連立一次方程式の数値解に対する精度保証付き数値計算法

南畑 淳史

早稲田大学大学院 基幹理工学研究科 博士課程 2 年

2013 年 12 月 27 日

問題

連立一次方程式

$$Ax = b, \tag{1}$$

に対して数値解 (近似解) の検証を考える。
ただし、A を $n \times n$ の実行列、b を n 次の実ベクトルとする。

本報告では、与えられた近似解 $\tilde{x}$ に対して、真の解 x^* との誤差を

$$|\tilde{x}_i - x_i^*| \leq \epsilon_i,$$

のように成分毎に評価をする方法について述べる。特に、コンピュータを用いて数学的に正しく評価する方法について述べる。

連立一次方程式の誤差評価法

- 前処理行列 R を用いて評価する方法
- 特異値を用いて評価する方法

前処理行列 R を用いて評価する方法とは

$$RAx = Rb$$

単位行列に近いような連立一次方程式に置き換えて誤差評価を行う方法

前処理行列 R を用いて評価する方法の問題点

- どうやって丸め誤差を考慮するか
- 丸め誤差を考慮したとして、どのように RA が正則であるかを確かめるか
- 誤差評価はどうするのか

目次

- 区間演算
- 前処理行列を用いた誤差評価法 -丸め誤差を考慮しない場合-
    - 狭義優対角行列の性質を用いた誤差評価法
    - H 行列の性質を用いた誤差評価法
- 前処理行列を用いた誤差評価法 -丸め誤差を考慮する場合-
    - 狭義優対角行列の性質を用いた誤差評価法
    - H 行列の性質を用いた誤差評価法
    - 数値実験
- 高速精度保証法
- まとめ

区間演算

- 区間の定義
- 区間同士の四則演算
- IEEE754における丸め規則
- 機械区間演算

$\mathbb{R}$

$\mathbb{R}$ を実数を要素に持つ区間の集合とする。

$\mathbb{F}$

$\mathbb{F}$ を IEEE754 基準に従う浮動小数点の集合とする。

区間集合 $\mathbb{IR}$

$\mathbb{IR}$ を実数を要素に持つ閉区間の集合とする。

区間集合 $\mathbb{IF}$

$\mathbb{IF}$ を浮動小数点数を要素に持つ閉区間の集合とする。

区間

$-\infty < \underline{x} < \overline{x} < \infty$ を満たす $\underline{x}, \overline{x} \in \mathbb{R}$ について、$[\underline{x}, \overline{x}]$ は区間

$$[\underline{x}, \overline{x}] = \{x \mid \underline{x} \le x \le \overline{x}\}$$

を表す。区間の表記は $[\underline{x}, \overline{x}]$、もしくは太文字 $\mathbf{x}$ を使用する。

区間同士の四則演算

二つの区間 $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{IR}$ が与えられたときに、二項演算 $\circ \in \{+, -, \times, /\}$ を定義する。

$$\mathbf{x} \circ \mathbf{y} := \{x \circ y \mid \text{for } \forall x \in \mathbf{x}, \text{for } \forall y \in \mathbf{y}\}.$$

区間同士の四則演算

$\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{IF}$ として、二項演算 $\circ \in \{+, -, \times, /\}$ は

$$
\begin{aligned}
\mathbf{x} + \mathbf{y} &= [\underline{x} + \underline{y}, \overline{x} + \overline{y}] \\
\mathbf{x} - \mathbf{y} &= [\underline{x} - \overline{y}, \overline{x} - \underline{y}] \\
\mathbf{x} \times \mathbf{y} &= [\min(\underline{x}\underline{y}, \overline{x}\overline{y}, \underline{x}\overline{y}, \overline{x}\underline{y}), \max(\underline{x}\underline{y}, \overline{x}\overline{y}, \underline{x}\overline{y}, \overline{x}\underline{y})] \\
\mathbf{x} / \mathbf{y} &= [\min(\underline{x}/\underline{y}, \overline{x}/\overline{y}, \underline{x}/\overline{y}, \overline{x}/\underline{y}), \\
&\quad \max(\underline{x}/\underline{y}, \overline{x}/\overline{y}, \underline{x}/\overline{y}, \overline{x}/\underline{y})], \quad (0 \notin \mathbf{y})
\end{aligned}
$$

である。

IEEE754(浮動小数点演算の標準規格)

- 浮動小数点演算の計算で最も広く採用されている標準規格
- IEEE 754 の丸め規則は 4 種類
- IEEE Std 754-2008 の丸め規則は 5 種類

IEEE754 における丸め規則

上向き丸め $x \in \mathbb{R}$ に対して、x 以上の浮動小数点の中で最も小さい数に丸める。これを $\triangle : \mathbb{R} \to \mathbb{F}$ と表す。

下向き丸め $x \in \mathbb{R}$ に対して、x 以下の浮動小数点の中で最も大きい数に丸める。これを $\triangledown : \mathbb{R} \to \mathbb{F}$ と表す。

最近点丸め $x \in \mathbb{R}$ に対して、浮動小数点の中で最も近い数に丸める。これを $\square : \mathbb{R} \to \mathbb{F}$ と表す。ただし、このような点が 2 点ある場合には仮数部の最後のビットが偶数である浮動小数点に丸める。

