

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 29 年 6 月 9 日現在

機関番号：13901

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2014～2016

課題番号：26286088

研究課題名(和文) 行列関数を係数に持つ大規模線形方程式に対する高速解法の総合的開発

研究課題名(英文) Comprehensive development of fast numerical methods for solving large linear systems with matrix functions

研究代表者

曽我部 知広 (SOGABE, Tomohiro)

名古屋大学・工学研究科・准教授

研究者番号：30420368

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 4,900,000円

研究成果の概要(和文)：行列関数を係数に持つ線形方程式の高速解法の総合的開発を目的とし、本研究プロジェクトにより以下の研究成果が得られた。(1) 行列多項式を係数に持つ線形方程式に対するクリロフ部分空間法の開発 (2) 行列平方根を高速に計算するアルゴリズムの開発 (3) 行列累乗根を高速に計算するアルゴリズムの開発 (4) 特殊行列のテンソル積分解。研究成果(2)と(3)は、行列平方根や行列累乗根を係数に持つ線形方程式に対するクリロフ部分空間法の高速化に繋がる。成果(4)は、行列関数の内部にテンソル構造を有する際に、その構造を活かした効率的数値解法という当初予想されなかった研究の展開に繋がる。

研究成果の概要(英文)：The purpose of the research project is to develop fast numerical algorithms for solving linear systems with matrix functions, and the research project mainly yielded the following results: (1) an efficient Krylov subspace method for solving linear systems with some matrix polynomials; (2) a method for boosting the speed of convergence of Newton's iterations to compute the matrix principal square root; (3) a cost-efficient variant of Incremental Newton method for the matrix principal pth root; (4) tensor decomposition algorithms for some special matrices. The results (2),(3) may lead to efficient Krylov solvers for the corresponding linear systems. The result (4) yields a novel direction for the case where the coefficient matrix has a tensor structure, which was not expected before the research project.

研究分野：数値線形代数

キーワード：行列関数計算 テンソル計算 線形方程式

1. 研究開始当初の背景

理論・実験に続く第3・第4の科学的手法と言われている計算科学・データ科学において、大規模線形方程式(連立1次方程式)の求解は基本的であり、頻繁に計算の主要部になるため高速解法の需要は高い。

線形方程式の数値解法は、ガウスの消去法(直接法)やガウス-ザイデル法(定常反復法)の名前があるように長い歴史を有し、現在も重要な研究課題である。その長い歴史の中で比較的新しい解法族であるクリロフ部分空間法は、高速フーリエ変換と並び“20世紀のTop 10 アルゴリズム”[米国応用数学会 SIAM News, Vol. 33, 2000]の一つに選出されており、国内外でその有用性が広く認識されている。このような動向の中で研究代表者はクリロフ部分空間法の理論研究と解法開発を行っている。

近年、行列関数を係数に持つ大規模線形方程式の高速算法の需要が高まっている。その中の一つとしてシフト線形方程式は、行列1次多項式を係数に持つ線形方程式系であり、計算物質科学・計算素粒子物理学・最適化問題・逆問題等に共通して現れるため、クリロフ部分空間法の観点で高速解法が研究・開発されている。その指導原理はクリロフ部分空間のシフト不変性といわれるものであり、原理的には1つのシフト線形方程式を解く程度の手間で、複数のシフト線形方程式を解くことができるという画期的な理論である。行列関数の最も簡単なシフト線形方程式については高速解法が得られているが、他の行列関数である行列高次多項式、行列指数関数、行列平方根を係数に持つ線形方程式に対する高速解法は発展途上である。

2. 研究の目的

行列高次多項式、行列平方根、行列累乗根、行列指数関数を係数に持つ線形方程式に対する高速解法の総合的開発を目的としている。

3. 研究の方法

クリロフ部分空間のシフト不変性の理論を拡張する方向として、(1)行列高次多項式から作られる両空間の高次シフト不変性の理論を構築し、この知見をもとに、研究目的を達成する方法、(2)行列関数(行列平方根、行列累乗根)の高速算法を開発する方法、具体的に説明すると、行列関数自体を高速に求めることで行列関数を係数に持つ線形方程式求解のためのクリロフ部分空間法に対して前処理技術の直接的構築が可能になる。(3)行列計算の高速算法に関する方向、前述の汎用的な解法を目指す方向とは対極に位置する。すなわち、特殊な行列に絞ってその数学的性質を明らかにすることにより特殊な行列関数に対する高速解法への開発など多方面から研究を進めた。

4. 研究成果

(1) 行列多項式に関する成果

行列1次多項式を係数にシフト線形方程式を一般化した一般化シフト線形方程式に対する数値解法を開発した。本成果は国際会議 ICICS2016 の基調講演として発表された(学会発表)。計算結果の例を表1に示す。表1から従来法(BCOCG法)よりも提案法(BGSCOCG法)が約20倍高速であることが分かる。

