数理解析研究所講究録
269巻 1976年 70-82

行列の固有値固有ベクトル計算ライブラリの問題点、

京大大型計算機センター
星野 聰

1 緒言

行列の固有値・固有ベクトルの計算プログラムでは固有値にほゞ等しいものがある場合や固有値の絶対値が非常に大きいものと非常に小さいものがある場合など、特殊なケースについて精度上問題のない様に配慮されている必要がある。

以下においてはこの様な種々の問題をとり上げ、これらをチェックするためのテスト行列について考え実例についてのべる。テスト行列としては精度に影響がある問題点を良くテストできる、なるべく簡単な行列を選ぶ。テスト行列には精度に影響を与えるパラメタが含まれるものとし、これを変化させて精度の変化を調べるのである。

精度を調べるための criterion として種々のものが考えうるが、EISPACK[3] では $(n \times n)$ の行列Aに対し

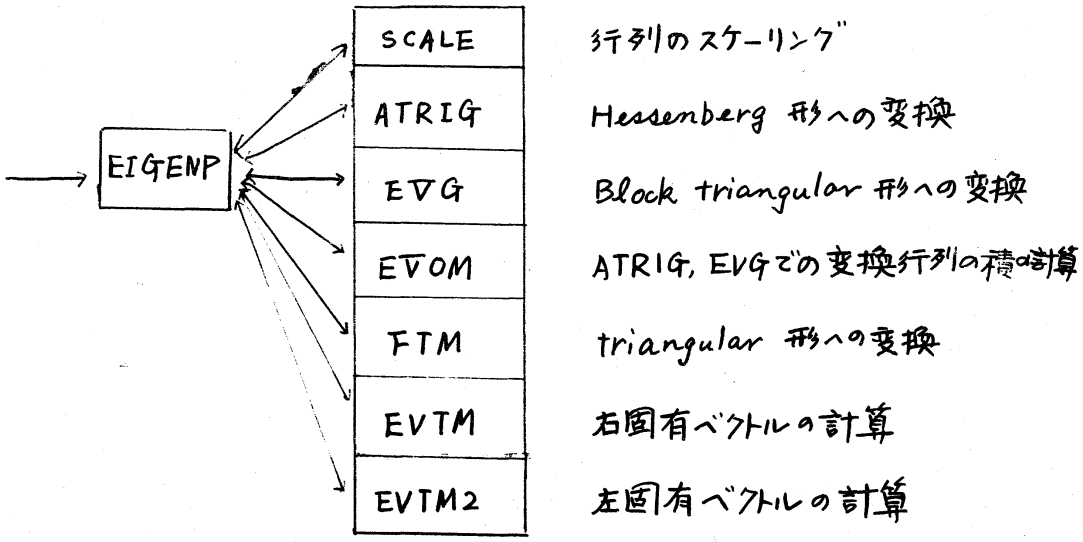
$$\mu = \max_{1 \le i \le n} \frac{\| A z_i - \lambda_i z_i \|}{10 n \varepsilon \| A \| \cdot \| z_i \|},$$

を用いている。こゝでεは machine precision, λ_i, z_i はi番目の固有値・固有ベクトルである。また 10 は便宜上とられた factor である。以下の各節ではこのμを用いる。

その他の criteria としては、かつて京大大型計算機センターの開発計画の下で開発を行った（1970年）ライブラリ——実対称行列の固有値・固有ベクトル EVVIS および一般実行列の固有値・固有ベクトル EIGENP ——では次の諸点について調べたことがある。[1]

- 計算所要時間，
- 残差 $(A-\lambda I)X$, $Y(A-\lambda I)$
- 量 $s_i = y_i^T x_i$, $(i=1,\cdots,n)$,
- trace の変化
- 固有ベクトルの直交性 $y_i^T x_j$,
- scaling の影響

こゝで X, Yは右および左固有ベクトル x_i, y_i より成る行列である。また s_i は固有ベクトルの行列要素の変化に対する sensitivity に関係する量で，小さいほど sensible である。[文献 (2) p. 68] プログラムの構成は EIGENP を例にとると第1図に示す様にいくつかのサブプログラムに分割し各部分のアルゴリズムの改良テストが容易である様にしていた。



