数理解析研究所講究録
第 1719 巻 2010 年 7-11

上二重対角行列の最小特異値の下界に関する最近の進展について

京都大学大学院情報学研究科　　山下　巧, 木村　欣司, 中村　佳正
(Takumi Yamashita, Kinji Kimura, Yoshimasa Nakamura)
Graduate School of Informatics,
Kyoto University

1 はじめに

行列の特異値について, 最小特異値のよりシャープな下界を少ない計算量で求めることは理論, 応用の両面で有用である. 特に上二重対角行列の最小特異値の下界については, その下界の 2 乗をシフト付き特異値計算アルゴリズム [1, 2] におけるシフト量として用いることができる.

本講演では, 最小特異値の下界に関する著者達による最近の研究について報告する.

2 上二重対角行列の最小特異値の一般化 Newton 下界

正則な $N \times N$ $(N \geq 2)$ 上二重対角行列 $\boldsymbol{B}$ について, その上副対角成分は全て零でないと仮定する. このとき, $\boldsymbol{B}$ の特異値を $\sigma_1, \cdots, \sigma_N$ $(\sigma_1 > \cdots > \sigma_N > 0)$ とする. 任意の正の整数 M に対し, 正定値行列 $(\boldsymbol{B}^T\boldsymbol{B})^M$ の固有値を $\lambda_1^{(M)}, \cdots, \lambda_N^{(M)}$ $(\lambda_1^{(M)} > \cdots > \lambda_N^{(M)} > 0)$ とする. ここに, $\lambda_i^{(M)} = \sigma_i^{2M}$ $(1 \leq i \leq N)$ である. $(\boldsymbol{B}^T\boldsymbol{B})^M$ の固有方程式

$$f(\lambda^{(M)}) \equiv \det((\boldsymbol{B}^T\boldsymbol{B})^M - \lambda^{(M)}\boldsymbol{I}) = 0$$

を考える. $(\boldsymbol{B}^T\boldsymbol{B})^M$ が正定値行列であることから, $\lambda^{(M)} = 0$ を起点としてよく知られた Newton 法を一回適用して得られる値

$$-\frac{f(0)}{f'(0)} = \left(\sum_{i=1}^{N} \frac{1}{\lambda_i^{(M)}}\right)^{-1} = \left(\sum_{i=1}^{N} \frac{1}{\sigma_i^{2M}}\right)^{-1} \equiv J_M^{-1}$$

は $(\boldsymbol{B}^T\boldsymbol{B})^M$ の最小固有値 $\lambda_N^{(M)}$ の下界を与える. ここに, J_M は,

$$J_M = \mathrm{Tr}(((\boldsymbol{B}^T\boldsymbol{B})^M)^{-1}) = \mathrm{Tr}(((\boldsymbol{B}\boldsymbol{B}^T)^M)^{-1})$$

を満たす. これより, $\boldsymbol{B}$ の最小特異値 σ_N の下界として次の次数 M $(M = 1, 2, \cdots)$ 一般化 Newton 下界

$$\theta_M = J_M^{-\frac{1}{2M}}$$

が得られる. $M = 1$ の場合については, 例えば, $\boldsymbol{B}$ の主対角成分および副対角成分が全て正である場合に Fernando と Parlett [1] が, 主対角成分および副対角成分が全て非零である場合に von Matt [3] が $\boldsymbol{B}$ の最小特異値の下界として同様の結果を与えている. 一般化 Newton 下界 θ_M は, M に対して単調増加性を示す. すなわち,

$$\theta_1 < \theta_2 < \cdots < \sigma_N$$

である. さらに, $M \to \infty$ の極限で θ_M は最小特異値に収束する. すなわち,

$$\lim_{M\to\infty} \theta_M = \sigma_N$$

である.

3 一般化 Newton 下界を計算するための公式（減算を含む形式）

一般化 Newton 下界を計算するには, $(\boldsymbol{B}^T\boldsymbol{B})^M$ または $(\boldsymbol{B}\boldsymbol{B}^T)^M$ の逆行列のトレースが分かればよい. そのためには, これらの逆行列の対角成分を求めればよい. 次の記号を導入する. 上二重対角行列 $\boldsymbol{B}$ の第 i 行目の対角成分, 副対角成分をそれぞれ b_i $(1 \le i \le N)$, c_i $(1 \le i \le N-1)$ とする. 次のように行列 $\boldsymbol{V}^{(m)}, \boldsymbol{W}^{(m)}, \boldsymbol{X}^{(q)}, \boldsymbol{Y}^{(q)}$ $(0 \le m \le M,\ 0 \le q \le M-1)$ を定める.