今回用いない丸め規則

チョッピング丸め

最近点丸め (roundTiesToAway) IEEE754 2008 に記載されている。

IEEE754 における丸め規則の性質

$x, y \in \mathbb{F}$ に対して、各丸めを用いて二項演算 $\circ \in \{+, -, \times, /\}$ を行うとき、

$$x \circ y \le \triangle(x \circ y)$$

$$\triangledown(x \circ y) \le x \circ y$$

$$\square(x \circ y) - u|\square(x \circ y)| \le x \circ y \le \square(x \circ y) + u|\square(x \circ y)|$$

を満たす。ただし、倍精度浮動小数点数を用いた場合、$u = 2^{-53}$ である。

機械区間演算

$\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{IF}$ として、二項演算 $\circ \in \{+, -, \times, /\}$ は丸め規則を用いて、

$$
\begin{aligned}
\mathbf{x} + \mathbf{y} &= [\underline{x} + \underline{y}, \overline{x} + \overline{y}] \\
&\subseteq [\triangledown(\underline{x} + \underline{y}), \triangle(\overline{x} + \overline{y})] \\
\mathbf{x} - \mathbf{y} &= [\underline{x} - \overline{y}, \overline{x} - \underline{y}] \\
&\subseteq [\triangledown(\underline{x} - \overline{y}), \triangle(\overline{x} - \underline{y})]
\end{aligned}
$$

機械区間演算

$$
\begin{aligned}
\mathbf{x} \times \mathbf{y} &= [\min(\underline{x}\underline{y}, \overline{x}\overline{y}, \underline{x}\overline{y}, \overline{x}\underline{y}), \max(\underline{x}\underline{y}, \overline{x}\overline{y}, \underline{x}\overline{y}, \overline{x}\underline{y})] \\
&\subseteq [\min(\triangledown(\underline{x}\underline{y}), \triangledown(\overline{x}\overline{y}), \triangledown(\underline{x}\overline{y}), \triangledown(\overline{x}\underline{y})), \\
&\quad \max(\triangle(\underline{x}\underline{y}), \triangle(\overline{x}\overline{y}), \triangle(\underline{x}\overline{y}), \triangle(\overline{x}\underline{y}))] \\
\mathbf{x}/\mathbf{y} &= [\min(\underline{x}/\underline{y}, \overline{x}/\overline{y}, \underline{x}/\overline{y}, \overline{x}/\underline{y}), \\
&\quad \max(\underline{x}/\underline{y}, \overline{x}/\overline{y}, \underline{x}/\overline{y}, \overline{x}/\underline{y})], \quad (0 \notin \mathbf{y}) \\
&\subseteq [\min(\triangledown(\underline{x}/\underline{y}), \triangledown(\overline{x}/\overline{y}), \triangledown(\underline{x}/\overline{y}), \triangledown(\overline{x}/\underline{y})), \\
&\quad \max(\triangle(\underline{x}/\underline{y}), \triangle(\overline{x}/\overline{y}), \triangle(\underline{x}/\overline{y}), \triangle(\overline{x}/\underline{y}))], \quad (0 \notin \mathbf{y})
\end{aligned}
$$

と包含できる。

区間演算まとめ

- IEEE754 の丸め規則を用いれば区間演算が可能
- 四則演算で構成される計算は区間演算に置き換えるだけで真の解を包み込める

区間演算パッケージ

- INTLAB
- Boost Interval

前処理行列を用いた誤差評価法 -丸め誤差を考慮しない場合-

準備

$A = (a_{ij}), B = (b_{ij}) \in \mathbb{R}^{n \times n}$ とする。

- $A \leq B$ は $a_{ij} \leq b_{ij}$ for all (i, j) を意味する。
- $|A| = (|a_{ij}|) \in \mathbb{R}^{n \times n}$ を意味する。
- $O \in \mathbb{R}^{n \times n}$ はすべての要素が 0 の行列を意味する。
- $\mathbf{0} \in \mathbb{R}^{n}$ はすべての要素が 0 のベクトルを意味する。
- $e \in \mathbb{R}^{n}$ はすべての要素が 1 のベクトルを意味する。
- $\rho(A)$ は A のスペクトル半径とする。

準備

- A の対角行列 D とは要素に d_{ij} を持つ行列とする。ただし、

$$d_{ij} = \begin{cases} a_{ii} & (i = j) \\ 0 & (i \neq j) \end{cases}.$$

- A の非対角行列 E とは要素に e_{ij} を持つ行列とする。ただし、

$$e_{ij} = \begin{cases} 0 & (i = j) \\ a_{ij} & (i \neq j) \end{cases}.$$

$$D = \begin{pmatrix} a_{11} & & & 0 \\ & a_{22} & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & a_{nn} \end{pmatrix}, E = \begin{pmatrix} 0 & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & 0 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & a_{n-1n} \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn-1} & 0 \end{pmatrix}$$

準備

狭義優対角行列

$A = (a_{ij}) \in \mathbb{R}^{n \times n}$ が

$$|a_{ii}| > \sum_{j=1, i \neq j}^{n} |a_{ij}|, \quad i = 1, 2, \cdots, n$$

を満たすとき狭義優対角行列と呼ぶ。

単調行列

$A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ が任意の $x \in \mathbb{R}^n$ に対して、

$$Ax \geq \mathbf{0} \Rightarrow x \geq \mathbf{0}$$

を満たすとき A を単調行列と呼ぶ。

準備

Z 行列

$A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ が $a_{ij} \leq 0$ for $i \neq j$ を満たすとき Z 行列と呼ぶ。

