

2つの行列が添字の置換で一致するかの判定について

村上 弘¹

¹ 東京都立大学

e-mail : mrkmlhrsh@yahoo.co.jp

1 概要

与えられた2つの行列に対して両者を一致させる行列添字の置換の存在判定を行い、存在する場合にはそのような置換の例を示す計算が高速に行えることが望ましい。本研究では2つの行列の固有値・特異値分解を利用して置換に対する必要条件を構成する。現在の方法では、多くの場合に候補となる必要条件を満たす置換はごく少数になるが、常にそうなるという保証はない。得られた候補の中に実際に2つの行列を一致させる置換が存在すれば、それが示すべき置換の例になる。

2 実対称行列同士の対称な添字の置換による一致可能性の場合

与えられた2つの n 次実対称行列 A と B を対称な添字の置換により一致させることが可能であれば、 $B = PAP^T$ を満たす置換行列 P が存在する。そのような置換が存在するかを判定して、存在するならばその例を構成して示すことが望まれる。この問題の応用には以下のものが考えられる。

- 与えられた2つの無向グラフに対して、両者を一致させるような頂点の番号の付け替えが存在するかというグラフの同型性の判定は、グラフの理論 [1][2][3] において基本的な問題であるが、それは2つの無向グラフの隣接行列を一致させるような添字の置換が存在するかを判定する問題と等価である（さらにそのような置換が存在する場合にはその例を示すことが望ましい）。
- 化合物の分子のグラフが構成原子と原子間の化学結合から成るとする。分子のグラフを表現する実対称行列を以下のように作る。まず分子を構成する原子に任意の順で1から始まる番号のラベルを付ける。分子の構成原子が n 個のとき行列は n 次で、第 i 対角要素の値はラベルが i の原子の種別を表す実数とし、第 i 行 j 列の非対角要素の値はラベルが i と j の原子間の化学結合の種別を表す実数とする。すると与えられた2つの分子のグラフが原子の番号の付け替えで同じになるかの判定は、それらを表現する実対称行列を一致させる対称な添字の置換が存在するかの判定に帰着する。そのような置換が存在する場合にはその例を示すことが望ましい。

3 実一般行列同士の行の置換と列の置換による一致可能性の場合

与えられた2つの $m \times n$ の実一般行列を一致させるような行の置換と列の置換の組が存在するかを判定して、存在する場合にはその例を示す、という問題が考えられる。つまり A と B がそれぞれ $m \times n$ の実行列であるとき、 $B = PAQ^T$ を満たす置換行列 P と Q の組が存在するかを判定して、存在する場合にはその組の例を示す。この問題の応用としてたとえば以下のものが考えられる。

- 有向あるいは無向の場合の2つのグラフが接続行列で与えられたときに、2つの接続行列を一致させるような頂点の置換と辺の置換の組が存在するかを判定して、存在する場合にはその組の例を示す。

以下のようにすることで実一般行列に対する問題は実対称行列に対する問題で置換の形に制限を加える場合に帰着できる。いま A と B をそれぞれ $m \times n$ の実行列とし、 P を m 次の置換行列、 Q を n

次の置換行列として、 $B = PAQ^T$ の関係があるとする。そのとき $m + n$ 次の拡大行列 \hat{A} と \hat{B} 、および $m + n$ 次の置換行列 \hat{P} を以下のようにおくと、 $\hat{B} = \hat{P} \hat{A} \hat{P}^T$ である。

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} 0 & A \\ A^T & 0 \end{pmatrix}, \hat{B} = \begin{pmatrix} 0 & B \\ B^T & 0 \end{pmatrix}, \hat{P} = \begin{pmatrix} P & 0 \\ 0 & Q \end{pmatrix}.$$

つまり与えられた 2 つの実対称行列 \hat{A} と \hat{B} に対して関係 $\hat{B} = \hat{P} \hat{A} \hat{P}^T$ を満たす置換行列 \hat{P} であって、先頭の m 行の添字の置換 P と残りの n 行の添字の置換 Q の組のブロック分割形であるものの存在判定と構成になる。この定式化では $m + n$ 次の実対称行列 \hat{A} と \hat{B} それぞれの固有値分解を利用する（ただし固有値が非負の固有対だけが必要である）。しかし拡大行列の固有値分解を用いずに最初から A と B それぞれの特異値分解（SVD）を用いた方が計算上の効率が良いと考えられる。

