

機関番号：14301

研究種目：挑戦的萌芽研究

研究期間：2011～2013

課題番号：23654032

研究課題名(和文) 正值性をもつ数値計算法による相対誤差への挑戦

研究課題名(英文) A Challenge to Relative Errors by Numerical Algorithms with Positivity

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) 2,700,000円、(間接経費) 810,000円

研究成果の概要(和文)：このプロジェクトにおいて、まず、特異値計算のmdLVs法について特異値の摂動と前進誤差解析を行った。その結果、前進誤差解析の意味でmdLVs法の安定性を示した。次に、dLV法の漸化式に含まれる任意パラメータについての無限大極限を導入して漸化式をdLV 相似変換と名付けた。dLV 変換は浮動小数点数上の計算についての数値安定性を持ち、変数の正值性が保たれ、反復計算のもとで特異値に収束することが証明された。さらに、混合前進後退誤差解析によって、計算された特異値はdLV法に匹敵する高い相対精度をもつことが検証された。さらに、dLV 変換は前進安定であることも示された。

研究成果の概要(英文)：In this project, we investigate the perturbations on singular values and the forward errors of the mdLVs variables, which occur in the mdLVs algorithm, through two kinds of error analysis in floating point arithmetic. Therefore the forward stability of the mdLVs algorithm is proved. Next we present a new similarity transformation named the dLV- ∞ similarity transformation by considering the case where the discretization parameter $\delta(n)$ goes to infinity in the integrable dLV system. It is proved that the singular values of bidiagonal matrix are computable by using the dLV- ∞ transformation repeatedly. Therefore we clarify that the relative perturbations in the singular values are sufficiently small through the mixed forward-backward error analysis. We finally show that the dLV- ∞ transformation is forward stable.

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：数学・数学一般(含確率論・統計数学)

キーワード：固有値計算 特異値計算 相対誤差 正值性 可積分アルゴリズム 離散可積分系 漸近解析 行列式

1. 研究開始当初の背景

2006年に離散時間可積分系である離散口トカ・ボルテラ系(dLV)を用いて開発された特異値計算法 mdLVs 法では全ての変数の正值性が保証され、非常に高い相対精度で必ず2重対角行列の特異値に収束する。mdLVs 法の高い相対精度の鍵となったのが変数の正值性の保証である。原点シフトのない漸化式が減算を含まないことに加えて、差分ステップサイズ を正に選ぶことで桁落ちの恐れをなくしてきた。

2. 研究の目的

古典直交多項式による正值性の証明により、mdLVs 法が高い相対精度をもつ数学的メカニズムが明らかになっただけでなく、同様な正值性をもつ数値計算法が広く直交多項式、直交関数系に付随して実現できると予想されるに至った。本研究では、正值性をもつ数値計算法のクラスを一気に広げ、特異値計算だけでなく帯行列固有値問題においても、高い相対精度が保証された数値計算法を定式化する。

3. 研究の方法

mdLVs 法の成功で明らかとなった正值性が保証された相対精度の高い数値計算法のアイデアを十全に展開する。すなわち、(1)mdLVs 法の前進・後退誤差解析の意味での安定性を証明するとともに、(2)帯行列の特異値計算など対象を広げて、種々の離散可積分系や直交多項式に付随する相対精度の高い数値計算法を一気に引きずりだす。mdLVs 法同様、純国産でありながら世界標準の LAPACK を凌駕することがチャレンジ目標である。

本研究の着想は、標準解法のQR法が絶対誤差の意味での収束性しか保証していないという欠点を、離散可積分系という従来にない数学的原理に基づいて、変数の正值性

が保証された数値計算法を新たに開発して正面から乗り越えるものである。多くの離散可積分系は適当な補助変数の導入によって減算のない時間発展式を与えることが可能であり、極限操作により箱玉系のような超離散可積分系が導出されてきた。言い換えれば、離散可積分系では変数の正值性が保たれると期待できる。この結果、離散可積分系に基づく数値計算法は高い相対精度に恵まれることになる。

離散可積分系は日本を中心に大きな発展を遂げた数学分野であるが、本研究は離散可積分系のもつ豊かな機能数理を応用数学における新しい方法論として確立するためのステップと位置づけられる。