EIGENP 内には s_i の計算が含まれる。また、固有値のみ求めるか右固有ベクトルも求めるか左固有ベクトルも求めるかが選択できる。このようにいくつかのサブルーチンに分割したので flexibility は増したが、サブルーチン間の call に要するオーバヘッドが、特に小さい行列では無視できない様に思われる。

なお、こゝでは実行列のみを扱うことにする。計算は京大大型計算機センターの FACOM 230-75 で単精度により行った。

2 実対称行列における近似的に多重な固有値を持つ場合

ほゞ等しい固有値を持つ行列に対して互いに直交する固有ベクトルが計算されるかをテストするため、

テスト行列 I：

$$A = \begin{bmatrix} d & e & & & 0 \\ e & d\beta & e\beta & & \\ & e\beta & d\beta^2 & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ 0 & & & \ddots & \ddots \end{bmatrix},$$

を用いた。

$d = \beta = 1$ とし，e を変化させると第2表をえた。プログラムは SYMQR[4] を用いた。ただし $EPS = 10^{-6}$，また

$$v_1 = \| Z^T Z - I \|,$$

$$v_2 = \| Z^T A Z - \Lambda \|,$$

である。Z は eigenvector から成る行列であり $\Lambda = diag(\lambda_i)$ ただし λ_i は固有値である。

e	μ	v_1	v_2	t (ms)
0.1	0.09	1.28×10^{-6}	4.35×10^{-8}	183
5×10^{-6}	0.01	1.61×10^{-7}	3.42×10^{-8}	124
10^{-6}	0.01	2.83×10^{-7}	0	58

第2表

EPS を 10^{-6} に選んだ結果として e が 10^{-6} より小さいと off-diagonal の影響は無視されて diagonal の値そのものが固有値となる。固有値が互いに接近していないと off-diagonal

の存在はそのはゞ2乗の形で diagonal に影響するが、固有値が接近している場合には off-diagonal の要素の大きさと同程度の影響が diagonal に加わることに注意しておく。

(例) $\begin{pmatrix} 1 & 10^{-5} \\ 10^{-5} & 1 \end{pmatrix} \longrightarrow \lambda = 1 \pm 10^{-5}$

$\begin{pmatrix} 1 & 10^{-5} \\ 10^{-5} & 2 \end{pmatrix} \longrightarrow \lambda \fallingdotseq 1 + 10^{-10},\ 2 - 10^{-10}$

固有ベクトルの直交性については SYMQR の様に変換行列の積として固有ベクトルを作るのであれば良いが、inverse iteration による方式では工夫が必要である。固有値が接近している場合、固有値を少しずらせて固有ベクトルを計算することが行なわれるが、これだけでは不充分であり EISPACK に含まれる TINVIT では次の様な工夫がされている。すなわち、接近した固有値に対する固有ベクトルは、すでに求まった分に対して直交するようベクトルを修正する。固有値をずらせる大きさや接近した固有値の定義などは経験的な値がとられている様であり、より数学的な検討を要すると思われる。上のテスト行列で e の大きさを小さくして行くと TINVIT で計算される固有ベクトルは直交していることがわかる。 ($|v_{21}| < 3.3 \times 10^{-7}$) なお inverse iteration においては overflow が生ずる可能性があり配慮が必要である。

3 実対称行列の固有値の間で絶対値に大きい開きがある場合

固有値の大きさに非常に大きいものと小さいものがあるとき QR変換で大きな origin shift が行われると小さい固有値の精度が低下する可能性がある。この影響は explicit shift と implicit shift で異なるし（文献6の p.230）また実際のアルゴリズムにもよると思われる。[4] テストに用いた SYMQR と HQR2 は implicit shift を用いている。