そこで元の $m \times n$ の実行列 A と B の SVD を考える。関係 $B = PAQ^T$ となるためには A と B の特異値の全体は重複度を込めて一致する必要がある。いま A と B の SVD を $A =: U_A \Sigma V_A^T$, $B =: U_B \Sigma V_B^T$ とする。 Σ は特異値を降順に並べた対角行列であり、 U_A と U_B はそれぞれ A と B の正規化された左特異ベクトルを特異値の降順に並べた行列であり、 V_A と V_B はそれぞれ A と B の正規化された右特異ベクトルを特異値の降順に並べた行列である。実行列の特異値分解の場合には、重複の無い特異値に対する左あるいは右の正規化された特異ベクトルは、それぞれ実の 1 次元の線形部分空間を張る単位実ベクトルなので、その不定性は向きの反転だけである（ただし左と右の特異ベクトルいずれかの向きの取り方を逆に変更する場合には、両方とも逆に変更する必要がある）。

いま重複の無い特異値 σ に対応する A の左特異ベクトルを \mathbf{x} 、同じ特異値 σ の B の左特異ベクトルを \mathbf{y} とすると、 $B = PAQ^T$ であれば、 $P\mathbf{x} = \tau\mathbf{y}$ である。ここで P は求めたい置換行列であり、 τ は ± 1 のどちらかの値をとる特異ベクトル同士の相対符号である。いま $\text{sort}(\mathbf{v})$ によりベクトル \mathbf{v} の要素を昇順に並べたベクトルを表すと、任意の置換 π に対して $\text{sort}(\pi\mathbf{v}) = \text{sort}(\mathbf{v})$ が成り立つから、 $\text{sort}(\mathbf{x}) = \text{sort}(\tau\mathbf{y})$ である。この関係が $\tau = \pm 1$ のどちらでも成立しなければ P の存在は否定され、 $\tau = \pm 1$ の片方だけで成立すれば τ はその値に限定されるが、 $\tau = \pm 1$ の両方で成立する場合にはこの方法では τ の値は限定できない。ただし τ の値が限定できないのは、左特異ベクトル \mathbf{x} と \mathbf{y} が $\text{sort}(\mathbf{x}) = \text{sort}(-\mathbf{x})$ かつ $\text{sort}(\mathbf{y}) = \text{sort}(-\mathbf{y})$ という特別な性質を持つ場合に限られる。 A と B それぞれの左特異ベクトルで、特異値に重複が無くてかつ相対符号が限定できたものだけを特異値の降順に列に並べた行列 X と Y を作り、 Y の各列のベクトルにそれに対応する相対符号を乗じて Y' を作ると、置換行列 P に対する必要条件として $PX = Y'$ が得られる。すると行の置換 P が存在するためにはまず、 X の行の多重集合と Y' の行の多重集合が一致している必要がある。もしも X の行にも Y' の行にも重複がなければ、置換 P の候補はただ 1 通りになる。一般の場合には X の全部で m 個の行の種類は k 通りであるとして、各種類の行の重複度を m_1, m_2, \dots, m_k （ただし $\sum_{j=1}^k m_j = m$ ）とすると、置換 P の候補の数は $\prod_{j=1}^k (m_j!)$ になる。同様に A と B の右特異ベクトルから置換 Q に対する必要条件が得られる。ただし重複の無い特異値 σ に対応する A と B の左特異ベクトル同士の相対符号と、右特異ベクトル同士の相対符号は同じであることが必要である。

参考文献

- [1] 戸田誠之助, グラフ同型性判定問題, 富山房, 2001.
- [2] ボグダン・二カ, 線形代数で考えるスペクトル・グラフ理論入門, 日本評論社, 2024.
- [3] 吉田悠一, スペクトルグラフ理論, サイエンス社, 2024.

