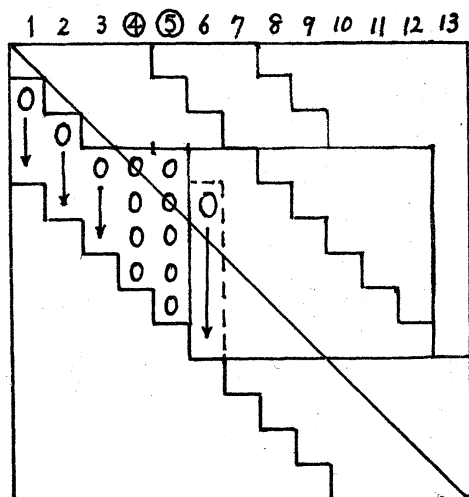


特異または特異に近い帯行列の三角化と二重対角化.

日立中研 村田 健郎

1. はじめに ナビア・ストークス系などを有限要素法によって離散化するとき、特異な行列に見舞われることがある。そのとき、その行列の階数を知る、その他の必要を痛感したので、表記の問題をとり上げるようになった。ところが、密行列に対してならば問題なく採用できるアルゴリズムが、帯に対しては特別の工夫を要することが判った。

初めにアルゴリズムの原型を次頁、次々頁に示す。次頁がガウス消去法、次々頁がハウスホルダー法に基づくものである。これらは、下図に示すように、特異のとき、帯巾がひろがる。それを、帯巾をひろげないでう



まくやるよう改造しようというわけである。

§2 で帯ガウス、§3 で帯ハウスホルダーに基づくものを示す。

さて、行列の特異値、すなわち $A^T A$ の固有値を求めるために、その前段階としてハウスホルダー変換によって二重対角化を行うが、

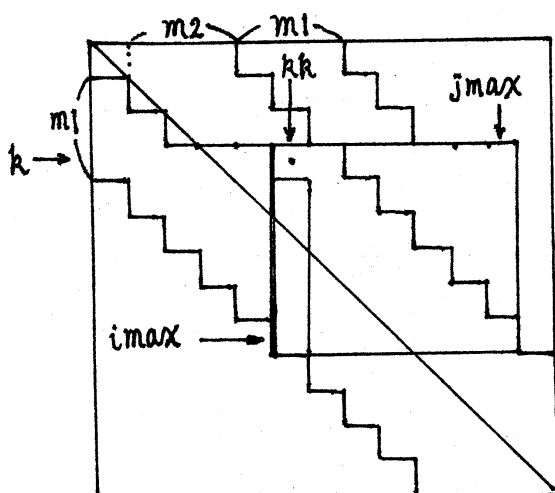
そこでも通常のアルゴリズムを帯に適用すると帯巾がひろがって実用にならぬ。その対策法を§4に示す。その方法は、以前御紹介した対称帯行列に対する三重対角化法と類似の方法である。

プログラム GLUBR2 の原型

```

iY = 0
do kk = 1, n
  k = kk - iY ; imax = min(kk + m1, n)
  amax = 0.0 ; ipk = k
  do i = k, imax
    aik = abs(a[i, k])
    if amax < aik then
      ipk = i ; amax = aik
  ip[k] = ipk ; jmax = min(kk + m1 + m2, n)
  if amax > eps then
    if k ≠ ipk then
      do j = kk, jmax  a[k, j] ⇔ a[ipk, j]
      do i = k + 1, imax
        t = -a[i, kk] / a[k, kk] ; a[i, kk] = t
        do j = kk + 1, jmax
          a[i, j] = a[i, j] + t * a[k, j]
      else iY = iY + 1

```



[プログラム の 要 点]

- 消去段数 kk と、ピボット方程式番号 k とを分離し、関係：
 $k = kk - iY$
 で 結 ぶ。
- 方程式が特異でなければ、 $k = kk$ のまゝ、終りまで推移する。
- $n - iY$ が行列の階数(rank)である。