$$
\begin{cases}
\boldsymbol{V}^{(m)} \equiv ((\boldsymbol{B}^T\boldsymbol{B})^m)^{-1}, \\
\boldsymbol{W}^{(m)} \equiv ((\boldsymbol{B}\boldsymbol{B}^T)^m)^{-1}, \\
\boldsymbol{X}^{(q)} \equiv (\boldsymbol{B}(\boldsymbol{B}^T\boldsymbol{B})^q)^{-1} = ((\boldsymbol{B}\boldsymbol{B}^T)^q\boldsymbol{B})^{-1}, \\
\boldsymbol{Y}^{(q)} \equiv (\boldsymbol{X}^{(q)})^T.
\end{cases}
$$

$\boldsymbol{V}^{(m)}, \boldsymbol{W}^{(m)}, \boldsymbol{X}^{(q)}, \boldsymbol{Y}^{(q)}$ の第 i 行目の対角成分をそれぞれ $v_i^{(m)}, w_i^{(m)}, x_i^{(q)}, y_i^{(q)}$ $(1 \le i \le N)$ とする. さらに, $z_i^{(q)} \equiv b_i(x_i^{(q)} + y_i^{(q)})$ $(1 \le i \le N)$ を定義する. $\boldsymbol{V}^{(0)} = \boldsymbol{W}^{(0)} = \boldsymbol{I}^{-1} = \boldsymbol{I}$ より,

$$
v_i^{(0)} = 1, \qquad w_i^{(0)} = 1, \qquad (1 \le i \le N) \tag{1}
$$

である. このとき, 求めるべき対角成分 $v_i^{(M)}, w_i^{(M)}$ について, 次の定理が成り立つ.

定理 1 [4]

M を任意の正の整数とする. 求めるべき逆行列 $((\boldsymbol{B}^T\boldsymbol{B})^M)^{-1}, ((\boldsymbol{B}\boldsymbol{B}^T)^M)^{-1}$ の対角成分 $v_i^{(M)}, w_i^{(M)}$ $(1 \le i \le N)$ は, 式 (1) および次の漸化式

$$
\begin{aligned}
v_i^{(p)} &= \frac{1}{b_i^2}(c_i^2 v_{i+1}^{(p)} + z_i^{(p-1)} - w_i^{(p-1)}), \\
w_j^{(p)} &= \frac{1}{b_j^2}(c_{j-1}^2 w_{j-1}^{(p)} + z_j^{(p-1)} - v_j^{(p-1)}), \\
z_j^{(q)} &= z_{j-1}^{(q)} + 2(v_j^{(q)} - w_{j-1}^{(q)}), \\
v_N^{(p)} &= \frac{1}{b_N^2} w_N^{(p-1)}, \\
w_1^{(p)} &= \frac{1}{b_1^2} v_1^{(p-1)}, \\
z_1^{(q)} &= 2v_1^{(q)}
\end{aligned}
$$

から有限回の四則演算によって得られる. ここに, i, j, p, q は, 整数 $1 \le i \le N-1$, $2 \le j \le N$, $1 \le p \le M$, $0 \le q \le M-1$ である. □

証明は [4] を参照されたい.

注意 2

$p = 1$ のとき, 定理 1 の $v_i^{(p)}, w_i^{(p)}$ $(1 \leq i \leq N)$ に関する漸化式は次のように簡略化される.

$$v_i^{(p)} = \frac{1}{b_i^2}(c_i^2 v_{i+1}^{(p)} + 1) \qquad (1 \leq i \leq N-1),$$
$$w_j^{(p)} = \frac{1}{b_j^2}(c_{j-1}^2 w_{j-1}^{(p)} + 1) \qquad (2 \leq j \leq N),$$
$$v_N^{(p)} = \frac{1}{b_N^2},$$
$$w_1^{(p)} = \frac{1}{b_1^2}. \ \square$$