主成分分析のための OQDS 法の実装方法の提案

千代延 未帆¹, 高田 雅美², 木村 欣司³, 中村 佳正⁴

¹ 奈良女子大学大学院人間文化総合科学研究科, ² 奈良女子大学, ³ 福井大学, ⁴ 大阪成蹊大学
e-mail: chiyonbu-miho1611@lics.nara-wu.ac.jp

1 概要

本稿では, 一部の特異値と特異ベクトルのみを計算する手法を提案する. 主成分分析では大きい方から数個の特異値と特異ベクトルが必要になる. 本研究では行列の分割の影響を受けずに, 小さい方から数個の特異値と右特異ベクトルを得るための OQDS (Orthogonal QD with Shift) 法 [3] の実装方法を提案する.

2 大きい順での部分特異値分解

OQDS 法は小さい方から高精度に特異値分解を行うことが可能であるが, 主成分分析では大きい方の特異値が必要とされる. そのため, 大きい特異値から順に計算する問題を小さい特異値から順に計算する問題に変換する手法を提案する. 変換は上二重対角行列 B に対する対称三重対角行列 F' の用意, F' の正定値化, 修正コレスキー分解の 3 段階で構成される.

3 行列の分割発生に対応するための実装修正

OQDS 法では, 計算の途中で行列の分割が発生しなければ, ソート機能により小さい特異値から順に求まる. 分割が生じた際にも行列間でのソート機能を維持するため, 実装を 2 点修正する.

1 点目の修正について述べる. 分割が発生して上のブロック行列に 0 特異値が含まれている場合, 下ブロック行列に移動させることができない. そこで本研究ではギブンス回転の再定義を行うことでブロック間の 0 特異値の移動を実現する. ギブンス回転の定義を以下に示す.

$$\begin{bmatrix} I & & \\ & \cos \theta & \sin \theta \\ & -\sin \theta & \cos \theta \\ & & I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \vdots \\ x \\ \vdots \\ y \\ \vdots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \vdots \\ \sqrt{x^2 + y^2} \\ \vdots \\ 0 \\ \vdots \end{bmatrix}, \begin{cases} \cos \theta = \frac{x}{\sqrt{x^2 + y^2}} \\ \sin \theta = \frac{y}{\sqrt{x^2 + y^2}} \end{cases} \quad (1)$$

$x = 0, y = 0$ のとき従来の定義では $\cos \theta = 1, \sin \theta = 0$ とするが, $\cos \theta = 0, \sin \theta = 1$ に変更する.

2 点目の修正点について述べる, 分割された行列全体を一つの行列として扱えるように反復途中に現れる最小特異値をのものをシフト量として採用することを可能にする.

4 ギブンス回転からの特異ベクトル計算

計算量削減のため, 式 (1) に示されるギブンス回転の実装方法を提案する.

$$G_1 G_2 \cdots G_m \begin{bmatrix} O & \cdots & O \\ \vdots & & \vdots \\ O & \cdots & O \\ 1 & & O \\ & \ddots & \\ O & & 1 \end{bmatrix} \quad (2)$$

$p = 2n$ とするとき右端の行列のサイズは $p \times w$ で、左から右に向かって G_m, G_{m-1}, \dots, G_1 の順に作用させる．計算量は $O(mw)$ となり、 w 個の特異値と付随する特異ベクトルを得る場合は $m = \alpha wp$ より $O(w^2n)$ となる． α は 1 個の特異値を得るために必要な反復回数を示し、3 程度である．

また、ギブンス回転を左から右に作用させるため、 \mathbf{x} と \mathbf{y} への作用は次のように行われる．

$$\mathbf{x} \leftarrow \cos(\theta_i)\mathbf{x} - \sin(\theta_i)\mathbf{y}, \quad \mathbf{y} \leftarrow \sin(\theta_i)\mathbf{x} + \cos(\theta_i)\mathbf{y}. \quad (3)$$

$\sin(\theta_i)$ の値は完全に正しく、 $\cos(\theta_i)$ の値はおおよそ正しいとする．ただし θ_i は 0 に近い．この場合 $\cos(\theta_i)$ は 1 に近い値である．完全に正しい $\cos(\theta_i)$ の値を得るため、以下の問題を解く．

$$f(x) = (x)^2 + (\sin(\theta_i))^2 - 1 = 0 \quad (4)$$

$\cos(\theta_i)$ は 1 に近い値であるから、 $x_0 = 1, x_1 = \cos(\theta_i)$ としてはさみうち法、または割線法を利用して以下の計算を行う．

$$x_2 = \frac{f(\cos(\theta_i)) - \cos(\theta_i) \times f(1)}{f(\cos(\theta_i)) - f(1)} = 1 - \sin(\theta_i) \times \frac{\sin(\theta_i)}{1 + \cos(\theta_i)} \quad (5)$$

