 3 重対角行列の対角および非対角成分を $[-100, 100]$ の乱数によって与えて，各ルーチン

の平均実行時間を測定した．その結果，表 1 を得た．いずれのルーチンについても，行列サイズが 2 倍になれば実行時間もほぼ 4 倍となる．行列サイズが変化してもこのスケーラビリティが極端に崩れることはないと推測される．よって，最も高速に固有値が計算できるのは root-free QR 法，逆に最も時間を要するのは 2 分法ということになる．最高速の root-free QR 法に比べて，dqds 法および mdLVs 法の実行時間は，それぞれ 3 倍弱および 4 倍弱となる．ただし，root-free QR 法は数値的に安定性が保証されないという報告 [3] もあり，信頼性重視ならば使用すべきでない手法といえよう．

次に，表 2 に示す 4 種類の 1000 次行列をテスト行列として，各ルーチンの計算精度について調べた．なお，すべての k に対して $a_{2k-1} = a_{\text{odd}}$, $a_{2k} = a_{\text{even}}$ となるテスト行列の固有値は厳密に

$$\lambda_k = a_{\text{odd}} + 2\text{sgn}(a_{\text{even}})a_{\text{even}} \cos \frac{k\pi}{m+1}$$

となることが知られている [14]．固有値の分布は $a_{\text{odd}} - 2a_{\text{even}} < \lambda_k < a_{\text{odd}} + 2a_{\text{even}}$ となり， $a_{\text{even}}/a_{\text{odd}}$ の値が小さいほど固有値は近接しているといえる．表 3 は，各ルーチンによる計算値と正しい固有値の相対誤差の平均値を示している．なお，Maple 9 において有効桁数を 50 で計算した固有値を正しい固有値とした．表 2 のテスト行列の固有値はいずれも単純である．このタイプの行列では，実行時間は大きいものの，2 分法によって高精度に固有値が求められる．dqds 法や mdLVs 法は，不定値ならば root-free QR 法と比較しても分が悪いが，正定値ならば善戦し，Type 1 に限ってはわずかながら 2 分法をも上回る．

さらに，各ルーチンの特性について理解を深めるために，すべての固有値に対して，計算値と真値との絶対誤差および相対誤差をグラフ化した．図 1~

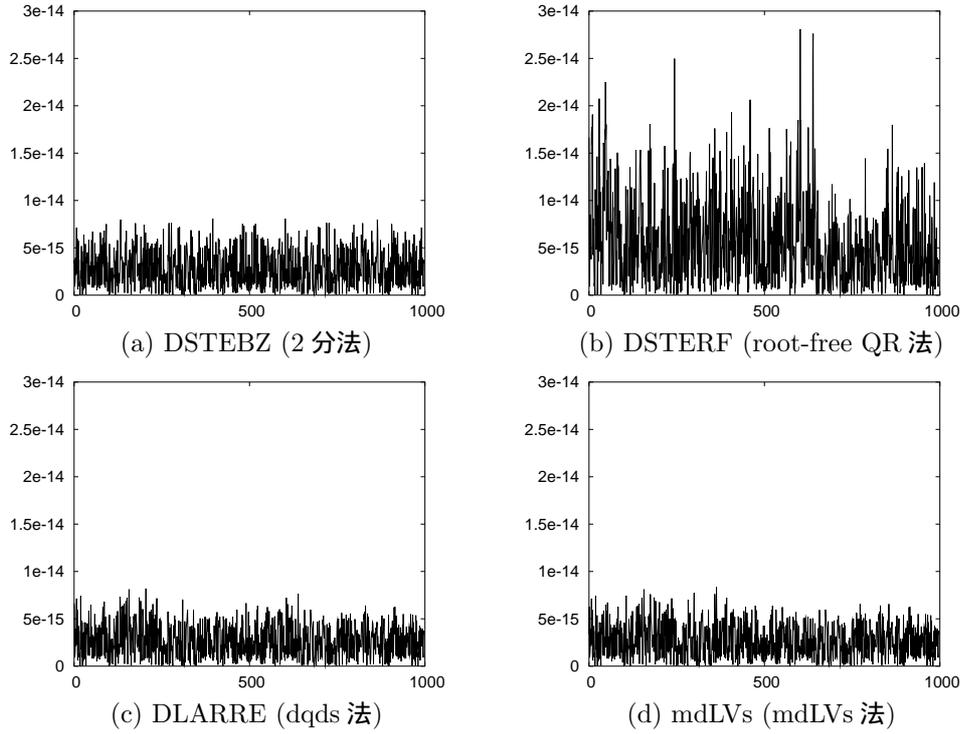


図 1: 計算された固有値に含まれる絶対誤差 (Type 1: 正定置かつ零固有値なし)

