報告番号	甲　第 13155 号

主　論　文　の　要　旨

論文題目　**Several Algorithms for the Computation of Matrix Functions**
(行列関数計算のためのアルゴリズムの研究)

氏　　名　**立岡　文理**

論　文　内　容　の　要　旨

行列関数はスカラー関数を正方行列に拡張した行列値関数の一種であり，科学技術計算の幅広い分野に現れる．例えば，行列指数関数$\exp(A)$は連立常微分方程式の解析解の記述に必要であり，対数関数$\log(A)$は量子情報科学分野の諸量である von Neumann エントロピーに現れる．また，行列の実数乗A^{α} $(\alpha \in \mathbb{R})$は空間非整数階偏微分方程式の数値解法に応用される．このため，行列関数に対する高性能な数値計算手法は多くの需要がある．

行列関数はスカラー関数の拡張であるが，スカラー関数のためのアルゴリズムを単に行列向けに書き換えても直ちに実用的なアルゴリズムになるとは限らない．理由の一つとして，所要演算量の大きさが挙げられる．サイズnの密行列において，行列のスカラー倍及び行列の和の演算量は$O(n^2)$ flops であり，行列–行列積及び行列–逆行列積の演算量は$O(n^3)$ flops である．行列計算そもそもの演算量が大きいことに加えて，アルゴリズムにおける計算の主要部がスカラー関数計算とは異なるため，アルゴリズム内の行列積・逆行列積の回数の削減による所要演算量の削減は重要である．また，行列の多様性も行列関数計算の難しさの一つである．行列はサイズ・疎性・対称性・条件数の大小などの性質を有し，入力行列の性質によってアルゴリズムの性能が大きく変わり得る．そのため，一つのアルゴリズムで全ての入力に対応することが難しい．ゆえに，より多くの入力に対応するためのアルゴリズムの開発は重要である．これまでにも行列関数計算の研究は行われてきたが，前述の難しさのため現在でも研究が続けられている．

本研究では行列関数計算のための新規アルゴリズムの提案により，行列関数計算への貢献を図る．具体的には，行列対数関数と行列実数乗のための数値積分法の枠組み，及び行列対数関数のための Newton 法の枠組みにおいてアルゴリズムを提案する．

第 1 章は序章であり，本研究の対象となる数値計算アルゴリズムの概略を説明し，本研究の目的，及び本論文の構成を述べる．

第 2 章は第 3 章以降のための準備であり，行列関数の定義，及び行列関数の数値計算手法の概要を述べる．加えて，本研究で提案するアルゴリズムの基礎となる，数値積分と Newton 法について説明する．

第 3 章及び第 4 章では数値積分に基づくアルゴリズムを提案する．なお第 3 章は行列対数関数，第 4 章は行列実数乗を対象とする．まず，第 3 章の要旨を述べる．行列対数関数 $\log(A)$は積分

$$\log(\boldsymbol{A}) = (\boldsymbol{A}-\boldsymbol{I})\int_{\mathbf{0}}^{\mathbf{1}}[\boldsymbol{t}(\boldsymbol{A}-\boldsymbol{I})+\boldsymbol{I}]^{-\mathbf{1}}\,\mathbf{d}\boldsymbol{t} \tag{1}$$

によって表されることが知られており，第 3 章では積分(1)の数値計算に基づく$\log(A)$の計算を考える．積分の数値計算は，被積分関数値の線形和による積分値の近似によって行われる．積分(1)の被積分関数には逆行列が含まれるため，積分点数（被積分関数の計算回数）が所要演算量に大きく影響する．そのため，少ない積分点数で良い近似を得ることは重要である．これまでは，(1)の計算に Gauss–Legendre (GL) 求積が用いられてきた．GL 求積は，被積分関数が低次の多項式に近いほど速く収束し，少ない積分点数で良い近似を得られる．実際に$\log(A)$の計算ではAがIに近いときに速く収束することが知られている．その一方で，AがIから遠い場合，例えばAの条件数が大きいときは被積分関数が端点で急激に変化し収束が遅くなる．

以上を踏まえて，本研究では GL 求積の収束が遅くなる状況でも少ない積分点数で$\log(A)$を計算できるアルゴリズムの開発を試みる．はじめに二重指数関数型(DE)公式の適用を考える．DE 公式は端点特異性を有する積分や減衰の遅い関数の無限積分を効率よく計算できる積分公式として知られている．そのため，(1)に対する GL 求積の収束が遅いときにも，DE 公式の収束は速く有用である可能性がある．しかし，DE 公式を用いる際にはあるパラメータの設定が必要である．このパラメータ設定は計算結果の精度に影響を与えるため，適切に行う必要がある．被積分関数がスカラー関数の場合はパラメータの設定方法が提案されているが，被積分関数の減衰の速度等を知る必要がある．$\log(A)$の被積分関数は行列値関数であるため，既存のパラメータの設定方法を適用することは現実的ではない．そこで，本研究では(1)に対する積分区間の打ち切り誤差を解析した後，パラメータの設定方法を含めたアルゴリズムを提案し，DE 公式の実用化を行った．さらに，本研究