プログラム HQRR2 の原型

```

ir = 0
do kk = 1, n
  k = kk - ir ; imax = min(kk + m1, n)
  sum = 0.0
  do i = k, imax
    sum = sum + a[i, kk]**2
  sk = sqrt(sum) ; jmax = min(kk + m1 + m2, n)
  if sk > eps then
    hk = sk * (sk + abs(a[k, kk])) ; ak = 1/hk
    if a[k, kk] < 0 then sk = -sk
    a[k, kk] = a[k, kk] + sk
    do j = kk + 1, jmax p[j - kk] = 0.0
    do i = k, imax
      awi = ak * a[i, kk]
      do j = kk + 1, jmax
        p[j - kk] = p[j - kk] + a[i, j] * awi
      wk = -a[k, kk] ; a[k, kk] = -sk
      do j = kk + 1, jmax
        a[k, j] = a[k, j] + wk * p[j - kk]
      do i = k + 1, imax
        wi = -a[i, kk]
        do j = kk + 1, jmax
          a[i, j] = a[i, j] + wi * p[j - kk]
    else ir = ir + 1

```

【ノート】 通常のハウスホルダー三角化プログラムは、 k と kk と同じものを使っている。上のプログラムでも、行列が特異でなければ、 k と kk とは同じままで終りまで推移する。

2. 帯ガウス

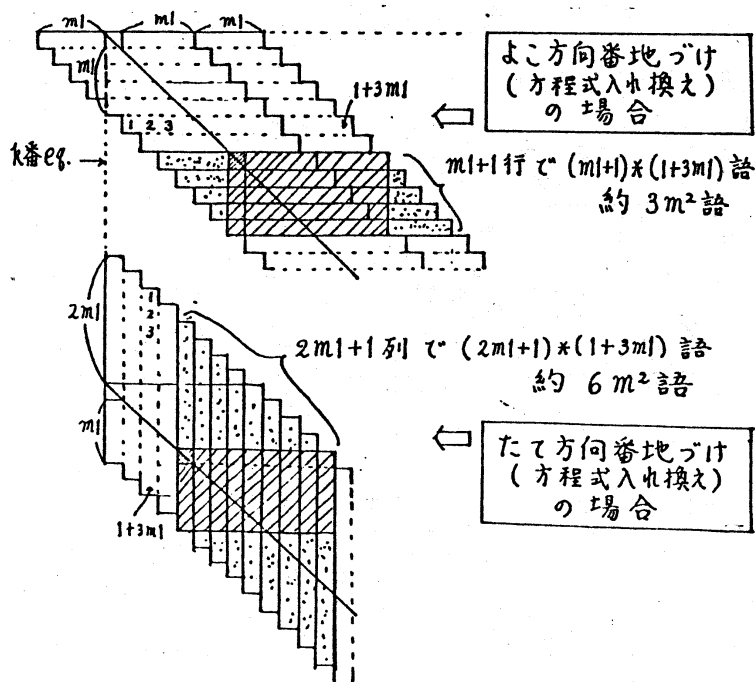
帯ガウスのうち、'方程式入れ換え方式の部分軸選択'によるものについて述べる。番地づけのし方に、よこ方向と、たて方向の二通りのし方があるが、方程式入れ換え方式にとっては、よこ方向番地づけがよい。そのとき Working Set を $2m^2$ 語におさめることができる。

ここに、 m は帯半巾、Working Set とは、プログラムの主要部が実効的に要求する実メモリ容量のこと。主要部とは、最も深いループを含む二重ループの部分だと思えばよい。

〔表1〕帯ガウスとりまとめ表

番地づけ方向	Working Set (*)
よこ方向	$2m^2$ 語 ($3m^2$ 語)
たて方向	$4m^2$ 語 ($6m^2$ 語)

(*) 内の数字は、普通のプログラム技法による場合である。
(下図) これによるときは、特異のとき、帯巾がひろがってしまう。



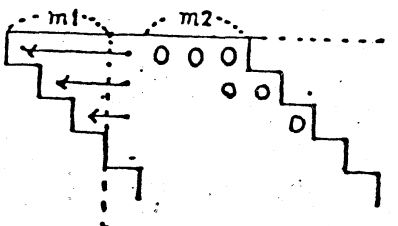
次頁に示すアルゴリズムは、Working Set は $2m^2$ 語であり、特異のときには $n \times n$ がその行列の階数となるよう仕組んである。(特異でないときは文献(1)にある。)