J_M から $J_M^{\frac{1}{2M}}$ を計算するためのコストは無視できるとすると, 定理 1 および注意 2 に基づいて一般化 Newton を計算するために必要な演算回数は $O(MN)$ のオーダーである. M は固定された定数であるから, このオーダーは $O(N)$ と見做せる. ただし, 数値計算を行う場合, $M \geq 2$ のときは計算中の変数に大きな相対誤差が入り得る. 例を以下に示す. ε をマシンイプシロンとする. 数値計算において, 乗算と除算は, 加算と減算より先に行われると仮定する. さらに, 計算式に括弧がある場合, 括弧内の計算が先に行われると仮定する. $b_1^2 v_2^{(1)} < \varepsilon$ かつ $c_1^2 v_2^{(1)} < \varepsilon$ である場合を考える. 数値計算において, b_1 から b_1^{-2} を計算したとき, この値が丸め誤差を含めて β になるものとする. 数値計算において, 注意 2 の漸化式によって計算される $v_1^{(1)}$ について, $c_1^2 v_2^{(1)}$ が丸め誤差を含めても ε より小さいとすると, $c_1^2 v_2^{(1)} + 1$ の計算においていわゆる情報落ちによってこれが無視され, 最終的に $v_1^{(1)}$ は β になる. $2 = 2^1$ より, 2 をかける乗算では誤差が混入しないと仮定する. このとき, 数値計算における $z_1^{(1)}$ は $z_1^{(1)} = 2v_1^{(1)} = 2\beta$ となる. $w_1^{(1)} = \beta$ であることを考慮すると, 数値計算として,

$$z_2^{(1)} = z_1^{(1)} + 2(v_2^{(1)} - w_1^{(1)}) = 2\beta + 2 \times (v_2^{(1)} - \beta)$$

であるが, 括弧内の計算において $v_2^{(1)}$ は無視されるので, この計算結果は 0 になる. 厳密な計算においては

$$z_2^{(1)} = \frac{2}{b_1^2}(c_1^2 v_2^{(1)} + 1) + 2\left(v_2^{(1)} - \frac{1}{b_1^2}\right) = 2\left(\frac{c_1^2}{b_1^2} + 1\right)v_2^{(1)} > 0.$$

であるから, この場合の数値計算における $z_2^{(1)}$ の相対誤差は 1 のオーダーである. この問題を考慮し, 定理 1 の漸化式を改良する.

4 一般化 Newton 下界を計算するための公式（減算を含まない形式）

定理 1 の漸化式から出発してこれと等価で減算を含まない漸化式が導出される.

まず, 以下の値 $\check{B}_i$ $(1 \leq i \leq N)$, F_i $(1 \leq i \leq N-1)$, $\tilde{F}_i$ $(2 \leq i \leq N)$ を導入する.

$$\check{B}_i = \frac{1}{b_i^2} \qquad (1 \leq i \leq N),$$
$$F_i = c_i^2 \check{B}_i \qquad (1 \leq i \leq N-1),$$
$$\tilde{F}_i = c_{i-1}^2 \check{B}_i \qquad (2 \leq i \leq N).$$

この記号を用いると, $p=1$ のとき, 注意 2 の漸化式は次のように書き直せる.

$$
\begin{cases}
v_i^{(p)} = F_i v_{i+1}^{(p)} + \check{B}_i & (1 \le i \le N-1), \\
w_j^{(p)} = \tilde{F}_i w_{j-1}^{(p)} + \check{B}_i & (2 \le j \le N), \\
v_N^{(p)} = \check{B}_N, & \\
w_1^{(p)} = \check{B}_1. &
\end{cases}
\tag{2}
$$

さらに, 次の値 $g_i^{(r)}, \tilde{g}_i^{(r)}$ $(1 \le i \le N,\ r = 1, 2, \cdots)$ を定義する.

定義 3

$g_i^{(r)}$ $(1 \le i \le N,\ r = 1, 2, \cdots)$ は次で定義される.

- 任意の正の整数 r に対し, $g_N^{(r)} = 0$.
- $r = 1$ に対し, $g_i^{(1)} = F_i v_{i+1}^{(1)}$ $(1 \le i \le N-1)$.
- $r = 2, 3, \cdots$ に対し, $g_i^{(r)} = F_i g_{i+1}^{(r)} + \check{B}_{i+1} g_i^{(r-1)} + \sum_{k=1}^{r-1} g_{i+1}^{(k)} g_i^{(r-k)}$ $(1 \le i \le N-1)$.

定義 4

$\tilde{g}_i^{(r)}$ $(1 \le i \le N,\ r = 1, 2, \cdots)$ は次で定義される.