ではAが正定値対称行列であるときの DE 公式の収束速度の解析も行い，GL 求積の収束が遅くなる状況でも DE 公式は効率よく計算できることを確かめた．加えて，Aが正定値対称行列であるときの数値積分法の前処理も提案する．行列対数関数には，適当な行列Pに対して

$$\log(\boldsymbol{A}) = \log(\boldsymbol{AP}) - \log(\boldsymbol{P}) \tag{2}$$

という性質があり，(2)の右辺によって$\log(A)$を計算できる．本論文ではPの選び方を提案し，前処理前後の収束速度の変化を見積もる．数値実験では，本章で提案したアルゴリズムが理論どおり動き，既存手法の収束が遅い状況下においてこれまでよりも少ない積分点数で行列対数関数を計算できることを確かめた．

第 4 章では行列実数乗に対する数値積分法におけるアルゴリズムを提案する．行列実数乗A^αも実軸上の積分

$$\boldsymbol{A}^{\boldsymbol{\alpha}} = \frac{\sin(\boldsymbol{\alpha\pi})}{\boldsymbol{\alpha\pi}} \int_{\boldsymbol{0}}^{\infty} (\boldsymbol{t}^{\boldsymbol{1/\alpha}}\boldsymbol{I} + \boldsymbol{A})^{-\boldsymbol{1}}\, \mathbf{d}\boldsymbol{t} \quad \big(\boldsymbol{\alpha} \in (\boldsymbol{0}, \boldsymbol{1})\big) \tag{3}$$

を用いて表され，積分(3)の数値計算にもとづくA^αの計算ができる．積分(3)の被積分関数にも逆行列が含まれるため，積分点数が所要演算量に大きく影響し，その数値計算では少ない積分点数で良い近似を得ることが重要となる．積分(3)の計算において難しい点は，積分表示が無限積分である点，及びAだけでなくαの値も計算効率に影響しうる点である．これまでの計算手法は，適当な変数変換のあとに Gauss–Jacobi (GJ) 求積を適用する方法であるが，Aが悪条件かつαが単位分数でないとき，すなわち，自然数pを用いて$\alpha = 1/p$と表せないときには収束が遅くなり得る．本研究では，GJ 求積が遅くなる状況下でも少ない積分点数でA^αを計算できるアルゴリズムの開発を試みる．

はじめに，広義積分を効率よく計算するために DE 公式の適用を考える．$\log(A)$を DE 公式で計算するときと同様に，DE 公式を用いた際のパラメータ設定が実用上の課題である．そこで，(3)に対する積分区間の打ち切り誤差を解析し，パラメータの設定方法をまとめたアルゴリズムを提案した．また，Aが正定値対称行列であるときの DE 公式の収束速度の解析も行い，Aが悪条件かつαが単位分数でないときでも DE 公式は効率よくA^αを計算できることを確かめた．加えて，第 3 章と同様に正定値対称行列Aの実数乗に対しても前処理を提案する．適当な行列Pに対して

$$\boldsymbol{A}^{\boldsymbol{\alpha}} = (\boldsymbol{AP})^{\boldsymbol{\alpha}}\boldsymbol{P}^{-\boldsymbol{\alpha}} \tag{4}$$

が成り立つためA^αを式(4)の右辺によって計算できる，本論文ではPの選び方を提案し前処理前後の収束速度の変化を見積もる．数値実験では，本章で提案したアルゴリズムが理論どおり動くこと，また，既存手法の収束が遅いとき，すなわちAの条件数が大きくαが単位

分数でないときでも提案アルゴリズムを用いると効率よく行列実数乗を計算できることを確かめた.

第5章では行列累乗根$A^{1/p}$に対するNewton法の高速化について述べる. 行列実数乗A^{α}においてαが単位分数であるとき, $A^{1/p}$を特に行列累乗根という. 行列累乗根は, 方程式

$$X^p = A \tag{5}$$

を満たすため, (4)をNewton法などで数値的に解くことで$A^{1/p}$を計算できる. $A^{1/p}$にNewton法を適用させたときの難しさとして可換性の崩れによる数値的不安定性がある. 近年, $A^{1/p}$の計算に特化したincremental Newton (IN)反復式が提案されており, IN反復式は数値的安定性を有し1反復あたりの演算量が$O(n^3p)$であるという特徴がある. IN反復式の計算の主要部は特殊な係数を持つ行列多項式の計算である. そこで, 本研究では, 計算中に現れる行列積の回数を減らすための式変形を提案し, 行列多項式の演算量を削減する. 特に, $p \leq 100$では$O(n^3 \log p)$flopsであることを確認した. また, 誤差解析により, 数値的安定性を失っていないことも示す. 数値実験により, 演算量削減による計算時間の削減を確認した. 具体的には$p = 59$において計算時間が1/4程度になった.

第6章では, 本研究の結果のまとめと今後の展望を述べる. 本研究では行列関数の数値計算手法の中の2つの枠組みにおいて新規アルゴリズムを提案した. 今後の展望としてアルゴリズムの更なる改良が挙げられる. 例えば, 数値積分法におけるより効率の良い積分公式の開発である.