OQDS 法の計算には第 1 象限のみを利用することが確定していることから、 $0 \leq \theta_i \leq \frac{\pi}{4}$ の場合は $\cos(\theta_i)$ 、 $\frac{\pi}{4} < \theta_i \leq \frac{\pi}{2}$ の場合は $\sin(\theta_i)$ の修正を行うことを提案する．以後、 $0 \leq \theta_i \leq \frac{\pi}{4}$ を (A) 領域、 $\frac{\pi}{4} < \theta_i \leq \frac{\pi}{2}$ を (B) 領域とする．(A) 領域の場合には、 $z_1 \leftarrow -\frac{\sin(\theta_i)}{1+\cos(\theta_i)}$ を用いて次のように変換する [4]．

$$\mathbf{x} \leftarrow \sin(\theta_i) \left(\underline{\underline{z_1 \mathbf{x} - \mathbf{y}}} \right) + \mathbf{x}, \quad \mathbf{y} \leftarrow \sin(\theta_i) \left(\underline{\underline{z_1 \mathbf{y} + \mathbf{x}}} \right) + \mathbf{y}. \quad (6)$$

$\sin(\theta_i)$ と z_1 をメモリ空間上に保持する．また (B) 領域の場合には $z_2 \leftarrow \frac{\sin(\theta_i)}{1+\cos(\theta_i)}$ を用いる．

$$\mathbf{x} \leftarrow \cos(\theta_i) \left(\underline{\underline{z_2 \mathbf{y} + \mathbf{x}}} \right) - \mathbf{y}, \quad \mathbf{y} \leftarrow -\cos(\theta_i) \left(\underline{\underline{z_2 \mathbf{x} - \mathbf{y}}} \right) + \mathbf{x} \quad (7)$$

$\cos(\theta_i)$ と z_2 をそれぞれメモリ空間上に保持する．高精度化のため、二重下線部は融合積和演算を用いる．領域の識別には符号ビットを用いるものとする．

謝辞 本研究は、JST 次世代研究者挑戦的研究プログラム JPMJSP2115 の支援を受けたものです．

参考文献

- [1] Konda T, and Nakamura Y, Introduction of double divide and Conquer and the recent progress, Proceeding of Algoritmy, pp.459–466, 2009
- [2] Demmel J, Applied Numerical Linear Algebra, SIAM, Philadelphia, 1997.
- [3] U. von Matt, The Orthogonal qd–algorithm, SIAM J.sci. Comput, Vol.18, pp.1163–1186, 1997
- [4] Rutishauser, H.: The Jacobi method for real symmetric matrices, Numerische Mathematik, Vol. 9, No. 1, pp. 1–10, 1966

モジュラリティ行列の固有値計算に基づいた次元削減手法とそのマテリアルズインフォマティクスへの応用

増田 伊吹¹, 二村 保徳¹, Jianbo Lin², Anh Khoa Augustin Lu³, 田村 亮², 宮崎 剛^{1,2}, 櫻井 鉄也¹

¹ 筑波大学, ² 物質・材料研究機構, ³ 東京大学

e-mail: s2320645@u.tsukuba.ac.jp

1 概要

本研究ではグラフラプシアン行列の固有値計算に基づいた次元削減手法と同様の枠組みにより, モジュラリティ行列の固有値計算に基づいた次元削減手法を提案する. 本手法は高次元空間において密集しているクラスタの内部構造を強調する性質を持つため, サブクラスタ探索等における有効性が期待される. 本手法をマテリアルズインフォマティクスデータに適用して得られる低次元空間において探索的データ解析を行い, その結果について示す.

2 背景

近年, 計算機の発達により大規模な第一原理計算に基づく分子動力学シミュレーションを高精度に行うことが可能となっている. 一方, 大規模な系の構造解析において, ミクロな秩序構造の変化を捉えることは困難である.