表1: 従来法と提案法の計算時間の比較 (学会発表の抜粋)。

数値解法	計算時間[秒]
BCOCG法	163247
BCSCOCG法	8049

理論的には、ブロック・クリロフ部分空間のシフト不変性が通常では成り立たない状況を、適切な変換を行うことでシフト不変性が成り立つことを示し、この変換を利用して高速解法の設計を行うことができたことに意義がある。

(2) 行列平方根に関する成果

量子情報科学や物性物理学に現れる行列平方根を求めるための数値解法としてニュートン法がある。(通常の数値解析の教科書等に記述されているニュートン法の微分をフレシェ微分に置き換えた解法に対応する。)このニュートン法を高速化するために初期行列の与え方が重要である。しかし、初期行列と元の行列との積が可換であるという強い制約のために、これまで研究がほとんど行われていなかった。そこで、元の行列と可換である行列多項式の集合の中から、行列平方根との距離が最小となる行列多項式を抽出する理論を構築し、近似的に最小となる実用的な初期値の構成方法を提案した。(学術論文, 学会発表)

(3) 行列累乗根に関する成果

素粒子物理学等で必要とされる行列p乗根に対するNewton法であるIncremental Newton法に対する高速化に成功した。行列のサイズは $N \times N$ とすると、所要演算量は $p < 100$ に対して $O(p \times N^3)$ から $O(\log(p) \times N^3)$ 程度に削減された。具体的に説明すると $p=100$ 、つまり行列100乗根については、約10倍の高速化が達成されることになる。この成果は国内で口頭発表により公表され(学会発表)、さらに国際論文誌に掲載された(雑誌論文)。

(4) 線形方程式の数値解法の開発

複素対称行列を係数に持つクリロフ部分空間法として、COCG法とCOCR法がある。これらの解法の安定性を高めるべく、解法の開

発を行った(雑誌論文). 本プロジェクト後にはなるが複素対称行列の場合の解法として組み入れることなど, 今後の発展が見込める.

#### (5)行列関数からテンソル関数への展開

光学等での応用があるヘルムホルツ方程式を含む一般の2階線形偏微分方程式を数値的に求める解法(行列関数として拡張テンソル和構造を持つ線形方程式の数値解法)に対する誤差を効率良く推定する手法の開発を行った. 本成果は, ギリシャでの国際会議SLA2014において招待講演を行い, 国際論文誌として公表された.(学会発表, 学術雑誌) 本成果は, 特殊な構造を持つ行列関数計算にテンソルの視点が入ることで, 豊かな知見を生み出す可能性を示唆するものである. また, 特殊行列である $k$ -三重対角テプリッツ行列や $k$ -三重対角テプリッツ行列に対するテンソル積分解を提案し, 固有ベクトルがテンソル積で表現できることを明らかにした.(雑誌論文)

#### (6)その他, 行列計算に関する成果

行列に対する基本的な量としてパフィアンという概念がある. パフィアンは組み合わせ論や微分方程式のソリトン解の表示に現れるが, 一般に計算コストがかかる. この問題に対してある Skew-Centrosymmetric 行列のクラスにおいては高速に計算するアルゴリズムを構築することが可能であり, かつそのアルゴリズムは破綻せずロバストであることを示した. この研究は, 国際論文誌に掲載された(学術雑誌). また,  $k$ -三重対角行列に対する(パフィアンに類似した概念である)パーマメントに関しても高速かつ破綻しない解法を構築し, 国際論文誌に掲載された(学術雑誌). さらに $k$ -三重対角行列を拡張した行列に対する高速ブロック対角化アルゴリズムを開発した(学術雑誌). 今後, 特殊行列に関する行列関数への応用が期待される.

#### (7)今後の課題

行列指数関数に関する研究課題の推進が遅延気味である. 今後も本プロジェクトによる研究成果を基盤とし, 引き続き研究を推進する予定である.

#### 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)

F. Yilmaz, T. Sogabe, and E. Kirklar, On the pfaffians and determinants of some skew-centrosymmetric matrices, J. Integer Sequences, 20 (2017), pp. 1-9. (査読あり)

URL:<https://cs.uwaterloo.ca/journals/JIS/VOL20/Yilmaz/yilmaz7.html>

F. Tatsuoka, T. Sogabe, Y. Miyatake, and S.-L. Zhang, A cost-efficient variant of the incremental Newton iteration for the matrix pth root, J. Math. Res. Appl. 37 (2017), pp. 97-106.

(査読あり)

DOI:10.3770/j.issn:2095-2651.2017.01.009

S. Mizuno, Y. Morizumi, T. S. Usuda, and T. Sogabe, An initial guess of Newton's method for the matrix square root based on a sphere constrained optimization problem, JSIAM Letters, 8 (2016), pp. 17-20.

(査読あり)

DOI: 10.14495/jsiaml.8.17

A. Ohashi, T. Sogabe, and T. S. Usuda, Fast block diagonalization of  $(k, k')$ -pentadiagonal matrices, Int. J. Pure and Appl. Math. 106 (2016), pp. 513-523.