テスト行列には前節のテスト行列1で $|\beta| \ll 1$ に選ぶとよく、左上から右下に進むにしたがって要素は小さくなり、固有値は小さいものから求められる。これに対し逆に左上から右下へ進むにしたがって要素が大きくなる場合

$$A = \begin{bmatrix} \cdot & \cdot & \cdot & & 0 \\ & \cdot & \cdot & & \\ & & d\beta^2 & e\beta & \\ & & e\beta & d\beta & e \\ 0 & & & e & d \end{bmatrix},$$

もテストできる様にし、前者を INDIC=0, 後者を INDIC=1 として選べる様にした。$d=1$, $e=0.3125$, $\beta=0.5$ での SYMQR での結果では INDIC=1 の方が長い計算時間を要している。（$n=24$ で 42%, $n=12$ で 28% 増）精度については個々の場合で異なっていた。

EISPACK の TRED1 − BISECT − TINVIT − TRBAK1 ルーチンでは三項行列の固有値の計算に strum sequence を用いており計算所要時間は INDIC = 0, 1 にかゝわらず同じであった。ただし μ, ν_1, ν_2 は両者で多少異っている。SYMQR と TRED1 − BISECT − TINVIT − TRBAK1 による所要時間を F に示す。

n	d	e	β	INDIC	t (ms)	
					TRED1-BISECT -TINVIT-TRBAK1	SYMQR
24	1	0.3125	0.5	0	159	130
〃	〃	〃	〃	1	159	185
12	〃	〃	0.25	0	36	25
〃	〃	〃	〃	1	36	32
24	〃	0.1	1	0	198	183
〃	〃	10^{-4}	〃	0	158	152
〃	〃	10^{-7}	〃	0	206	59*

* 固有値はすべて1が求められた。

第3表

4 行列の balancing の影響

固有値・固有ベクトルの誤差を減少させるため行列Aのノルムを小さく出来れば良い。このためAから

$$B = D^{-1}AD,$$

を作りDをうまく選んでBのノルムを減少させ、Bの固有値固有ベクトルからAのそれらを計算する。こゝで $D = \mathrm{diag}(d_i)$。この工夫は行列のscalingにより大きい要素と小さい要素が混在しているとき有効なことがある。テストには

テスト行列2：

$$A = \begin{bmatrix} n & & & 0 & \alpha \\ & n-1 & & & \alpha \\ & & \ddots & & \vdots \\ & 0 & & 2, & \alpha \\ \beta, & \beta, & \cdots & \beta, & 1 \end{bmatrix},$$

を用いた。EISPACKの一般実行列の固有値固有ベクトルを計算するルーチンELMHES－ELTRAN－HQR2によるテスト結果を才4表に示す。表中のBALANCは行列のbalancingを行うルーチンでELMHESの前に、またBALBAKはHQR2の後につけてBALANCによる固有ベクトルの補正を行うサブルーチンである。この例の場合にはbalancingにより μ を非常に小さくできることがわかる。前述のEVVIS[1]では行列のbalancingを採用している。

5 固有ベクトルがdefectiveに近い行列の場合

テスト行列として

$n=5$		BALANC, BALBAKを使用しない場合		BALANC, BALBAKを用いる場合	
α	β	λ	t, μ	λ	t, μ
1.0	1.0	-0.19817508 5.3472065 3.2862560 2.2771435 4.2875696	$t=7$ $\mu=0.13$	-0.19817507 5.3472065 3.2862560 2.2771435 4.2875696	$t=8$ $\mu=0.13$
10^{-7}	10^{-7}	5.3319806 -0.18912362 3.3222396 2.2885836 4.2463199	$t=4$ $\mu=1.73$	-0.19817497 5.3472055 3.2862552 2.2771435 4.2875695	$t=9$ $\mu=5.2\times10^{-8}$
10^{7}	10^{-7}	-540.05025 543.99091 5.7081451 1.0494493 4.2903094	$t=7$ $\mu=6766$	-0.19817511 5.3472056 3.2862553 2.2771435 4.2875700	$t=8$ $\mu=3.1\times10^{-8}$

第4表

テスト行列3：

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 & & & 0 \\ & 1 & 1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & 0 & & \ddots & 1 \\ \alpha & & & & 1 \end{bmatrix},$$