そこで, 各原子周辺の局所構造情報を高次元の記述子データに変換し, 様々な次元削減手法を適用することで低次元空間において探索的データ解析を行い, 系における局所構造の違いを検出する研究が行われてきた [1]. 新規材料探索においては未知の構造に対して頑健であることが求められるため教師なし機械学習手法が好ましく, また新規データ点をマッピングできて解釈性が高い線形の次元削減手法が好ましい.

既存の線形次元削減手法としては分散共分散行列の固有値計算に基づく PCA (Principal Component Analysis, 主成分分析) やグラフラプシアン行列の固有値計算に基づく LPP (Locality Preserving Projection, 局所性保存射影) [2] が広く用いられている. しかしながら, これらの手法では高次元空間で密集したクラスタ内部の僅かな差を捉えることが難しい.

3 モジュラリティに基づく次元削減手法

この課題を解決するために, 我々は後述する「モジュラリティ行列」の固有値計算に基づき, LPP を拡張した線形次元削減手法を提案する.

LPP は高次元データ $X \in \mathbb{R}^{n \times m}$ (n サンプル, m 特徴量) と X に対する Gauss カーネル適用や k 近傍グラフ生成により計算された類似度行列 $W = W^T \in \mathbb{R}^{n \times n}$ に対し, 目的関数 $f(\mathbf{y}) = \sum_{i,j} W_{ij} (\mathbf{y}^T \mathbf{x}_i - \mathbf{y}^T \mathbf{x}_j)^2$ を $\mathbf{y}^T X^T D X \mathbf{y} = 1$ という制約条件のもと最小化を考える (\mathbf{x}_i は X の第 i 行からなるベクトル, $D = \text{diag}(W\mathbf{1})$, $\mathbf{1}$ は要素が全て 1 のベクトル). これはグラフラプシアン行列 ($L = D - W$) に関わる一般化固有値問題 $X^T L X \mathbf{y} = \lambda X^T D X \mathbf{y}$ の非零最小固有値の固有ベクトル計算に帰着され, データの低次元 (1 次元) 表現は $X \mathbf{y}$ として与えられる. 一般の d 次元への次元削減は最小から d 個の非零固有値に対応する固有ベクトルによって得られる. LPP は W に紐づくグラフの Normalized Cut と呼ばれる指標の最小化によるグラフ分割問題と関連が知られている.

モジュラリティ [3] はグラフ分割の質を表す主要な指標の一つであり, その最大化はグラフに関

する離散最適化問題として幅広い分野に応用されている．モジュラリティはモジュラリティ行列 $M = W - \frac{1}{\nu} \mathbf{k} \mathbf{k}^T$ (ただし $\mathbf{k} = D\mathbf{1}$, $\nu = \mathbf{k}^T \mathbf{1}$) に関する特定の離散値ベクトルによる二次形式で表すことができる．このモジュラリティ行列を用いて LPP と同様の線形次元削減手法を考えると、これは一般化固有値問題 $X^T M X \mathbf{z} = \mu X^T X \mathbf{z}$ の最大から d 個の固有値に対応する固有ベクトルを求めることで、 d 次元の低次元表現を得る手法となる．

提案手法の目的関数は、LPP の目的関数にある種の正則化とみなせる項を加えた形に変形することが可能である．これにより、提案手法の特徴を説明することができる．提案手法は、LPP の性質である高次元空間で近傍関係にある点同士を低次元空間においても近づけようとする性質を持ちつつ、加わったもう一つの項により、次数すなわち周辺密度が高い点同士を引き離そうとする性質を持つ．これにより、高次元空間において密集したクラスタについて、そのクラスタに属する点同士が低次元空間において反発する．高密度なクラスタの内部構造を強調することができることから、サブクラスタ探索等における有効性が期待される．

数値実験の結果については講演にて説明する．

謝辞 本研究は科研費 21H01008, 23K20816, 22K12046 の支援を受けたものである．

参考文献

- [1] R.Tamura, M.Matsuda, J.Lin, Y.Futamura, T.Sakurai, and T.Miyazaki. “Structural Analysis Based on Unsupervised Learning: Search for a Characteristic Low-Dimensional Space by Local Structures in Atomistic Simulations.” *Physical Review B*, 105. (2022), 075107.
- [2] X. He, and P. Niyogi. “Locality Preserving Projections.” *Advances in Neural Information Processing Systems*, 16. (2003), 153–160.
- [3] M. E. J. Newman. “Finding Community Structure in Networks Using the Eigenvectors of Matrices.” *Physical Review E*, 74. (2006), 036104.