GLUBR2 (以下左 off diag. を $m1$, 右 off diag. を $m2$ として)

```

iY = 0 ; m = m1 + 1
do 20 i = 1, m1
  do 10 j = 1, i + m2
    ar[j, i] = ar[m - i + j, i]
    ar[m - i + j, i] = 0
  do 90 kk = 1, n
    k = kk - iY ; imax = min(kk + m1, n)
    amax = 0.0 ; ipk = k
    do 30 i = k, imax
      aik = abs(ar[1, i])
      if aik > amax then
        amax = aik ; ipk = i
    ip[k] = ipk ; jmax = min(m + m2, n - k + 1)
    if amax > eps then
      if k ≠ ipk then
        do 40 j = 1, jmax ar[j, k] ⇔ ar[j, ipk]
        do 60 i = k + 1, imax
          t = -ar[1, i] / ar[1, k]
          do 50 j = 2, jmax
            ar[j - 1, i] = ar[j, i] + t * ar[j, k]
          ar[jmax, i] = 0.0
          if iY = 0 then ac[i - k, k] = t
        else
          iY = iY + 1
          do 80 i = k, imax
            do 70 j = 2, jmax
              ar[j - 1, i] = ar[j, i]
            ar[jmax, i] = 0.0

```



【アルゴリズムの要旨】

- do 20 のループ : $i = 1$ から $m1$ までの行を、初めに $m-i$ ほど左にずらす。
- do 50 のループ : (特異でないとき) ガウス変換をやったのち 1 ほど左にずらす。
- do 80 のループ : (特異のとき) ガウス変換はやらす、1 ほど左にずらす。

3. 帯ハウスホルダ三角分解

帯に対して高精度計算をしたいときには、帯ハウスホルダ三角分解をすすめる。特に、特異性に関する精密診断のためには、この方が確かである。前節に示したガウスによるものでは、特異値そのものは変ってしまうのであった。

行列 A の特異値とは、行列 $A^T A$ の固有値の平方根のことであつた。ハウスホルダ変換 QA は、特異値を不変に保つ。

$$(\because Q^T Q = I \text{ のとき、} (QA)^T (QA) = A^T Q^T QA = A^T A)$$

ハウスホルダ変換行列： $Q = I - a w w^T$ ，ここに、 a はスカラー， w はベクトルで、

$$S = \text{sgrt}(a_{kj}^2 + a_{k+1,j}^2 + \dots + a_{k+l,j}^2)$$

$$w^T = (0, \dots, 0, a_{kj} \pm S, a_{k+1,j}, \dots, a_{k+l,j})$$

$$a = 1 / (S^2 + |a_{kj}| S)$$

を考える。通常のハウスホルダ三角化に於いては、中央段での Q_k を、上の式の j を k にとつたものを使うが、我々はこの節と次節で、 k と j が大いに異なるものでも、必要に応じて自由に使う。さて、3頁の‘原型’プログラムによるときは、 $S_k < \text{eps}$ となつて ir が増すにつれて帯巾がひろがる。(その様子は1頁の図の如くである。)