M 行列

$A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ が Z 行列で単調行列であるとき、M 行列と呼ぶ。

比較行列 $\langle A \rangle$

$A = D + E$ とする。ただし、D を A の対角行列、E を A の非対角行列とする。このとき、比較行列 $\langle A \rangle$ は

$$\langle A \rangle := |D| - |E|$$

とする。

準備

H 行列

$A = (a_{ij}) \in \mathbb{R}^{n\times n}$ の比較行列 $\langle A \rangle$ が M 行列ならば、A を H 行列と呼ぶ。

$$\langle A \rangle = \begin{pmatrix} |a_{11}| & -|a_{12}| & \cdots & -|a_{1n}| \\ -|a_{21}| & |a_{22}| & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & -|a_{n-1n}| \\ -|a_{n1}| & \cdots & -|a_{nn-1}| & |a_{nn}| \end{pmatrix}$$

準備

定理 (e.g.[2,p.86])

ある行列ノルムにおいて $||A|| < 1$ ならば $I - A$ は正則で

$$(I - A)^{-1} = I + A + A^2 + \cdots$$

である。

定理 (e.g.[2,p.36])

狭義優対角行列ならば正則である。

[2] 山本 哲朗, 行列解析の基礎 Advanced 線形代数, サイエンス社, 2010

定理 4.1

連立一次方程式 $Ax = b$ の近似解 $\tilde{x}$ と A の近似逆行列 R が求められたする。行列 $G = RA - I$ が不等式

$$||G|| < 1$$

を満たすとき、x^* を $Ax = b$ の真の解として

$$||\tilde{x} - x^*|| \leq \frac{||R(A\tilde{x} - b)||}{1 - ||G||}$$

が成り立つ。

証明

$||G|| < 1$ ならば、$I - G$ は正則で

$$(I - G)^{-1} = I + G + G^2 + \cdots$$

である。x^* を $Ax = b$ の真の解として、近似解との誤差は

$$\begin{aligned}
||\tilde{x} - x^*|| &= ||(RA)^{-1}R(A\tilde{x} - b)|| \\
&\leq ||(RA)^{-1}|| \; ||R(A\tilde{x} - b)|| \\
&= ||(I - G)^{-1}|| \; ||R(A\tilde{x} - b)|| \\
&= ||I + G + G^2 + \cdots|| \; ||R(A\tilde{x} - b)|| \\
&\leq (1 + ||G|| + ||G||^2 + \cdots) \; ||R(A\tilde{x} - b)|| \\
&= \frac{||R(A\tilde{x} - b)||}{1 - ||G||}.
\end{aligned}$$

定理 4.2

連立一次方程式 $Ax = b$ の近似解 $\tilde{x}$ と A の近似逆行列 R が求められたとする。また、RA の対角行列を D、RA の非対角行列を E とする。このとき、RA が狭義優対角行列ならば、x^* を $Ax = b$ の真の解として

$$||\tilde{x} - x^*||_\infty \leq \frac{||D^{-1}R(A\tilde{x} - b)||_\infty}{1 - ||D^{-1}E||_\infty}$$

が成り立つ。

証明

RA が狭義優対角行列ならば $||D^{-1}RA - I||_\infty < 1$ である。従って前処理行列に $D^{-1}R$ を選び、定理 4.1 を用いれば良い。

H 行列の性質を用いた誤差評価定理

定理 4.3(Fiedler-Ptâk)

$A = (a_{ij})$ が Z 行列のとき、次の条件は同値である。

- A が正則で $A^{-1} \geq O$ (A は M 行列である)
- $Ax > \mathbf{0}$ となる非負ベクトル x が存在する。
- R が $R \geq A$ となる対角行列ならば R は正則で D を A の対角行列とおくとき、$\rho(R^{-1}(D-A)) < 1$

Remark

A が M 行列ならば、$b > 0$ として、$Ay = b$ の近似解を $\tilde{y}$ とすれば、

$$\tilde{y} > \mathbf{0}, \quad A\tilde{y} > \mathbf{0}$$

が期待できる。また、近似解は Jacobi 法や Gauss-Seidel 法などで求まる。

定理 4.4

行列 A が H 行列ならば、

$$|A^{-1}| \leq \langle A \rangle^{-1}$$

を満たす。

定理 4.5

連立一次方程式 $Ax = b$ の近似解 $\tilde{x}$ と A の近似逆行列 R が求められたとする。このとき、$\langle RA \rangle v > \mathbf{0}$ を満たす $v > \mathbf{0}$ が存在するならば、RA は H 行列であり、x^* を $Ax = b$ の真の解として

$$|\tilde{x} - x^*| \le \alpha v$$

が成り立つ。ただし、α は $r = R(A\tilde{x} - b)$、$u = \langle RA \rangle v$ として、

$$\alpha = \max_{1 \le i \le n} \frac{|r_i|}{u_i}$$

とする。

証明

RA が H 行列ならば、

$$\begin{aligned} |\tilde{x} - x^*| &\leq |(RA)^{-1}||R(A\tilde{x} - b)| \\ &\leq \langle RA \rangle^{-1}|R(A\tilde{x} - b)|. \end{aligned}$$