DE 積分型行列関数計算法に対する部分固有対デフレーションに基づく収束性改善およびその性能評価

今倉 暁¹, 山本 有作², 立岡 文理³, 曾我部 知広⁴, 張 紹良⁴

¹ 筑波大学, ² 電気通信大学, ³ 株式会社 IHI, ⁴ 名古屋大学

e-mail: imakura@cs.tsukuba.ac.jp

1 はじめに

本講演では、行列指数関数や行列平方根などに代表される行列関数 $f(A)$ [1] の効率的な計算法について考える。従来からテイラー展開やニュートン法に基づく方法など様々な解法が提案されているが、近年、二重指数関数 (DE) 型積分公式 [2] を用いた行列関数計算法 [3, 4, 5] が提案され注目を集めている。これらの DE 積分型行列関数計算法は、DE 公式に基づく高い収束性と数値積分に基づく高い並列化効率を持つ一方で、対象とする行列 A の固有値が関数 f ごとに定められる「ある特定領域近傍」に存在すると収束性が著しく低下するという問題点を持つ。

本講演では、DE 積分型行列関数計算法の収束性に悪影響を与える複素平面上の特定領域内部の固有値をデフレーションにより分離することで収束性を改善する手法を提案し、数値実験からその有効性を検証する。

2 DE 積分型行列関数計算法：行列符号関数計算 [3, 4]

負の実固有値を持たない正方行列 $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ に対し、行列実数乗 A^α ($0 < \alpha < 1$) は

$$A^\alpha = \frac{\sin(\alpha\pi)}{\alpha\pi} A \int_0^\infty (t^{1/\alpha} I + A)^{-1} dt$$

のように、実軸上の積分として表現できることが知られている [1]。この積分を $t = u^\alpha$ の変数変換および二重指数 (DE) 変換、すなわち $u = \psi(x) = \exp((\pi/2) \sinh(x))$ による変数変換を行い、数値積分で近似することで、行列実数乗の積分公式 $A^\alpha \approx \mathcal{I}_N^*(A)$ が下記のように得られる。

$$\mathcal{I}_N^*(A) = \frac{\sin(\alpha\pi)}{\pi} A \left(\frac{h}{2} F_{\text{DE}}(x_l) + \sum_{k=1}^{N-2} h F_{\text{DE}}(x_l + kh) + \frac{h}{2} F_{\text{DE}}(x_r) \right),$$

$$F_{\text{DE}}(x) = \psi'(x) \psi(x)^{\alpha-1} (\psi(x) I + A)^{-1}, \quad \psi(x) = \exp\left(\frac{\pi}{2} \sinh(x)\right).$$

3 デフレーションに基づく収束性改善

簡単のため行列 A が対角化可能であると仮定する ($A = X \Lambda X^{-1}$)。DE 積分型行列関数計算法は、 $\mathcal{I}_N^*(A) = X \mathcal{I}_N^*(\Lambda) X^{-1}$ のように対角化に基づき分解でき、その収束性は固有値毎に評価することが出来る。具体的には、行列実数乗計算においては「負の実軸近傍」、行列符号関数計算においては「虚軸近傍」のように、ある特定領域近傍の固有値の存在が収束性に悪影響を与える。

本研究では、この性質に着目し、収束に悪影響となる複素平面上の特定領域 Ω 内部の m ($\ll n$) 個の固有値 $\lambda_i \in \Omega$ とそれ以外の外部固有値 $\lambda_i \notin \Omega$ に分離することを考える。

$$\mathcal{I}_N^*(A) = X \mathcal{I}_N^*(\Lambda) X^{-1} = X_{\text{in}} \mathcal{I}_N^*(\Lambda_{\text{in}}) \tilde{X}_{\text{in}}^H + X_{\text{out}} \mathcal{I}_N^*(\Lambda_{\text{out}}) \tilde{X}_{\text{out}}^H. \quad (1)$$