4. 研究成果

変数の正值性が保証された上2重対角行列の特異値計算法に、ルティスハウザ・フェルナンド・パーレットによる dqd 法、dqds 法、岩崎と研究代表者等による dLV 法、mdLVs 法がある。dLV 法、mdLVs 法によって計算された特異値は一般に dqd 法、dqds 法による特異値よりも高い相対精度。本研究は、dLV 法と mdLVs 法研究を出発点に、正值性をもつ数値計算法のクラスを一気に広げ、高い相対精度が保証された数値計算法を実現することを目的とする。

平成23年度は、研究代表者の指導学生である永田宗寛氏の協力のもとで以下の成果をあげることができた。

まず、dLV 法の漸化式について、前進後退の混合誤差解析と前進誤差解析を行い、計算された特異値に含まれる誤差の見積もりを行い、これら誤差解析の意味での安定性を示した。次に、dLV 法の漸化式に含まれる任意パラメータ についての無限大極限を導入して、定義された漸化式を dLV 変換と名付けた。dLV 変換は代数的には LR 変換に一致することから、1反復の計算

量は dLV 法よりは少なく、dqd 法と同程度である。dLV 変換は浮動小数点数上の計算についての数値安定性をもち、変数の正值性が保たれ、反復計算のもとで特異値に収束することが証明された。さらに、数値実験によって、計算された特異値は dLV 法に匹敵する高い相対精度をもつことが検証された。この結果、dLV 法の高い相対精度と dqd 法の高速度性を併せ持つ、新しい特異値計算法が定式化された。

平成24年度は、岩崎雅史氏、永田氏、木村欣司氏の協力のもとで以下の成果をあげることができた。dLV法の漸化式に含まれる任意パラメータを無限大とする極限をとることで前年度に定義されたdLV 変換に関する研究を継続し、dLV 変換の漸化式によって定まる数列は、与えられた上2重対角行列の特異値に収束することの厳密な証明を与えた。この特異値計算法をdLV 法と呼ぶ。さらに、浮動小数点数上の演算についてオーバーフローやアンダーフローが起きないという意味で前進安定性をもつことを示した。一方、dLV法の極限をとるために必要となった補助変数はdLV 法による高速特異値計算のための実装法を与えており、dqd法の最新コードであるLAPACK 3.4.2 と比較しても、dLV 法はなお高い相対精度をもつことが検証された。H25年度において正值性を壊さない原点シフト付きのdLV 法 (m2dLVs法)を開発して相対精度を悪化させることなく一層の高速化をはかるが、収束の終盤ではシフトなしのdLV 変換が多用されるため、dLV 法のもつ基本性能は非常に重要となろう。

非対称な帯行列の複素固有値を高精度計算する新しい算法として福田亜希子氏等によって提案された dhLV アルゴリズムがある。これも 2 重対角行列に対する dLV アルゴリズム同様、解の正值性が保証された離散可積分系 dhLV 系に基づく算法である。

dLV アルゴリズムの場合、解はハンケル行列式で表され、その漸近展開によって特異値への収束性が証明されている。これに対して dhLV 系ではカソラチ行列式が登場するためその漸近解析は滞っていた。

平成 25 年度において赤岩香苗氏、新庄雅斗氏や岩崎氏との共同研究により、カソラチ行列式の漸近展開公式が導出され、dhLV アルゴリズムの収束の別証明が得られた。一方、カソラチ行列式は dhLV 系とある種の変換で結ばれる dhToda 系の解を与える。この結果、totally nonnegative (TN)行列の高精度固有値計算の dhToda アルゴリズムが定式化される。このように、ハンケル行列式の漸近展開公式は、正值性と高い相対精度をもつ広いクラスの可積分アルゴリズムの理論解析の基礎となる結果である。

5 . 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文](計9件)

Kanae Akaiwa, Masashi Iwasaki, Koichi Kondo and Yoshimasa Nakamura, A tridiagonal matrix construction by the quotient difference recursion formula in the case of multiple eigenvalues, J. Math-for-Industry, **6**(2014), 未定.