について考えると，固有値λが1からずれる距離は$\alpha^{1/n}$である。αの大きさが小さくてαが無視されてしまう場合にも

固有値の誤差が大きいことになる。したがって高精度計算による必要があるが balancing によって精度が上げられることがあることも経験した。（下表）

$n=5$	BALANC, BALBAKを使用しない場合		BALANC, BALBAKを用いる場合	
α	λ	t	λ	t
10^{-5}	0.91910170 ±0.058775123i 1.0308987 ±0.095103206i 1.0999992	22	0.91909832 ±0.058778524i 1.0309017 ±0.095105655i 1.1	20
10^{-7}	1.0 1.0 1.0 1.0 1.0	2	0.96779245 ±0.023400151i 1.0123022 ±0.037862240i 1.0398107	22

第5表　第4表と同様 ELMHES－ELTRAN－HQR2による計算結果（ただし この表は MACHEP＝10^{-7}とした場合）

$\alpha=0$ のときは固有値はすべて1であり固有ベクトルはたゞ一個となる。$\alpha\simeq 0$では固有ベクトルはほゞ等しい。一方対称実行列では互いに直交する固有ベクトルが存在する。これを考えると一般行列の固有ベクトルの計算は途中の変換行列の積を作って行く方法によるのが良いであろう。

6 その他の問題点

(i) 実対称三項行列でのQR変換における origin shift は行列Aの右下の(2×2)行列の固有値のうち a_{nn} に近いものを採用すると globally に収束する。そして第k回のQR変換による a_{ij} を $a_{ij}^{(k)}$ とするとき $|a_{n,n-1}^{(k+1)}| \leq |a_{n-1,n-2}^{(k)}|$, $|a_{n-1,n-2}^{(k+1)} a_{n,n-1}^{(k+1)}| \leq |a_{n-1,n-2}^{(k)} a_{n,n-1}^{(k)}|$ が成立つことも証明されている。[5] 非対称行列については origin shift をどう選べば良いかはっきりしない様である。QR変換の所要回数は一般に少ないが、stopping condition の与え方によってループになる恐れがあるので、変換回数がある回数(EISPACKでは30回)をこえると return させる様にしている。

一般にこの様な constant はなるべく避けられる様にあるべきである。

(ii) 固有ベクトルの normalization

ライブラリで一般に異なるが ユークリッド・ノルムを1にするのが良いと思われる。

(iii) 固有値固有ベクトルの計算誤差

近似的な固有値固有ベクトルの値を用いてそれらの誤差を求める機能をライブラリに持たせてはどうかと思われる。文献(2) p.637 の方法で実際の手続きは文献(7)によるのが一方法で Gerschgorin の定理を利用するものである。

参考文献および資料

(1) 京都大学大型計算機センター開発資料

EVVIS, EIGENP (作成者 星野聰 1970年)

(2) Wilkinson, J. H. (1965), The Algebraic Eigenvalue problem, Clarendon Press.

(3) Smith, B.T, J. M. Boyle, B. S. Garbow, Y. Ikebe, V. C. Klema, C. B. Moler, (1974). Matrix Eigensystem Routines – EISPACK guide, Springer (Lecture Notes in Computer Science Vol. 6)

(4) Stewart, G.W. (1970) Incorporating Origin Shifts into QR Algorithm for Symmetric Tridiagonal Matrices, Comm. ACM, 13, 365–367.

同じく

Stewart, G.W (1970), Algorithm 384, Eigenvalues and Eigenvectors of a Real Symmetric Matrix, Comm. ACM, 13, 369–371

(ただしプログラム内の shift の計算に用いられる変数について REAL K1, K2 が抜けているので修正必要)

(5) Wilkinson, J.H. (1968), Global Convergence of Tridiagonal QR Algorithm with Origin Shifts, Linear Algebra and its Applications, 1, 409–420.

(6) Wilkinson, J. H and Reinsch, C. (1971), Handbook for Automatic Computation, vol. II, Linear Algebra, Part II, Springer.

(7) Varah, J.M. (1968), Rigorous machine bounds for the Eigensystem of a General Complex Matrix, Math. Comp. 22, 793–801.