この分離表現 (1) に基づき、収束の遅い固有値を除いた $\lambda_i \notin \Omega$ の固有値に限定して DE 型積分公式

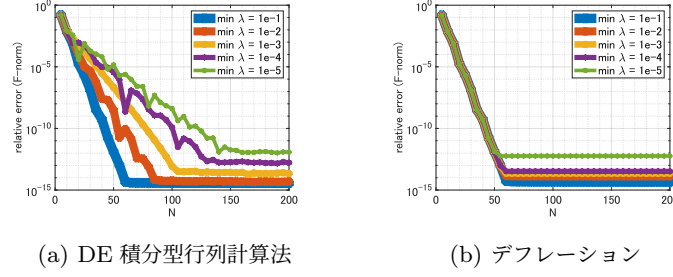


図 1: 収束履歴 (横軸: N , 縦軸: 相対誤差ノルム $\|\mathcal{I}_N(A) - f(A)\|_F / \|f(A)\|_F$)

を適用する「デフレーションに基づく収束性改善法」

$$f(A) \approx \mathcal{I}_N^{\text{Def}}(A) = X_{\text{in}} f(\Lambda_{\text{in}}) \tilde{X}_{\text{in}}^H + X_{\text{out}} \mathcal{I}_N^*(\Lambda_{\text{out}}) \tilde{X}_{\text{out}}^H$$

を提案する. 提案法は, まず内部固有対 $\Lambda_{\text{in}}, X_{\text{in}}, \tilde{X}_{\text{in}}$ を計算し, $X_{\text{in}} f(\Lambda_{\text{in}}) \tilde{X}_{\text{in}}^H$ については対角化に基づき直接計算する. 一方, $X_{\text{out}} \mathcal{I}_N^*(\Lambda_{\text{out}}) \tilde{X}_{\text{out}}^H$ については, 詳細は発表当日に解説するが, $\Lambda_{\text{in}}, X_{\text{in}}, \tilde{X}_{\text{in}}$ を用いて外部固有値に限定して DE 積分型行列計算法を適用することで計算する. DE 積分型行列計算法の適用を収束の速い外部固有値に限定することで収束性の改善が期待される.

数値実験として, 最小固有値 $a = 10^{-1}, 10^{-2}, \dots, 10^{-5}$ をパラメータとし, 行列 A の固有値が $a, 0.1+a, 0.2+a, \dots, 9.9+a$ となる行列 $A = X \Lambda X^{-1} \in \mathbb{R}^{100 \times 100}$ に対し, 行列実数乗 $A^\alpha, \alpha = 0.2$ を計算する. ここで, 固有ベクトル行列 X は条件数が $\kappa(X) = 10$ となるように乱数で生成した. 提案法において, 内部領域を $\Omega = (0, 0.45)$ とし, 領域内部の 5 つの固有対は複素モーメント型固有値解法 block SS-RR 法 [6] (を左固有ベクトルも同時計算するよう改良した方法) により計算した.

実験結果 (図 1) から, DE 積分型行列計算法は $a = \min_i \lambda_i$ が小さいほど収束性が顕著に低下するのに対して, 提案するデフレーション法は a に依らず非常に高い収束性を示していることがわかる.

参考文献

- [1] N. J. Higham, Functions of Matrices: Theory and Computation, SIAM, Philadelphia, 2008.
- [2] H. Takahasi and M. Mori, Double exponential formulas for numerical integration, Publ. RIMS Kyoto Univ., 9 (1974), 721–741.
- [3] 立岡文理, 曾我部知広, 宮武勇登, 張紹良, 二重指数関数型数値積分公式を用いた行列実数乗の計算, 日本応用数理学会論文誌, 28, (2018), 142–161.
- [4] F. Tatsuoka, T. Sogabe, Y. Miyatake, T. Kemmochi, and S.-L. Zhang, Computing the matrix fractional power with the double exponential formula, Electron. Trans. Numer. Anal., 54 (2021), 558–580.
- [5] 中屋貴博, 田中健一郎, 二重指数関数型数値積分公式による行列符号関数の数値計算, 日本応用数理学会論文誌, 31 (2021), 105–132.
- [6] T. Ikegami and T. Sakurai, Contour integral eigensolver for non-Hermitian systems: a Rayleigh-Ritz-type approach, Taiwan. J. Math., (2010), 825–837.