Munehiro Nagata, Masashi Iwasaki and Yoshimasa Nakamura, Accurate similarity transformation derived from the discrete Lotka-Volterra system for bidiagonal singular values, Journal Calcolo **51**(2014), 305-317, DOI:10.1007/s10092-013-0085-5

You Takahashi, Masashi Iwasaki, Akiko Fukuda, Emiko Ishiwata, Yoshimasa Nakamura, An application

of centre manifold theory to the qd-type discrete Lotka-Volterra system, *Applicable Analysis*, **92**(2013), 586- 594.

Akiko Fukuda, Yusaku Yamamoto, Masashi Iwasaki, Emiko Ishiwata and Yoshimasa Nakamura, On a shifted LR transformation derived from the discrete hungry Toda equation, *Monatshefte fur Mathematik*. **170** (2013), 11-26.

Munehiro Nagata, Masashi Iwasaki and Yoshimasa Nakamura, Error analysis of the mdLVs algorithm for computing bidiagonal singular values, *Numerical Algorithms*, **61**(2012), 261-274,

DOI:10.1007/s11075-012-9607-5

Takumi Yamashita, Kinji Kimura, and Yoshimasa Nakamura, Subtraction-free recurrence relations for lower bounds of the minimal singular value of an upper bidiagonal matrix, *J. Math-for-Industry*, **4**(2012), 55-71.
Yosuke Hama, Akiko Fukuda, Yusaku Yamamoto, Masashi Iwasaki, Emiko Ishiwata and Yoshimasa Nakamura, On some properties of a discrete hungry Lotka-Volterra system of multiplicative type, *J. Math-for-Industry*, **4**(2012), 5-15.

Masashi Iwasaki and Yoshimasa Nakamura, Positivity of dLV and mdLVs algorithms for computing singular values, *Elect. Trans. Numer. Anal.* **38**(2011), 184-201.

Kinji Kimura, Takumi Yamashita and Yoshimasa Nakamura, Conserved quantities of the discrete finite Toda equation and lower bounds of the

minimal singular value of upper bidiagonal matrices, *J. Phys. A: Math. Theor.* **44**(2011), 285207(12pp). DOI:10.1088/1751-8113/44/28/285207

[学会発表](計23件)

赤岩香苗, 近藤弘一, 岩崎雅史, 中村佳正, 指定された固有値をもつ Hessenberg型帯行列の作成方法について, 日本応用数理学会年会, アクロス福岡, 2013.9.9-11.

新庄雅斗, 岩崎雅史, 中村佳正, カソラチ行列式の漸近展開定理, 日本応用数理学会年会, アクロス福岡, 2013.9.9-11.

Yoshimasa Nakamura, Prospect of integrable numerical algorithms, Forum on Scientific and Engineering Computing 2013, Si Yuan Buildings Conference Hall, Chinese Academy of Sciences, Beijing, 2013.6.3-4.

(Invited Lecture)

Yoshimasa Nakamura, Aspects of integrable numerical algorithms, *Integrable Algorithms: New Frontiers in Numerical Analysis*, Leeds University, 2013.3.15-16.

(Keynote Lecture)

Yoshimasa Nakamura, Why are integrable algorithms accurate? Leeds University, 2013.3.14.

赤岩香苗, 近藤弘一, 岩崎雅史, 中村佳正, 重複固有値をもつ3重対角行列が定めるqd変数の漸近挙動について, 応用数理学会研究部会連合発表会, 東洋大学, 2013.3.14-15.

永田宗寛, 岩崎雅史, 木村欣司, 中村佳正, mdLVsアルゴリズムに関する数値安定性と計算量の改良, 応用数理学会研究部会連合発表会, 東洋大学,

2013.3.14-15.

中村佳正, 可積分アルゴリズムはなぜ高精度か? 第14回情報学シンポジウム, 京都大学, 2013.2.19.

山下巧, 木村欣司, 中村佳正, totally nonnegative行列の最小固有値の下界について, 日本応用数学会年会, 稚内全日空ホテル, 2012.8.29-31.