α を $\alpha = \max_{1 \leq i \leq n} \frac{|r_i|}{u_i}$ とすると、$|R(A\tilde{x} - b)| \leq \alpha \langle RA \rangle v$ を満たす。また、$O \leq \langle RA \rangle^{-1}$ より、

$$\begin{aligned} \langle RA \rangle^{-1}|R(A\tilde{x} - b)| &\leq \langle RA \rangle^{-1}(\alpha \langle RA \rangle v) \\ &= \alpha v \end{aligned}$$

を満たす。

前処理行列を用いた誤差評価法 -丸め誤差を考慮する場合-

準備

mag 関数

mag は区間 $\mathbf{x} \in \mathbb{IR}$ に対して、

$$\mathrm{mag}(\mathbf{x}) := \max\{|x| : x \in \mathbf{x}\}$$

を返す関数とする。区間ベクトル $\mathbf{y} = (\mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2, \cdots, \mathbf{y}_n)^T \in \mathbb{IR}^n$、区間行列 $\mathbf{Z} = (\mathbf{z}_{ij}) \in \mathbb{IR}^{n\times n}$ に対して、

$$\mathrm{mag}(\mathbf{y}) := \begin{pmatrix} \mathrm{mag}(\mathbf{y}_1) \\ \mathrm{mag}(\mathbf{y}_2) \\ \vdots \\ \mathrm{mag}(\mathbf{y}_n) \end{pmatrix}, \quad \mathrm{mag}(\mathbf{Z}) := \begin{pmatrix} \mathrm{mag}(\mathbf{z}_{11}) & \mathrm{mag}(\mathbf{z}_{12}) & \cdots & \mathrm{mag}(\mathbf{z}_{1n}) \\ \mathrm{mag}(\mathbf{z}_{21}) & \mathrm{mag}(\mathbf{z}_{22}) & \cdots & \mathrm{mag}(\mathbf{z}_{2n}) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathrm{mag}(\mathbf{z}_{n1}) & \mathrm{mag}(\mathbf{z}_{n2}) & \cdots & \mathrm{mag}(\mathbf{z}_{nn}) \end{pmatrix}$$

を返す関数とする。

準備

mig 関数

mig は区間 $\mathbf{x} \in \mathbb{IR}$ に対して、

$$\mathrm{mig}(\mathbf{x}) := \min\{|x| : x \in \mathbf{x}\}$$

を返す関数とする。区間ベクトル $\mathbf{y} = (\mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2, \cdots, \mathbf{y}_n)^T \in \mathbb{IR}^n$、区間行列 $\mathbf{Z} = (\mathbf{z}_{ij}) \in \mathbb{IR}^{n\times n}$ に対して、

$$\mathrm{mig}(\mathbf{y}) := \begin{pmatrix} \mathrm{mig}(\mathbf{y}_1) \\ \mathrm{mig}(\mathbf{y}_2) \\ \vdots \\ \mathrm{mig}(\mathbf{y}_n) \end{pmatrix}, \quad \mathrm{mig}(\mathbf{Z}) := \begin{pmatrix} \mathrm{mig}(\mathbf{z}_{11}) & \mathrm{mig}(\mathbf{z}_{12}) & \cdots & \mathrm{mig}(\mathbf{z}_{1n}) \\ \mathrm{mig}(\mathbf{z}_{21}) & \mathrm{mig}(\mathbf{z}_{22}) & \cdots & \mathrm{mig}(\mathbf{z}_{2n}) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathrm{mig}(\mathbf{z}_{n1}) & \mathrm{mig}(\mathbf{z}_{n2}) & \cdots & \mathrm{mig}(\mathbf{z}_{nn}) \end{pmatrix}$$

を返す関数とする。

準備

区間に対する $\langle \mathbf{A} \rangle$

$\mathbf{A} = \mathbf{D} + \mathbf{E}$ とする。ただし、$\mathbf{D}$ を $\mathbf{A}$ の対角行列、$\mathbf{E}$ を $\mathbf{A}$ の非対角行列とする。このとき、$\langle \mathbf{A} \rangle$ は

$$\langle \mathbf{A} \rangle := \mathrm{mig}(\mathbf{D}) - \mathrm{mag}(\mathbf{E})$$

とする。

例えば、

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} [3, 4] & [1, 2] \\ [-1, -2] & [-3, 4] \end{pmatrix}, \langle \mathbf{B} \rangle = \begin{pmatrix} 3 & -2 \\ -2 & 0 \end{pmatrix}$$

狭義優対角行列の性質

定理 5.1

A を n 次の正方行列とする。このとき、比較行列 $\langle A \rangle$ が狭義優対角行列ならば、A もまた狭義優対角行列である。

定理 5.2

$A = (a_{ij})$ が n 次狭義優対角行列、$B = (b_{ij})$ を n 次行列とする。A の対角行列を D_A、A のの非対角行列を E_A、B の対角行列を D_B、B の非対角行列を E_B とする。このとき、

$$|D_A| \leq |D_B| \quad \text{and} \quad |E_B| \leq |E_A|$$

ならば、B は狭義優対角行列である。

狭義優対角行列の性質の区間への応用

定理 5.3

$\mathbf{A}$ の対角行列を $\mathbf{D}$、$\mathbf{A}$ の非対角行列を $\mathbf{E}$ とする。

$$\langle \mathbf{A} \rangle := \mathrm{mig}(\mathbf{D}) - \mathrm{mag}(\mathbf{E})$$