次頁のプログラムだと Working Set $2m^2$ 語でうまく行つて呉れる。特異のとき、得られた $n-ir$ 値が行列の階数である。

HARR2

```

iY = 0 ; m = m1+1
do i = 1, m1
  do j = 1, i+m2
    ar[j,i] = ar[m+j-i,i] ; ar[m+j-i,i] = 0
  do kk = 1, n
    k = kk - iY ; imax = min(kk+m1, n) ; sum = 0.0
    do i = k, imax
      sum = sum + ar[1,i]**2
    sk = sqrt(sum) ; jkmax = min(1+m1+m2, n-k+1)
    if sk > eps then
      hk = sk * (sk + abs(ar[1,k])) ; ak = 1/hk
      if ar[1,k] < 0.0 then sk = -sk
      ar[1,k] = ar[1,k] + sk
      if iY = 0 then
        do i = k, imax ac[i-k+1, k] = ar[1,i]
        do jk = 1, jkmax p[jk] = 0.0
        do i = k, imax
          awi = ak * ar[1,i]
          do jk = 2, jkmax
            p[jk] = p[jk] + awi * ar[jk,i]
          wk = -ar[1,k] ; ar[1,k] = -sk
          do jk = 2, jkmax
            ar[jk, k] = ar[jk, k] + wk * p[jk]
          do i = k+1, imax
            wi = -ar[1,i]
            do jk = 2, jkmax
              ar[jk-1, i] = ar[jk, i] + wi * p[jk]
            ar[jkmax, i] = 0.0
        else
          iY = iY + 1
          do i = k, imax
            do jk = 2, jkmax
              ar[jk-1, i] = ar[jk, i]
            ar[jkmax, i] = 0.0

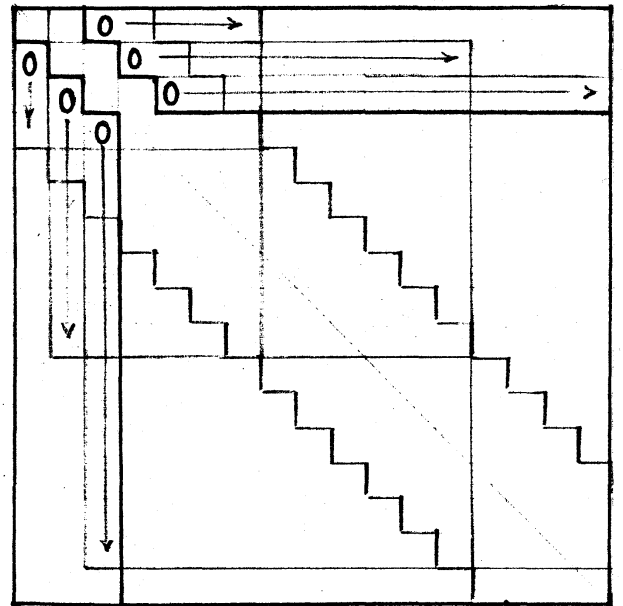
```

4. 特異値分解のための二重対角化.

左から掛けるハウスホルダ変換 Q_k と 右から掛けるハウスホルダ変換 P_k を交互に $k=1, 2, \dots$, について行うことにより、もとの行列 A を、特異値を変えないで二重対角化する方法があり、特異値分解 (SVD) の前処理として使用されている。ところが、この方法を帯行列に対して行うと、帯巾が途中で段階でひろがって非実用的である。

途中で段階に於ける帯巾の増大を一定値以内に収めてうまく二重対角化する方法を発見したのでその概要を紹介したい。

初めに、普通の方法で、帯巾が、際限なくひろがる様子を示しておこう。下図の例では $k=3$ 段目で残りの部分が完全に密行列化している。



さて、初めに、前節の方法によって三角化してのち、それをうまく帯巾をあまりひろげないで二重対角化する方法を示そう。(次頁)

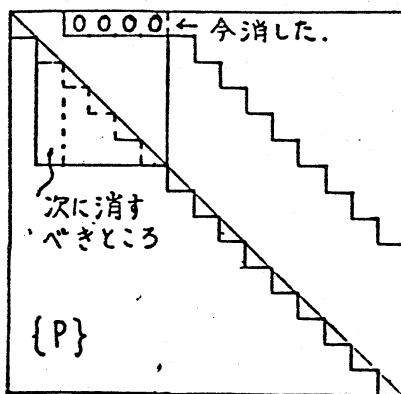
この方法は、後で示す諸方法とくらべて、所要演算ステップ数、所要メモリ容量共に大きい、 $(6mn^2$ 積和, $6mn$ 語) 判り易い。

$\{ l := m_1 + m_2 + 1, l_1 := m_1 + m_2 - 1, l_2 = m_1 + m_2 \text{ として } \}$

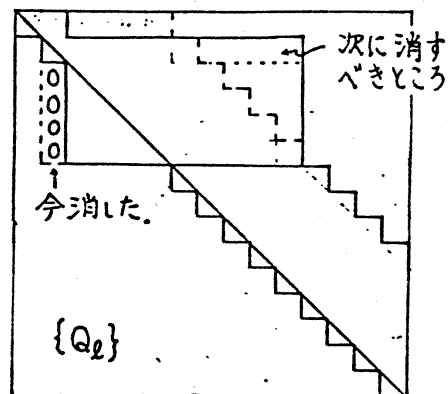
for $k := 1$ to $n-2$ do

{P}	$k_2 := \min(k + m_1 + m_2, n) ;$
	$a[k, k+2], \dots, a[k, k_2]$ を消すための変換 $A := AP$ すなわち k 段の二重対角化の主操作
	$kl := k+1 ; \{ kl \text{ は } k \text{ local の略. このあと二重対角化の後始末} \}$
	while $kl < n$ do
{Q _l }	$kl_1 := \min(kl + l_1, n)$
	$a[kl+1, kl], \dots, a[kl_1, kl]$ を消す変換 $A := Q_l A$
	$kl_2 := kl + l_2 ; kl_3 := \min(kl_2 + l_1, n) ;$
	if $kl_2 < n$ then
{P _l }	$a[kl, kl_2+1], \dots, a[kl, kl_3]$ を消す $A := AP_l$
	$kl := kl + l_2$