(査読あり)

DOI:10.12732/ijpam.v106i2.14

A. Ohashi and T. Sogabe, On computing maximum/minimum singular values of a generalized tensor sum, Electron. Trans. Numer. Anal., 43 (2015), pp. 244-254.

(査読あり)

URL:<http://etna.math.kent.edu/vol.43.2014-2015/pp244-254.dir/pp244-254.pdf>

A. Ohashi, T. S. Usuda, T. Sogabe, and F. Yilmaz, On tensor product decomposition of  $k$ -tridiagonal Toeplitz matrices, Int. J. Pure and Appl. Math., 103 (2015), pp. 537-545.

(査読あり)

DOI: 10.12732/ijpam.v103i3.14

A. Ohashi, T. Sogabe, and T. S. Usuda, On decomposition of  $k$ -tridiagonal Toeplitz matrices and its applications, Special Matrices, 3 (2015), pp. 200-206.

(査読あり)

DOI: 10.1515/spma-2015-0019

T. Sogabe and F. Yilmaz, A note on a fast breakdown-free algorithm for computing the determinants and the permanents of  $k$ -tridiagonal matrices, Appl. Math. Comput., 249 (2014), pp. 98-102.

(査読あり)

DOI: 10.1016/j.amc.2014.10.040

X.-M. Gu, T.-Z. Huang, L. Li, H.-B. Li, T. Sogabe, and M. Clemens, Quasi-minimal residual variants of the COCG and COCR methods for complex symmetric linear systems in electromagnetic simulations, IEEE Trans. Microw. Theory Techn., 62 (2014), pp. 2859-2867. (査読あり)  
DOI: 10.1109/TMTT.2014.2365472

[学会発表](計 10 件)

曾我部知広, テンソル繰り込み群の中の数値計算法について, 日本物理学会第 72 回年次大会, 2017 年 3 月 17 日-20 日, 大阪大学豊中キャンパス, 大阪.

立岡文理, 曾我部知広, 宮武勇登, 張紹良, 行列  $p$  乗根のための Newton 法の高速化について, 日本応用数理学会第 13 回研究部会連合発表会, 2017 年 3 月 6 日-7 日, 電気通信大学, 東京.

立岡文理, 曾我部知広, 宮武勇登, 張紹良, 行列  $p$  乗根のための Increment 型 Newton 法について, 第 45 回数値解析シンポジウム, 2016 年 6 月 9-10 日, 霧島市, 鹿児島.

T. Sogabe and S.-L. Zhang, A block Krylov subspace method for shifted linear systems with complex symmetric matrices, International Conference on Information and Computational Science (ICICS2016), Dalian University of Technology, Dalian, China, Aug. 2-6, 2016. (基調講演)

D. Lee, T. Hoshi, Y. Miyatake, T. Sogabe, and S.-L. Zhang, A bisection approach combined with a projection method for interior eigen-value problems in materials science, SIAM: East Asian Section Conference 2016 (EASIAM2016), Macau, China, June 20-22, 2016.

T. Sogabe, Krylov subspace methods for complex symmetric linear systems, Workshop on Numerical Algebra, Algorithms, and Analysis, National Institute of Informatics, Tokyo, Japan, Jan. 11-12, 2016. (招待講演)

T. Sogabe and S.-L. Zhang, A block variant of the COCG method for generalized shifted linear systems with multiple right-hand sides, 13th U.S. National Congress on Computational Mechanics (USNCCM13), Manchester Grand Hyatt, San Diego, CA., USA, July 26-30, 2015. (招待講演)

S. Mizuno, Y. Moriizumi, T.S. Usuda, T. Sogabe, On an initial guess of Newton's method for the matrix square root based on a sphere constrained optimization problem, International Workshop on Information Technology, Applied Mathematics and Science, 2015 年 3 月 26 日-28 日, 京都市生涯学習総合センター, 京都.

水野匠, 森泉佳洋, 臼田毅, 曾我部知広, 行列平方根におけるニュートン法の球面制約上の最適化問題に基づく初期値について, 日本応用数理学会 2014 年度年会, 2014 年 9 月 3 日-5 日, 政策研究大学院大学, 東京.

A. Ohashi and T. Sogabe, An algorithm for computing extremal singular values of a generalized tensor sum, Structured Numerical Linear and Multilinear Algebra: Analysis, Algorithms and Applications (SLA2014), Kalamata, Greece, September 8-12, 2014. (招待講演)

[その他]

ホームページ等

<http://na.nuap.nagoya-u.ac.jp/~sogabe/paper.html>

## 6. 研究組織

### (1) 研究代表者

曾我部知広 (Sogabe Tomohiro)  
名古屋大学・大学院工学研究科・准教授  
研究者番号: 30420368

### (2) 研究分担者

張紹良 (Shao-Liang Zhang)  
名古屋大学・大学院工学研究科・教授  
研究者番号: 20252273