が狭義優対角行列ならば、任意の $A \in \mathbf{A}$ は狭義優対角行列である。

Remark

区間行列に含まれる行列がすべて狭義優対角行列かどうかを調べるのは $\langle \mathbf{A} \rangle$ を調べれば良い。また、同時に区間行列に含まれるすべての行列の正則性も確認出来る。

証明

任意の $A \in \mathbf{A}$ の比較行列 $\langle A \rangle$ は

$$[\mathrm{mig}(\mathbf{D}) - \mathrm{mag}(\mathbf{E}), \mathrm{mag}(\mathbf{D}) - \mathrm{mig}(\mathbf{E})]$$

の元となる。定理 5.2 より、$\langle \mathbf{A} \rangle$ が狭義優対角行列ならば、区間 $[\mathrm{mig}(\mathbf{D}) - \mathrm{mag}(\mathbf{E}), \mathrm{mag}(\mathbf{D}) - \mathrm{mig}(\mathbf{E})]$ に含まれるすべての行列は狭義優対角行列であり、定理 5.1 より区間行列 $\mathbf{A}$ に含まれるすべての行列は狭義優対角行列である。

定理 5.6

連立一次方程式 $Ax = b$ の近似解 $\tilde{x}$、A の近似逆行列 R、行列積 RA を包み込む区間 $\mathbf{A}'$ が得られたとする。このとき、$\mathbf{A}'$ の対角行列を $\mathbf{D}$、$\mathbf{A}'$ の非対角行列を $\mathbf{E}$ とする。

$$\langle \mathbf{A}' \rangle = \mathrm{mig}(\mathbf{D}) - \mathrm{mag}(\mathbf{E})$$

が狭義優対角行列ならば、区間行列 $\mathbf{A}'$ の任意の行列は狭義優対角行列であり、連立一次方程式 $Ax = b$ の真の解 x^* は

$$||\tilde{x} - x^*||_\infty \leq \frac{||\mathrm{mig}(\mathbf{D})^{-1} R(A\tilde{x} - b)||_\infty}{1 - ||\mathrm{mig}(\mathbf{D})^{-1}\mathrm{mag}(\mathbf{E})||_\infty}$$

を満たす。

証明

RA の対角行列を D、RA の非対角行列を E とする。定理 5.1 より、$\langle \mathbf{A}' \rangle$ が狭義優対角行列ならば、$\mathbf{A}'$ に含まれるすべての行列は狭義優対角行列である。従って、RA は狭義優対角行列であり、連立一次方程式 $Ax = b$ の真の解 x^* は

$$||\tilde{x} - x^*||_\infty \leq \frac{||D^{-1}R(A\tilde{x} - b)||_\infty}{1 - ||D^{-1}E||_\infty}$$

を満たす。また、$D \in \mathbf{D}$、$E \in \mathbf{E}$ であることから、

$$\begin{aligned}\frac{||D^{-1}R(A\tilde{x} - b)||_\infty}{1 - ||D^{-1}E||_\infty} &= \frac{||\,|D^{-1}|\,R(A\tilde{x} - b)||_\infty}{1 - ||\,|D^{-1}|\,|E|\,||_\infty} \\ &\leq \frac{||\mathrm{mig}(\mathbf{D})^{-1}R(A\tilde{x} - b)||_\infty}{1 - ||\mathrm{mig}(\mathbf{D})^{-1}\mathrm{mag}(\mathbf{E})||_\infty}\end{aligned}$$

を満たす。

定理 5.5(Neumaier)

区間行列 $\mathbf{A}$ の対角行列を $\mathbf{D}$、$\mathbf{A}$ の非対角行列を $\mathbf{E}$ とする。
$\langle \mathbf{A} \rangle = \mathrm{mig}(\mathbf{D}) - \mathrm{mag}(\mathbf{E})$ が M 行列ならば、任意の $A \in \mathbf{A}$ は H 行列であり、

$$|A^{-1}| \le \langle \mathbf{A} \rangle^{-1}$$

を満たす。

定理 5.7

連立一次方程式 $Ax = b$ の近似解 $\tilde{x}$、A の近似逆行列 R、行列積 RA を包み込む区間 $\mathbf{A}'$ が得られたとする。このとき、$\mathbf{A}'$ の対角行列を $\mathbf{D}$、$\mathbf{A}'$ の非対角行列を $\mathbf{E}$ とする。

$$\langle \mathbf{A}' \rangle = \mathrm{mig}(\mathbf{D}) - \mathrm{mag}(\mathbf{E})$$

が M 行列、つまり $\mathbf{0} < \langle \mathbf{A}' \rangle v$ を満たす $v > \mathbf{0}$ が存在するならば、

$$|\tilde{x} - x^*| \leq \alpha v$$

を満たす。ただし、$r = R(A\tilde{x} - b), u = \langle \mathbf{A}' \rangle v$ とし、

$$\alpha = \max_{1 \leq i \leq n} \frac{|r_i|}{u_i}.$$

証明

定理 5.5 より $\langle \mathbf{A}' \rangle$ が M 行列ならば、$\mathbf{A}'$ に含まれる行列はすべて H 行列であることから、RA も H 行列である。連立一次方程式 $Ax = b$ の真の解 x^* は

$$|\tilde{x} - x^*| \leq \langle RA \rangle^{-1} |R(A\tilde{x} - b)|$$

を満たす。また、$RA \in \mathbf{A}'$ であることから、定理 5.5 より

$$\begin{aligned} |\tilde{x} - x^*| &\leq \langle RA \rangle^{-1} |R(A\tilde{x} - b)| \\ &\leq \langle \mathbf{A}' \rangle^{-1} |R(A\tilde{x} - b)| \end{aligned}$$