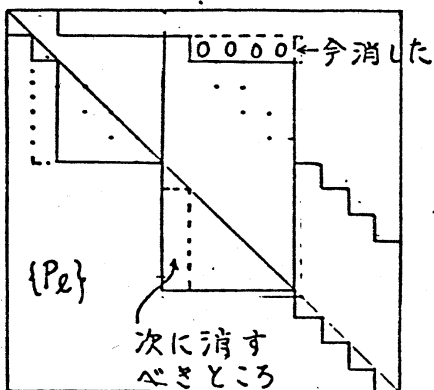
(1)



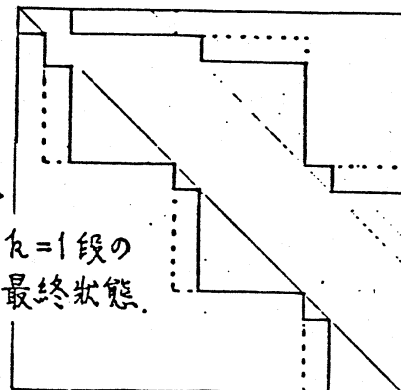
(2)



(3)



(4)



次に直接二重対角する方法を示す。こちらは複雑な代りに
 $4mn^2$ 回の積和, 所要メモリ $4mn$ 語である。

for $k := 1$ to $n-1$ do

$km1 := \min(k+m1, n)$

$a[k+1, k]$ 以下を消すため, $w = (0, \dots, a[k, k] \pm s, \dots, a[km1, k], 0, \dots)^T$ による $Q = (I - \alpha ww^T)$ による変換 $A := QA$ を行う。 S1

$km2 := k+m2$;
 if $km2 < n$ then

$a[k, km2+1] \dots$ (より右) を消す変換 $A := AP$ を行う。 S2

$kl := \min(k+m2+m1, n)$;

while $kl < n$ do

$kl1 := \min(kl+m1, n)$;

$a[kl+1, kl-m1]$ 以下を消す変換 $A := QA$ を行う。 S3

$kl2 := kl+m2$;

if $kl2 < n$ then

$a[kl, kl2+1], \dots$ (より右) を消す変換 $A := AP$ を行う。 S4

$kl := kl+m2+m1$

$a[k, k+2] \dots$ (より右) を消す変換 $A := AP$ を行う。 S5

$kl := \min(k+m1+1, n)$;

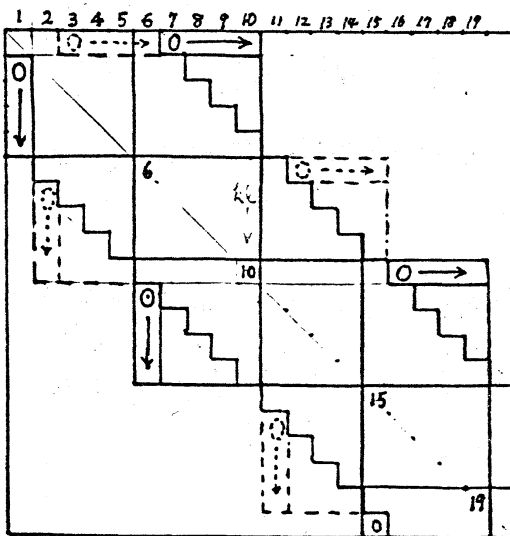
while $kl < n$ do

$a[kl+1, kl-m1]$ 以下を消す変換 $A := QA$ を行う。 S6

if $kl+m2 < n$ then

$a[kl, kl+m2+1] \dots$ (より右) を消す変換 $A := AP$ を行う。 S7

$kl := kl+m2+m1$



左図は, $m1=4, m2=5$ のときのもの。

・S1, S2 を行ったのち, $kl=10$ となり,
 S3, S4 を行い $kl=19$ となる。S3 を
 行い S4 は行なわず $kl=28$ となる..
 次いで S5 を行い $kl=6$ となり, S6
 , S7 を行い $kl=15$ となり....

・実線が, $a[k+1, k]$ 以下を消すこと,
 およびそれに伴う あと始末を示している。

・点線が, $a[k, k+2], \dots$ (より右) を消すこと,
 およびそれに伴う あと始末を示している。

この、直接二重対角化の方法は、前の三角化経由の方法とくらべて、演算時間、所要総メモリ容量、Working Set共に小さいのだが、ページスワップの総ページ数はむしろ大きい。各 k 段毎に、帯の右下端まで二回ページスワップをひきおこすがゆえである。(帯巾は $\frac{2}{3}$ だが、それが2倍されて $\frac{4}{3}$ 倍)

第三の方法は、三角化 $\rightarrow$ 三角の帯を半分に縮小 $\rightarrow$ 二重対角化という手順をふむものである。これは、 $5mn^2$ 積和、 $4mn$ 語であるが、ページスワップに関しては最も有利である。

$4mn$ 語が、所与の実メモリ容量を大巾に超えるときには、この方法が最も実用的である。次頁に、三角の帯を半分に縮小するアルゴリズムの大筋を示す。

〔附記〕 実は、三角化されたものを二重対角化するアルゴリズムで、各 k 段毎に Q_k 変換と P_k 変換を右下端までやらないで、必要最小限のところまで進めたら次の段の P, Q_k, P_k 変換を並行的に行うことにすれば、ページスワップは半減する。(例えば、9頁下段の図の(3)の次の Q_k を行ったら、 $k=2$ に対する P 変換をやる。以下、 $k=1$ 段の Q_k, P_k 変換と、 $k=2$ 段の Q_k, P_k 変換を並行列に行う。)

他のアルゴリズムに対しても同様の技巧が適用可能である。しかし、こういう技巧は、ターンアラウンドタイムが我慢ならぬ程に長くなったとき、止むを得ずやることであろう。

```

 $l1 := m1 + m2$  ;  $l := l1 + 1$  ;  $mh1 := l1 \text{ div } 2$  ;  $mh2 := l1 - mh1$  ;
 $k := 1$  ;
while  $k + mh2 < n$  do

```

```

     $k21 := \max(k + mh2 + mh1, n - 1)$ 

```

```

    for  $kk := k + mh2$  to  $k21$  do

```

$a[kk - mh2, kk + 1], \dots$ (の右) を消す $A := AP$ 変換.
 $P = I - \alpha w w^T$ に使う $w^T = (0, \dots, 0, a[k - mh2 + s, kk], \dots)$

```

     $kl := k + mh2$  ;

```

```

    while  $kl < n$  do

```

```

        for  $ii := kl$  to  $\min(kl + mh1, n - 1)$  do

```

$a[ii + 1, ii], \dots$ (の下) を消す $A := QA$ 変換

```

         $kll := kl + l1$  ;

```

```

        if  $kll < n$  then

```

```

            for  $jj := kll$  to  $\min(kll + mh1, n - 1)$  do

```

$a[jj - l1, jj + 1], \dots$ (の右) を消す $A := AP$ 変換

```

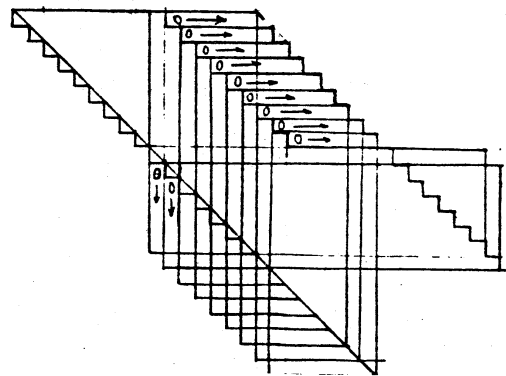
         $kl := kl + l1$ 

```

```

     $k := k + mh2$ 

```



[文献]

- 1) J.H. Wilkinson · C. Reinsch Linear Algebra (1971) Springer
Contribution I/6, I/8, I/10