- 任意の正の整数 r に対し, $\tilde{g}_1^{(r)} = 0$.
- $r = 1$ に対し, $\tilde{g}_i^{(1)} = \tilde{F}_i w_{i-1}^{(1)}$ $(2 \le i \le N)$.
- $r = 2, 3, \cdots$ に対し, $\tilde{g}_i^{(r)} = \tilde{F}_i \tilde{g}_{i-1}^{(r)} + \check{B}_{i-1} \tilde{g}_i^{(r-1)} + \sum_{k=1}^{r-1} \tilde{g}_{i-1}^{(k)} \tilde{g}_i^{(r-k)}$ $(2 \le i \le N)$.

注意 5

$g_{N-1}^{(r)}, \tilde{g}_2^{(r)}$ $(r = 2, 3, \cdots)$ はそれぞれ, $g_{N-1}^{(r)} = \check{B}_N g_{N-1}^{(r-1)}, \tilde{g}_2^{(r)} = \check{B}_1 \tilde{g}_2^{(r-1)}$ で計算できる.

これらの定義式を用いて, 次の定理が証明される.

定理 6

$M \ge 2$ のとき, 求めるべき逆行列 $((\boldsymbol{B}^T \boldsymbol{B})^M)^{-1}, ((\boldsymbol{B}\boldsymbol{B}^T)^M)^{-1}$ の対角成分 $v_i^{(M)}, w_i^{(M)}$ $(1 \le i \le N)$ は, 式 (2) および次の漸化式

$$
\begin{aligned}
v_N^{(s)} &= \check{B}_N w_N^{(s-1)}, \\
w_1^{(s)} &= \check{B}_1 v_1^{(s-1)}, \\
v_i^{(s)} &= F_i v_{i+1}^{(s)} + \check{B}_i w_i^{(s-1)} + 2 \sum_{k=1}^{s-1} g_i^{(k)} w_i^{(s-k)}, \\
w_j^{(s)} &= \tilde{F}_j w_{j-1}^{(s)} + \check{B}_j v_j^{(s-1)} + 2 \sum_{k=1}^{s-1} \tilde{g}_j^{(k)} v_j^{(s-k)}
\end{aligned}
$$

から有限回の四則演算によって得られる．ここに, i, j, p, q は, 整数 $1 \le i \le N-1$, $2 \le j \le N$, $2 \le s \le M$ である．□

J_M から $J_M^{\frac{1}{2M}}$ を計算するためのコストは無視できるとすると, 定理 6 に基づいて一般化 Newton を計算するために必要な演算回数は $O(M^2N)$ のオーダーである．M は固定された定数であるから, このオーダーは $O(N)$ と見做せる．

アンダーフロー, オーバーフローは生じないとの仮定の下で, $M = 2, 3$ の場合について丸め誤差の蓄積を見積もる．注意 5 を考慮し, 定理 6 に基づいて $((\boldsymbol{B}^T\boldsymbol{B})^M)^{-1}$ または $((\boldsymbol{B}\boldsymbol{B}^T)^M)^{-1}$ の全ての対角成分を求める．このときの丸め誤差の蓄積による相対誤差は, 計算中に現れる全変数に対し, マシンイプシロンを ε として, 最悪の場合でも $O(M^2N\varepsilon)$ 以下のオーダーである．したがって, 少なくとも $M = 2, 3$ のとき, 求めるべき逆行列の対角成分の計算は数値安定性を持つ．$M \ge 4$ の場合の解析は今後の課題である．

5 まとめ

上二重対角行列の最小特異値の下界として一般化 Newton 下界を導入した．この下界を計算するための公式を漸化式中に減算を含む形式と含まない形式の 2 通りの形式で与えた．これらの公式より一般化 Newton 下界を求めるのに必要な逆行列の対角成分が有限回の四則演算で得られる．

参考文献

[1] K. V. Fernando and B. N. Parlett, Accurate singular values and differential qd algorithms, Numer. Math. 67 (1994) 191-229.

[2] M. Iwasaki and Y. Nakamura, Accurate computation of singular values in terms of shifted integrable schemes, Japan J. Indust. Appl. Math. 23 (2006) 239-259.

[3] U. von Matt, The orthogonal qd-algorithm, SIAM J. Sci. Comput. 18 (1997) 1163-1186.

[4] K. Kimura, T. Yamashita and Y. Nakamura, On $O(N)$ formula for the diagonal elements of inverse powers of symmetric positive definite tridiagonal matrices, 京都大学大学院情報学研究科数理工学専攻テクニカルレポート 2008-010, 2008