となり、定理 4.5 より

$$|\tilde{x} - x^*| \leq \alpha v$$

を満たす。

よく用いられる定理の紹介

準備

定理

$||A||_\infty < 1$ ならば $I - A$ も $I - |A|$ も正則で

$$|(I - A)^{-1}| \leq (I - |A|)^{-1}$$

である。

証明

$||A||_\infty = ||\ |A|\ ||_\infty$ より $||\ |A|\ ||_\infty < 1$ である。

$$\begin{aligned} |(I - A)^{-1}| &\leq |I + A + A^2 + \cdots| \\ &\leq I + |A| + |A|^2 + \cdots \\ &= (I - |A|)^{-1} \end{aligned}$$

定理 5.8

連立一次方程式 $Ax = b$ の近似解 $\tilde{x}$、A の近似逆行列 R、行列積 RA を包み込む区間 $\mathbf{A}'$ が得られたとする。また、$\mathbf{G} = \mathbf{A}' - I$ とする。n 次元ベクトル κ を

$$\kappa \geq \left(\sum_{j=1}^{n} \mathrm{mag}(\mathbf{G}_{1j}), \cdots, \sum_{j=1}^{n} \mathrm{mag}(\mathbf{G}_{nj})\right)$$

とすると、$||\kappa||_\infty < 1$ ならば、

$$|\tilde{x} - x^*| \leq |R(A\tilde{x} - b)| + \alpha\kappa$$

が成り立つ。ただし、$r = R(A\tilde{x} - b)$ として、$\alpha = \max_{1 \leq i \leq n} \frac{|r_i|}{1-\kappa_i}$ とする。

証明

$||\kappa||_\infty < 1$ ならば、任意の $G \in \mathbf{G}$ に対して、$I - G$ は正則である。従って RA も正則である。このとき、真の解 x^* と近似解 $\tilde{x}$ は

$$
\begin{aligned}
& |\tilde{x} - x^*| \\
= \ & |A^{-1}R^{-1}R(A\tilde{x} - b)| \\
= \ & |(I + (RA - I)(I - (RA - I))^{-1})R(A\tilde{x} - b)| \\
\leq \ & |R(A\tilde{x} - b)| + |RA - I||(I - (RA - I))^{-1}||R(A\tilde{x} - b)| \\
\leq \ & |R(A\tilde{x} - b)| + |RA - I|(I - |RA - I|)^{-1}|R(A\tilde{x} - b)| \\
\leq \ & |R(A\tilde{x} - b)| + \mathrm{mag}(\mathbf{G})(I - \mathrm{mag}(\mathbf{G}))^{-1}|R(A\tilde{x} - b)| \\
\leq \ & |R(A\tilde{x} - b)| + \alpha\ \mathrm{mag}(\mathbf{G})\left(I - \mathrm{mag}(\mathbf{G})\right)^{-1}\left(I - \mathrm{mag}(\mathbf{G})\right)e \\
\leq \ & |R(A\tilde{x} - b)| + \alpha\kappa.
\end{aligned}
$$

定理 5.9(Rump)

$A \in \mathbb{R}^{n\times n}$、$R$ を近似逆行列、行列積 RA を包み込む区間 $\mathbf{A}'$ が得られたとする。また、$\langle \mathbf{A}' \rangle$ の対角行列を D、$\langle \mathbf{A}' \rangle$ の非対角行列を E とする。このとき、$\langle \mathbf{A}' \rangle v > \mathbf{0}$, $v > \mathbf{0}$ を満たす v が存在するならば、

$$|(RA)^{-1}| \le D^{-1} + vw^T$$

を満たす。ただし、w は $u := \langle \mathbf{A}' \rangle v$ として、
$w_k := \max_{1\le i\le n} \frac{\{ED^{-1}\}_{ik}}{u_i}$ とする。

証明

$\langle \mathbf{A}' \rangle v > \mathbf{0}$, $v > \mathbf{0}$ を満たす v が存在するならば、
$|(RA)^{-1}| \le \langle \mathbf{A}' \rangle^{-1}$ を満たす。また、

$$I - \langle \mathbf{A}' \rangle D^{-1} = ED^{-1}$$

に左から $\langle \mathbf{A}' \rangle^{-1}$ をかけると

$$\langle \mathbf{A}' \rangle^{-1} - D^{-1} = \langle \mathbf{A}' \rangle^{-1} ED^{-1} \Leftrightarrow \langle \mathbf{A}' \rangle^{-1} = D^{-1} + \langle \mathbf{A}' \rangle^{-1} ED^{-1}$$

w を $w_k := \max_{1 \le i \le n} \frac{\{ED^{-1}\}_{ik}}{u_i}$ と取れば、v を用いて $\langle \mathbf{A}' \rangle^{-1} ED^{-1}$ の上界は

$$\langle \mathbf{A}' \rangle^{-1} ED^{-1} \le \langle \mathbf{A}' \rangle^{-1} \langle \mathbf{A}' \rangle v w^T$$