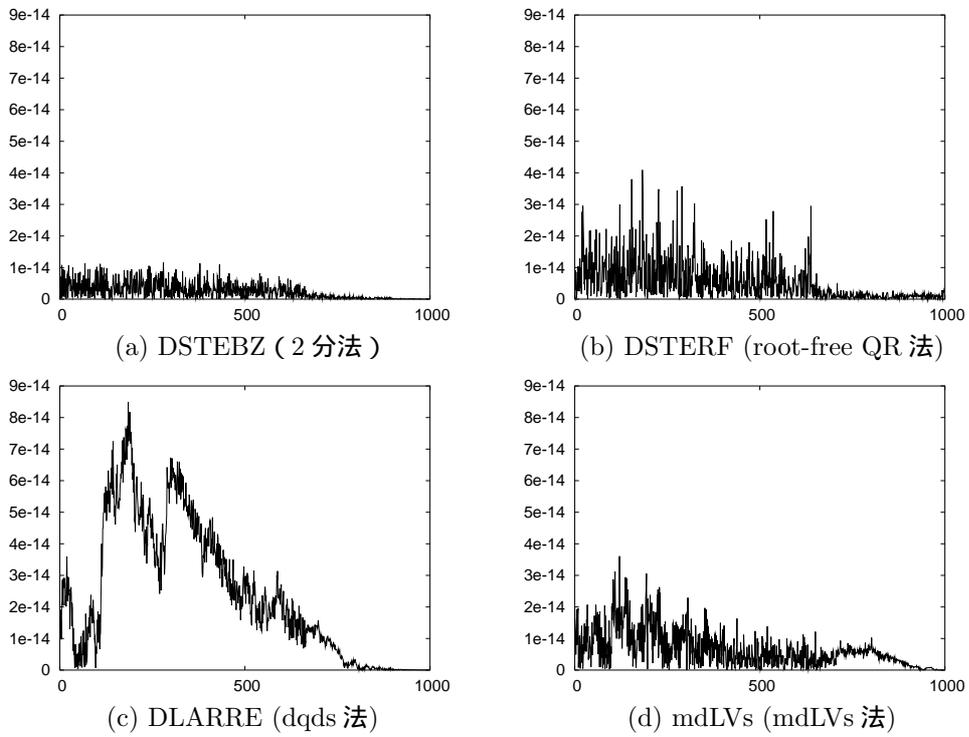


図 2: 計算された固有値に含まれる絶対誤差 (Type 2: 正定値かつほぼ零の固有値あり)

