

平成 30 年 6 月 23 日現在

機関番号：14301

研究種目：挑戦的萌芽研究

研究期間：2015～2017

課題番号：15K13457

研究課題名(和文)可積分アルゴリズムのブレイクダウンへの挑戦

研究課題名(英文)Challenge to Breakdown of Integrable Algorithms

研究代表者

中村 佳正(Nakamura, Yoshimasa)

京都大学・情報学研究科・教授

研究者番号：50172458

交付決定額(研究期間全体):(直接経費) 3,000,000円

研究成果の概要(和文):ランチョスの前進型アルゴリズムを多段拡張してmultistep progressive algorithm(MPA)と名付け,MPAによる連立1次方程式の反復法を定式化した.ランチョス法はランチョスパラメータに関する零割の発生によってブレイクダウンしやすい.本研究によって,離散戸田方程式による四則演算でランチョスパラメータ計算を高精度に実行できるようになった結果,悪性として知られるヒルベルト行列を係数行列とする連立1次方程式についても,MPAによってブレイクダウンなく求解できることが示された.

研究成果の概要(英文):A multistep extension of the progressive algorithm by Lanczos named the MPA is introduced and its application to linear systems is discussed. It is well-known that the Lanczos algorithm may easily breakdown caused by a division by zero of the Lanczos parameters. In this research project the Lanczos parameters are computed very accurately by using the four basic operations of arithmetic through the discrete Toda equation. Then even an ill-conditioned linear system having the Hilbert matrix as coefficient matrix is shown to be solved by using the MPA without any breakdown.

研究分野: Applied Integrable Systems

キーワード: 可積分アルゴリズム ブレイクダウン ランチョス法 連立1次方程式 特異点閉じ込め

## 1. 研究開始当初の背景

理論的にブレイクダウンしない「可積分アルゴリズム」としては、正定値3重対角行列に対するqd法 (quotient difference/商差法), さらには, それを直交多項式の変換理論に基づいて変数変換したdLV法がある. これらはいずれも変数の正值性が保たれ, 計算された固有値/特異値は高い相対精度をもつが, 収束次数は1次に過ぎない. 精度と速度の両面で優れたアルゴリズムを設計するには, 高次収束しつつもブレイクダウンを避けるための手法に関して具体例に基づく基礎研究を開始する必要がある.

## 2. 研究の目的

本研究は, 可積分アルゴリズムであるqd法に対して, 離散可積分系の特異点閉じ込め性と直交多項式の変換理論を駆使して, 初期値の情報を失うことなくブレイクダウン, すなわち, ゼロ割による計算停止を回避し, 高い相対精度を保って, 固有値計算, 特異値計算など必要な量の計算を高速に続行する手法を開発することを目的としている.

## 3. 研究の方法

対象を狭くすることで, 理論的にブレイクダウンしないといういわば安全サイドで高次収束する計算法を定式化するのではなく, あえてブレイクダウンの可能性のある場合にも可積分アルゴリズムの特異点を閉じ込めてゼロ割が起きないようにすることで, 高速性と高精度性を同時に実現する研究を開始する.

まず, 基礎研究として, 特異点閉じ込め性によるブレイクダウンの回避として, qd法の漸化式の従属変数変換で得られるエータアルゴリズム, さらには, それを変数変換したイプシロンアルゴリズムの漸化式を研究する. ある初期値に対してはゼロ割に

起因するブレイクダウンが発生する. 離散可積分系の特異点閉じ込め法では微小量 $\varepsilon$ だけ平行移動することでゼロ割を回避するが, このような方法では数値誤差は大きくなるため数値解析には不適である. そこで, イプシロンアルゴリズムの最近接項間の漸化式の代わりに, 少し先のステップの情報を取り入れることでゼロ割の発生する項を消去したミドルレンジの漸化式を導出する. これにより, ゼロ割の特異点が局在する場合でも, 数値誤差が増大することなく, ゼロ割を避けて計算を進行させることができるようになる.

## 4. 研究成果

直交多項式論に基づいて正值性によってブレイクダウンを起こさないことを保証するアルゴリズムとして正定値対称な係数行列をもつ連立一次方程式に対する共役勾配法 (CG法), 共役残差法 (CR法) に注目し, qd法を用いてランチョスパラメータをより少ない計算量と高い相対精度で逐次計算する, **multistep progressive algorithm**

(MPA) と名付けるランチョスの前進型アルゴリズムの多段拡張を定式化した. ランチョス法はブレイクダウンしやすいという欠点を持っている. これは数値誤差の蓄積によってランチョスペクトルの直交性が失われることに起因するが, ランチョスパラメータの計算ではゼロ割の発生として現れる. 本研究によって, ランチョスペクトルの内積計算ではなく離散戸田方程式による比較的単純な四則演算でランチョスパラメータの高精度計算を実行できるようになった. 悪性として知られるヒルベルト行列を係数行列とする連立1次方程式についても, MPAによってブレイクダウンなく求解できることが示された.