となる。よって、

$$\langle \mathbf{A}' \rangle^{-1} \le D^{-1} + v w^T.$$

定理 5.10(Rump)

$A \in \mathbb{R}^{n\times n}$, $b, \tilde{x} \in \mathbb{R}^n$、$R$ を近似逆行列、行列積 RA を包み込む区間 $\mathbf{A}'$ が得られたとする。また、$\langle \mathbf{A}' \rangle$ の対角行列を D、$\langle \mathbf{A}' \rangle$ の非対角行列を E とする。このとき、$\langle \mathbf{A}' \rangle v > \mathbf{0}$, $v > \mathbf{0}$ を満たす v が存在するならば、

$$|A^{-1}b - \tilde{x}| \le (D^{-1} + vw^T)|R(b - A\tilde{x})|$$

を満たす。ただし w は $u := \langle \mathbf{A}' \rangle v$ として、

$$w_k := \max_{1\le i\le n} \frac{\{ED^{-1}\}_{ik}}{u_i}$$

とする。

v の計算法

$\langle \mathbf{A}' \rangle$ が M 行列ならば、$b > 0$ として、$\langle \mathbf{A}' \rangle y = b$ の近似解を $\tilde{y}$ とすれば、

$$\tilde{y} > \mathbf{0}, \quad A\tilde{y} > \mathbf{0}$$

が期待できる。従って $v = \tilde{y}$ とすれば良い。また、近似解は Jacobi 法や Gauss-Seidel 法などで求まる。

定理 5.11

$A \in \mathbb{R}^{n\times n}$, $b, \tilde{x} \in \mathbb{R}^n$ とする。R を近似逆行列とし、行列積 RA を含む区間 $\mathbf{A}'$ が得られたとする。また、$\langle \mathbf{A}' \rangle$ の対角行列を D、$\langle \mathbf{A}' \rangle$ の非対角行列を E とする。$\langle \mathbf{A}' \rangle v > \mathbf{0}$, $v > \mathbf{0}$ を満たす v が存在するならば、以下が成り立つ。

$$|\tilde{x} - x^*| \le D^{-1}(|R(A\tilde{x} - b)| + \alpha E v).$$

ただし、$u := \langle \mathbf{A}' \rangle v$ として、$\alpha := \max_{1\le i\le n} \frac{\{|R(A\tilde{x}-b)|\}_i}{u_i}$

証明

$\langle \mathbf{A}' \rangle v > \mathbf{0}$, $v > \mathbf{0}$ を満たす v が存在するならば、RA は H 行列である。また、$\langle RA \rangle = D_{RA} - E_{RA}$ とする。ただし、D_{RA} は対角行列で E_{RA} は非対角行列とする。このとき、近似解 $\tilde{x}$ と真の解は

$$
\begin{aligned}
& |\tilde{x} - x^*| \\
\leq\ & \langle D_{RA}^{-1} RA \rangle^{-1} D_{RA}^{-1} |R(A\tilde{x} - b)| \\
=\ & (I - D_{RA}^{-1} E_{RA})^{-1} D_{RA}^{-1} |R(A\tilde{x} - b)| \\
\leq\ & D_{RA}^{-1} |R(A\tilde{x} - b)| + D_{RA}^{-1} E_{RA} (I - D_{RA}^{-1} E_{RA})^{-1} D_{RA}^{-1} |R(A\tilde{x} - b)| \\
=\ & D_{RA}^{-1} (|R(A\tilde{x} - b)| + E_{RA} \langle RA \rangle^{-1} |R(A\tilde{x} - b)|)
\end{aligned}
$$

を満たす。

証明 2

また、定理 4.5 および定理 5.5 を用いて、

$$\begin{aligned} |\tilde{x} - x^*| &\leq D_{RA}^{-1}(|R(A\tilde{x} - b)| + E_{RA}\left\langle RA\right\rangle^{-1}|R(A\tilde{x} - b)|) \\ &\leq D^{-1}(|R(A\tilde{x} - b)| + E\left\langle \mathbf{A}'\right\rangle^{-1}|R(A\tilde{x} - b)|) \\ &\leq D^{-1}(|R(A\tilde{x} - b)| + \alpha E v). \end{aligned}$$

数値実験

数値実験では

- 定理 5.6(Alg.B と表記)
- 定理 5.10(Alg.R と表記)
- 定理 5.11(Alg.M と表記)

の 3 つアルゴリズムを比較する。

- 行列サイズは 5000 次元、条件数は 10^5 と 10^{10} の 2 パターン
- テスト行列は INTLAB の randmat 関数にて作成
- H 行列の検証のための v は $\langle \mathbf{A}' \rangle y = e$ の近似解 $\tilde{y}$

数値実験 1

Table : 相対精度を使った比較 (n=5000,cond=10^5)

Algorithm	min	max	average
Alg.B	9.5192×10^{-9}	8.32711×10^{-5}	1.86320×10^{-7}
Alg.R	1.0466×10^{-9}	4.07017×10^{-6}	1.18815×10^{-8}
Alg.M	1.0466×10^{-9}	4.07017×10^{-6}	1.18815×10^{-8}

Table : 相対精度を使った比較 (n=5000,cond=10^{10})

Algorithm	min	max	average
Alg.B	8.45618×10^{-4}	1.04556×10^{5}	5.13797×10^{2}
Alg.R	4.50659×10^{-5}	1.92919×10^{3}	6.84721×10^{-1}
Alg.M	4.49925×10^{-5}	1.92533×10^{3}	6.8327×10^{-1}

高速精度保証法

内積、行列積の真の解を包み込むには

- 四則演算を機械区間演算に置き換えれば簡単に実装可能

内積、行列積に機械区間演算を適応する上での問題点

- 二項演算ごとに丸めの規則の変更を要求され、速度が低下

内積の丸めを用いた誤差評価と事前誤差評価

定理 6.1

$x, y \in \mathbb{F}^n$ として、内積に対する $\bigtriangledown, \bigtriangleup, \square$ は内積の計算途中に表れるすべての二項演算をその丸め規則で計算したものとする。このとき、

$$\bigtriangledown(x^T y) \le x^T y \le \bigtriangleup(x^T y),$$

$$\square(x^T y) - \gamma_n |x|^T |y| \le x^T y \le \square(x^T y) + \gamma_n |x|^T |y|$$

を満たす。ただし、倍精度浮動小数点数の場合、$u = 2^{-53}$ として、$\gamma_n = \frac{nu}{1-nu}$ とする。

行列積の丸めを用いた誤差評価と事前誤差評価

定理 6.2

$A, B \in \mathbb{F}^{n\times n}$ として、行列積に対する $\triangledown, \triangle, \square$ は行列積の計算途中に表れるすべての二項演算をその丸め規則で計算したものとする。このとき、

$$\triangledown(AB) \le AB \le \triangle(AB),$$

$$\square(AB) - \gamma_n|A||B| \le AB \le \square(AB) + \gamma_n|A||B|$$

を満たす。ただし、倍精度浮動小数点数の場合、$u = 2^{-53}$ として、$\gamma_n = \frac{nu}{1-nu}$ とする。

行列積の丸めを用いた誤差評価と事前誤差評価まとめ

- 丸め変更 2 回と行列積 2 回で行列積の真の解が包み込める。
- 最近点丸めを用いた行列積の事前誤差評価は元の行列を使って表現できる。

準備

$A, B \in \mathbb{F}^{n\times n}$ とする。このとき、$\| \, |A||B| \, \|_\infty = \| \, |A|(|B|e) \, \|_\infty$

行列積の事前誤差評価を用いた誤差評価法

定理 6.3

$A \in \mathbb{R}^{n\times n}$、$R$ を近似逆行列、行列積 RA を最近点丸めで計算した $\square(RA)$ が得られたとする。このとき、
$\|\,|\square(RA) - I| + \gamma_n|R||A|\,\|_\infty < 1$ ならば、近似解 $\tilde{x}$ と真の解 x^* は

$$|\tilde{x} - x^*| \le |R(A\tilde{x} - b)| + \alpha\big(|\square(RA) - I|e + \gamma_n|R|(|A|e)\big)$$

を満たす。ただし $r = R(A\tilde{x} - b)$、
$\kappa = \big(|\square(RA) - I|e + \gamma_n|R|(|A|e)\big)$ として $\alpha = \frac{|r_i|}{1-\kappa_i}$ とする。

証明 1

$\| \, |\Box(RA) - I| + \gamma_n |R||A| \, \|_\infty < 1$ ならば $\|\Box(RA) - I\|_\infty < 1$ より、$\Box(RA)$ の対角要素は $0 < \{\Box(RA)\}_{ii} < 2$ を満たす。
$\mathbf{A}' = [\Box(RA) - \gamma_n|A||B|, \Box(RA) + \gamma_n|A||B|]$ とすれば定理 6.2 より RA を含む区間となる。また、$\| \, |\Box(RA) - I| + \gamma_n|R||A| \, \|_\infty < 1$ より行列 $I - |\Box(RA) - I| - \gamma_n|R||A|$ は M 行列であり、定理 5.4 を用いて $I - |\Box(RA) - I| - \gamma_n|R||A| \leq \langle \mathbf{A}' \rangle$ より $\langle \mathbf{A}' \rangle$ も M 行列である。また、定理 5.5 より

$$|(RA)^{-1}| \leq \langle \mathbf{A}' \rangle \leq (I - |\Box(RA) - I| - \gamma_n|R||A|)^{-1}.$$

証明 2

従って、近似解 $\tilde{x}$ と真の解 x^* は

$$
\begin{aligned}
|\tilde{x} - x^*| &= |A^{-1}R^{-1}R(A\tilde{x} - b)| \\
&= |(I + (RA - I)(RA)^{-1}|R(A\tilde{x} - b)| \\
&\leq |R(A\tilde{x} - b)| + |RA - I||(RA)^{-1}||R(A\tilde{x} - b)| \\
&\leq |R(A\tilde{x} - b)| + \\
&\quad (|\square(RA) - I| + \gamma_n|R||A|) \\
&\quad (I - |\square(RA) - I| - \gamma_n|R||A|)^{-1}|R(A\tilde{x} - b)| \\
&\leq |R(A\tilde{x} - b)| + \alpha(|\square(RA) - I| + \gamma_n|R||A|)e.
\end{aligned}
$$

まとめ

- 機械区間演算
  - 丸め規則を用いて簡単に実現可能
- 連立一次方程式の精度保証法
  - 正則性が分かっている行列が重要

本報告で扱えなかった内容

- 疎行列を係数に持つ連立一次方程式の精度保証法
- 高精度な逆行列、行列分解アルゴリズム