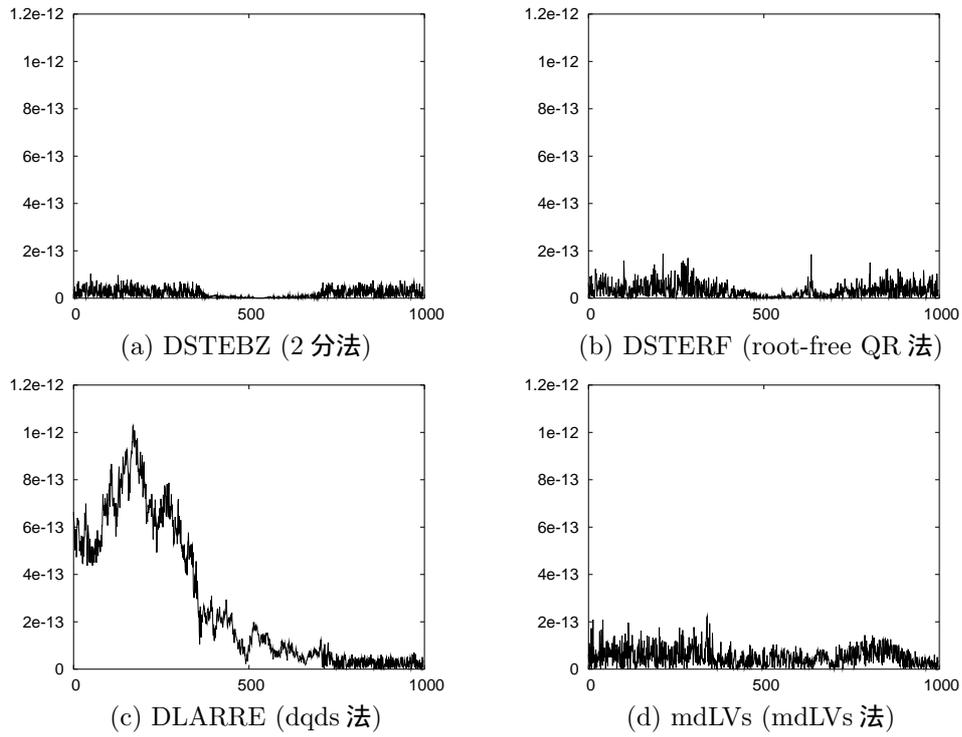


図 3: 計算された固有値に含まれる絶対誤差 (Type 3: 不定置かつ零固有値なし)

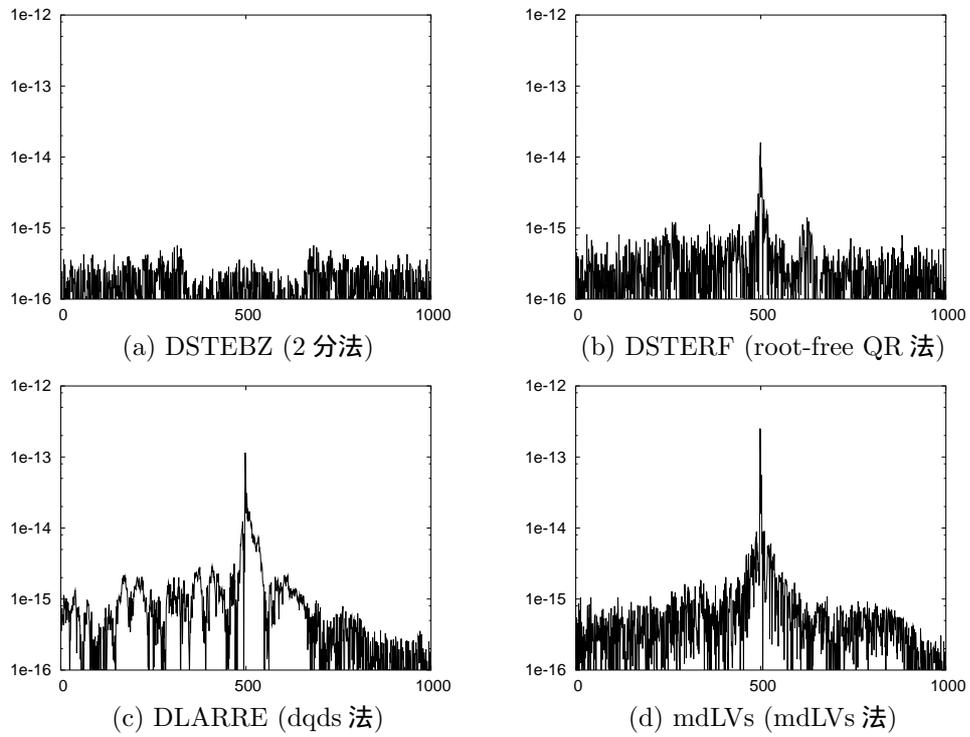


図 4: 計算された固有値に含まれる相対誤差 (Type 4: 不定置かつ零固有値なし)

4 は, Type 1~4 の固有値を 4 つのルーチンで求めたときの誤差であり, 図 1~3 は絶対誤差を, 図 4 は相対誤差を示す. なお, 固有値を $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_m$ とし, グラフの横軸は固有値 λ_k の添え字 k , 縦軸は絶対誤差あるいは相対誤差の値と表す. 2 分法によって, テスト行列の固有値は総じて高精度に求まることが再確認できる. root-free QR 法は特に高精度ともいえないが, 正定値か不定値かには大きく左右されず平均的に良好な結果を示した. 正定値ならば有効に機能する dqds 法と mdLVs 法であるが, dqds 法よりも mdLVs 法が高精度に固有値を求められる傾向も確認できた.

一方, 不定値ならば dqds 法や mdLVs 法で求めた固有値が精度低下するが, その理由は, 例えば Type 4 の 500 番目の固有値 λ_{500} の相対誤差を考察すれば理解できる. 図 4 において, 他の固有値と比較して 500 番目付近の固有値に極端な精度悪化が見られる. 原点シフト (2) で $|\lambda_{\min}| = 200$ として正定値化した行列 \bar{T} の固有値を mdLVs 法で求めると $\bar{\lambda}_{500} = 2.00 \dots \times 10^2$ となった. この値を真値と比較したところ 16 桁すべて一致した. すなわち, \bar{T} の固有値計算に精度悪化の原因があるわけでない. 問題は $\lambda_{500} = \bar{\lambda}_{500} - |\lambda_{\min}|$ のように \bar{T} の固有値 $\bar{\lambda}_{500} = 2.00 \dots \times 10^2$ とシフト量 $|\lambda_{\min}| = 2.0 \times 10^2$ を減算して T の固有値 λ_{500} を求める際に生じる. もともと 16 であった有効桁数が 13 になるからである. このような情報落ちは, 不定値の場合を mdLVs 法が不得意とする主要因と推察され, もし改善されれば大幅な精度向上が期待できるだろう.

4 まとめ

精度も速さもある程度必要ならば, 対称 3 重対角行列の固有値計算ルーチンとしては, 正定値では mdLVs がよい. 不定値では DLARRE ルーチン (root-free QR 法) に対して精度がやや劣り改善の余地がある. 本研究では, 固有ベクトルを用いない固有値計算法として, mdLVs 法を DSTEBZ (2 分法), DSTERF (root-free QR 法), DLARRE (dqds 法) との比較を行った. 一方, 固有ベクトルから逆反復法などを用いて高精度の固有値計算を行うルーチンとして, LAPACK には DPTEQR や DSTEGR がある. 固有ベクトルを利用した固有値計算法としての mdLVs 法の性能評価は別の機会に報告したい.

謝辞

本研究にあたり, 貴重なアドバイスをいただきました九州大学大学院数理学研究院の木村欣司氏に深く感謝いたします.

参考文献

- [1] Deerwester, S., Dumais, S. T., Landauer, T. K., Furnas, G. W., and Harshman, R. A.: *Indexing by latent semantic analysis*, J. Soc. Info. Sci., Vol.41, pp. 391-407 (1990).
- [2] Demmel, J. W.: *Applied Numerical Linear Algebra*, SIAM, Philadelphia (1997).
- [3] Demmel, J., and Kahan, W.: *Accurate singular values of bidiagonal matrices*, SIAM J. Sci. Sta. Comput., Vol.11, pp. 873-912 (1990).
- [4] Fernando, K. V., and Parlett, B. N.: *Accurate singular values and differential qd algorithms*, Numer. Math., Vol.67, pp. 191-229 (1994).
- [5] Golub, G. H., and Van Loan, C. F.: *Matrix Computations* 3rd ed., John Hopkins Univ. Press, Baltimore (1996).
- [6] Iwasaki, M., and Nakamura, Y.: *On a convergence of solution of the discrete Lotka-Volterra system*, Inverse Problems, Vol.18, pp. 1569-1578 (2002).
- [7] Iwasaki, M., and Nakamura, Y.: *Accurate computation of singular values in terms of shifted integrable schemes*, preprint (2005).
- [8] LAPACK, <http://www.netlib.org/lapack/>.
- [9] Parlett, B. N., and Marques, O. A.: *An implementation of the dqds algorithm (positive case)*, Lin. Alg. Appl., Vol.309, pp. 217-259 (2000).
- [10] Rutishauser, H.: *Lectures on Numerical Mathematics*, Birkhäuser, Boston, (1990).
- [11] 高田雅美, 岩崎雅史, 木村欣司, 中村佳正: 高精度な特異値計算ルーチンの開発と性能評価, 情報処理学会論文誌, 投稿中 (2005).
- [12] Tomasi, C., and Kanade, T.: *Shape and motion from image streams under orthography: a factorization method*, Int. j. comput. vis., Vol.9 pp.137-154 (1992).
- [13] Watkins, D. S.: *Foundation of matrix computation* 2nd ed., John Wiley & Sons, New York (2002).
- [14] 山本哲郎: 数値解析入門, サイエンス社 (1976)