なお, 対称性を仮定しない場合, ランチョス法の考え方は双ランチョス法として有

効であるが、この場合、ランチョスパラメータは数値誤差を考慮しなくともゼロとなりうる。このため、基礎研究で述べた特異点閉じ込め性によるブレークダウンの回避を必要とする。この部分については3年間の研究期間に着手することはできず、研究を継続している。

<引用文献>

① Yoshimasa Nakamura, Hiroto Sekido, An application of the discrete-time Toda lattice to the progressive algorithm by Lanczos and related problems, *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 51(2018),174001 (20pp)

5. 主な発表論文等

[雑誌論文] (計7件)

① Masato Shinjo, Masashi Iwasaki, Akiko Fukuda, Emiko Ishiwata, Yusaku Yamamoto, Yoshimasa Nakamura, An asymptotic analysis for an integrable variant of the Lotka-Volterra prey-predator model via a determinant expansion technique, *Cogent Mathematics*, 査読有, 2(2015), 1046538

② Kanae Akaiwa, Yoshimasa Nakamura, Masashi Iwasaki, Hisayoshi Tsutsumi, Koichi Kondo, A finite-step construction of totally nonnegative matrices with specified eigenvalues, *Numerical Algorithms*, 査読有, 70(2015), 469-484, DOI: 10.1007/s11075-015-9957-x

③ Munehiro Nagata, Masatsugu Hada, Masashi Iwasaki, Yoshimasa Nakamura, Eigenvalue clustering of coefficient matrices in the iterative stride reductions for linear systems, *Computers and Mathematics with Applications*, 査読有, 71(2016), 349-355, DOI: 10.1016/j.camwa.2015.11.022

④ Masato Shinjo, Masashi Iwasaki, Kanae Akaiwa, Yoshimasa Nakamura, An extended

Fibonacci sequence associated with the discrete hungry Lotka-Volterra system, *International Journal of Biomathematics*, 査読有, 10(2017), DOI:

10.1142/S1793524517500437

⑤ Akihiko Tobita, Akiko Fukuda, Emiko Ishiwata, Masashi Iwasaki and Yoshimasa Nakamura, Monotonic convergence to eigenvalues of totally nonnegative matrices in an integrable variant of the discrete Lotka-Volterra system, in: *Eigenvalue Problems: Algorithms; Software and Applications*, in: *Petascale Computing*, T. Sakurai, S-L Zhang, T. Imakura, Y. Yamamoto, Y. Kuramashi, T. Hoshi, Eds., *Lecture Notes in Computational Science and Engineering (LNCSE)* 査読有, Vol.117, Springer, 2017, pp. 157-169

⑥ Kanae Akaiwa, Yoshimasa Nakamura, Masashi Iwasaki, Akira Yoshida, Koichi Kondo, An arbitrary band structure construction of totally nonnegative matrices with prescribed eigenvalues, *Numerical Algorithms*, 査読有, 75(2017), 1079-1101, DOI: 10.1007/s11075-016-0231-7

⑦ Yoshimasa Nakamura, Hiroto Sekido, An application of the discrete-time Toda lattice to the progressive algorithm by Lanczos and related problems, *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 査読有, 51(2018),174001 (20pp), DOI: 10.1007/s11075-016-0231-7

[学会発表] (計9件)

①石川貴弘, 新庄雅斗, 岩崎雅史, 中村佳正, 実対称5重対角行列の固有値に収束する解をもつ力学系とその離散化, 日本応用数学会年会, 金沢大学, 2015年9月9~11日

②岩崎雅史, 中村佳正, dLVアルゴリズム

に対する陽的な原点シフト導入について,  
日本応用数学会研究部会連合発表会, 神戸学院大学, 2016年3月4~5日

③ Yoshimasa Nakamura, Recent developments in integrable algorithms, 日本応用数学会年会 JSIAM-ANZIAM 特別セッション(招待講演), 北九州国際会議場, 2016年9月12~14日

④ Yoshimasa Nakamura, Aspects of integrable numerical algorithms, The Third China-Japan Joint Workshop on Integrable Systems 2016, Xian, China, 2016年8月19~22日

⑤ Yoshimasa Nakamura, Toward computational science for Big Data by accurate SVD code, Soul National University - Kyoto University Joint Workshop in Informatics, Soul National University, 2016年9月20~22日

⑥ 中村佳正, 關戸啓人, 離散戸田方程式(qd法)によるランチョスの前進アルゴリズムの多段拡張とその応用, 日本応用数学会研究部会連合発表会, 電気通信大学, 2017年3月6~7日

⑦ 新庄雅斗, 岩崎雅史, 中村佳正, 固有ベクトルを求めるためのツイスト分解の計算量削減, 第46回数値解析シンポジウム(NAS2017), グリーンパーク思い出の森, 2017年6月28~30日

⑧ 中村佳正, 応用可積分系分野の基礎方程式としての戸田格子方程式, 平成29年度応用数学会年会, 武蔵大学, 2017年9月6~8日

⑨ 澤薫, 中村佳正, ランチョス・フィリップスアルゴリズムの可積分性とその直交多項式への応用, 第14回応用数学会研究部会連合発表会, 大阪大学, 2018年3月15~16日

[図書] (計1件)

中村佳正, 高崎金久, 辻本諭, 尾角正人, 井ノ口順一著, 朝倉書店, 解析学百科:可積分系の数理, 2018, (第5章応用可積分系, 執筆分担) pp.363-428

[その他]

プログラムの公開:

<http://www-is.amp.i.kyoto-u.ac.jp/LAPROGNC/>

## 6. 研究組織

### (1)研究代表者

中村 佳正 (NAKAMURA, Yoshimasa)  
京都大学・大学院情報学研究科・教授  
研究者番号: 50172458

### (2)研究分担者

關戸 啓人 (SEKIDO, Hiroto)  
京都大学・国際高等教育院・特定講師  
研究者番号: 40718235