Kanae Akaiwa, Koichi Kondo, Masashi Iwasaki, Yoshimasa Nakamura, A tridiagonalization for nonsymmetric complex matrix in terms of the finite discrete Toda equation, International Congress on Computational and Applied Mathematics (ICCAM2012), Ghent University, Belgium, 2012.7.9-13
Yusaku Yamamoto and Yoshimasa Nakamura, Application of integrable discrete hungry systems to nonsymmetric matrix eigenvalue algorithms, The 8th East Asia SIAM Conference (EASIAM 2012), National Taiwan University, Taipei, Taiwan, 2012.6.25-27

Yoshimasa Nakamura, Akiko Fukuda, Yusaku Yamamoto, Masashi Iwasaki and Emiko Ishiwata, Integrable discrete hungry systems and their related eigenvalue algorithms, Symmetries and Integrability of Difference Equations (SIDE 10), Yin Feng Holiday Resort, Xikou, Ningbo, China, 2012.6.10-16

Yoshimasa Nakamura, Akiko Fukuda, Emiko Ishiwata, Yusaku Yamamoto and Masashi Iwasaki, Application of integrable discrete hungry systems to nonsymmetric matrix eigenvalue

algorithms, Workshop on Methods and Applications of Industrial and Applied Mathematics, RIMS Kyoto Univ., 2012.5.31-6.1

木村欣司, 山本有作, 山下巧, 高田雅美, 中村佳正, 最小特異値の下界を構成するための逆行列のトレースを計算する新しい減算なし公式について, 応用数学会研究部会連合発表会, 九州大学, 2012.3.8-9

赤岩香苗, 近藤弘一, 岩崎雅史, 中村佳正, 有限戸田格子方程式に関連する3重対角行列の固有値について, 応用数学会研究部会連合発表会, 九州大学, 2012.3.8-9

永田宗寛, 岩崎雅史, 中村佳正, 離散可積分系に基づく高精度Darboux変換について, 応用数学会研究部会連合発表会, 九州大学, 2012.3.8-9

山下巧, 木村欣司, 高田雅美, 中村佳正, 対称行列の逆行列の固有値に対するKato-Temple不等式の導出と応用, 日本応用数学会「行列・固有値問題の解法とその応用」研究部会第12回研究会, 国立情報学研究所, 2011.11.21

Kanae Akaiwa, Masashi Iwasaki and Yoshimasa Nakamura, Some Fibonacci sequences appear in the dLV algorithm, International Workshop on Application of Iterative Methods to Engineering and Its Mathematical Element, Doshisha Univ., 2011.10.23-24.

Munehiro Nagata, Masashi Iwasaki and Yoshimasa Nakamura, Numerical stability of dLV transformation, International Workshop on Application of Iterative Methods to Engineering and Its Mathematical Element, Doshisha Univ., 2011.10.

23-24.

Masashi Iwasaki and Yoshimasa Nakamura, Some aspects of the integrable discrete Lotka-Volterra system, International Conference on Scientific Computing (SC2011), Cagliari, Italy, 2011.10.13. (invited talk).

- 21 赤岩香苗, 岩崎雅史, 中村佳正, 負の差分間隔をもつ離散ロトカ・ボルテラ系に現れる数列の再帰性について, 日本応用数理学会年会ポスターセッション, 同志社大学, 2011.9.14-16.
- 22 高橋悠, 岩崎雅史, 福田亜希子, 石渡恵美子, 中村佳正, 中心多様体理論を用いた離散ハングリー系の局所解析, 日本応用数理学会年会, 同志社大学, 2011.9.14-16.
- 23 木村欣司, 山下巧, 高田雅美, 中村佳正, 特異値計算アルゴリズムmdLVs法におけるシフト戦略, 第40回数値解析シンポジウム, 鳥羽シーサイドホテル, 2011.6.20-22.

〔図書〕(計 0件)

〔産業財産権〕

出願状況(計 0件)

名称:

発明者:

権利者:

種類:

番号:

出願年月日:

国内外の別:

取得状況(計 0件)

名称:

発明者:

権利者:

種類:

番号:

取得年月日:

国内外の別:

〔その他〕

ホームページ等

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

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

()

研究者番号:

(3) 連携研究者

()

研究者番号: