B-005

有理数演算を用いた桁数増加抑制シフト付き同時反復法による実対称行列の固有値の高精度計算

High precision symmetric eigenvalue computation through simultaneous iteration method with shift for suppression of number of digits by using rational number arithmetic

葉山 雄太 † 古賀 雅伸 †
Yuta Hayama Masanobu Koga

1. はじめに

数値計算をコンピュータで行うと，求めた解が真の値になるとは限らない．これは数値計算誤差による影響である．一方で，本論文で扱う有理数演算 [1] では，演算で誤差が発生することはないため，正確な計算結果を求めることが可能である．しかし，演算の繰り返しによる分子分母の桁数の増加や，無理数が取り扱えないために適用できる問題の幅が制限される等の課題がある．

固有値の計算は様々な分野で現れる重要な線形計算の一つである．有理数演算を用いて固有値計算を行う方法として，実対称行列を正確に 3 重対角化し，固有値が 1 つだけ存在する範囲を求め，2 分法やニュートン法で求める方法が提案されている[2].

固有値計算には，固有値を同時に計算する同時反復法がある．同時反復法の収束速度は行列の固有値の比によって決まるため，適切なシフト量を用いて固有値シフトを行うことで収束が加速される.しかし同時反復法では，行列の分解と積を多用するため，行列の次数が大きくなると，分母分子の整数を保持する大規模なメモリが必要となる．そこで，本論文ではシフト付き同時反復法に対する桁数増加を抑制するシフト量の丸め方を提案し，実験によって高精度に固有値を求めることができることを示す.

2. 提案手法

2.1 同時反復法

同時反復法は,反復によって同時に固有値を求める方法であり，QR 法や LR 法がある．一般的に浮動小数点数を用いる数値計算では数値計算誤差の影響を少なくするため，直交行列を用いる QR 法が使われる．一方で，有理数演算では，無理数の計算が入らない四則演算のみで構成される LR 法の方が適している.

同時反復法の対角成分は固有値へ，対角成分を除く下三角成分は 0 へ収束する性質がある．第 n 行の非対角成要素 $A(n,j)(j=1,\cdots,n-1)$ が十分に小さくなったならば，$A(n,n)$を近似固有値として保存し，第n行，第n列を除く$n-1$ 次の行列に対して，再び QR 法や LR 法を行うことを減次と呼ぶ[3].

さらに，同時反復法の収束速度は行列Aの固有値の比によって決まるため，適切なシフト量を用いて固有値シフトを行うことで収束が加速される．この性質を使った方法がシフト付き QR 法(LR 法)である.

† 九州工業大学 Kyushu Institute of Technology

図 1 にシフトなし及びシフト付き同時反復法のフローチャートを示す．ただし，図 1 中の$\lambda(i)(i=1,\cdots,n)$は，行列の近似固有値である.

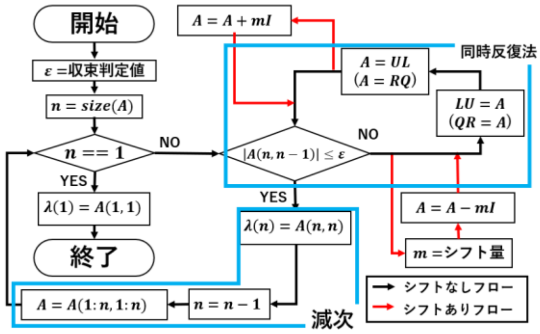

図 1. 同時反復法のフローチャート

2.2 基本行列による 3 重対角化

実対称行列Aの 3 重対角化には，ハウスホルダー法，ギブンス法，ランチョス法などがあるが，本研究で扱う四則演算のみで計算できる LR 法においては，掃き出し演算に基づく相似変換により 3 重対角化を行う[3]. 基本行列に基づく 3 重対角化は，平方根計算などを含まず四則演算のみで行えるため，有理数演算との相性はよい.

2.3 シフト量の有限桁近似

同時反復法のシフトにおいて，固有値シフトによって分数の桁数増加が起こるため，計算時間が増加する．本研究では，シフト量を次の手順で有限桁数の有理数に近似する方法を提案する.

1. 有理数表現のシフト量を有限桁の小数点表現に丸める
2. 丸めた値を有理数表現に変換

1 の操作では，有理数で表現されているシフト量を倍精度などの浮動小数点数表現に変換し，指定された有限桁に丸める．2 の操作では，丸めた値を小数点表現から有理数表現に変換する.

このシフト量の近似による影響について本研究では実験し評価する.

3. 評価

実対称行列で条件数が大きく固有値の解析解がわかっているフランク行列を用いて評価実験を行った．実験は Intel の Corei7-10510U を搭載したパソコンで行い，有理数演算は MATLAB R2022a のシンボリック数を用いた．シフト LR 法におけるシフト量として，対角成分の右下隅の成分を選んだ.

3.1 シフト量の有効桁数と計算時間

2.3 節での 1 の操作における有限桁数を変化させ，固有値が全て求まるまでの計算時間を測定した．ここで，フランク行列のサイズは 15 次とし，計算時間が 1 時間以上の場合，計算不能とした．図 2 にシフト量の小数点以下有効桁数を変更時の計算時間を示す．収束判定値εを 10^{-5}, 10^{-10}, 10^{-15}, 10^{-20} と設定した結果をまとめて図に示す．

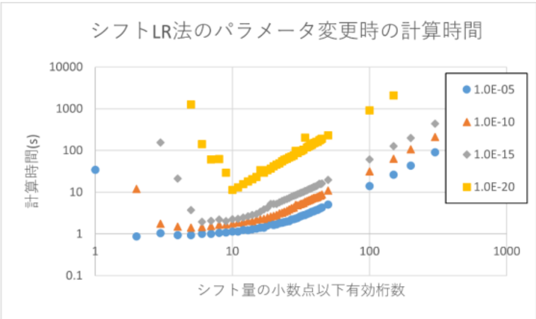

図 2. シフト量の小数点以下有効桁数を変更時の計算時間

シフト量の有限桁数をある程度までは減らすと，計算時間を短くすることができることがわかる．また，シフト量の有効桁数が増えると，行列全体の分数の桁数が急増し計算時間が伸びてしまい，計算不能に陥ってしまうことがわかる．シフト量を丸めない場合，始めはシフト量の桁数は小さくても次第に大きくなるので計算不能に陥ることになる．

しかし，有効桁数を小さくしすぎると，計算時間が長くなることがわかった．これは，シフト量の有限桁数を減らしすぎると固有値の近似精度が悪化し，シフトによる高速化の効果が減少するためと考えられる．

3.2 有理数演算による固有値の高精度計算

フランク行列のサイズと収束判定値を変更し，提案手法による固有値計算の精度と計算時間の評価を行った．ここで，シフト量の有効桁数を 10 桁とする．解析解$\lambda(i)$を用いて求まった近似固有値$\hat{\lambda}(i)$の相対誤差の最大値を図 3 に示す．比較として，倍精度での QR 法における相対誤差の最大値を図 3 に示す．ただし，相対誤差の最大値は，

$$\max_{i=1,\cdots,n}\left|\frac{\hat{\lambda}(i)-\lambda(i)}{\lambda(i)}\right|$$

とする．

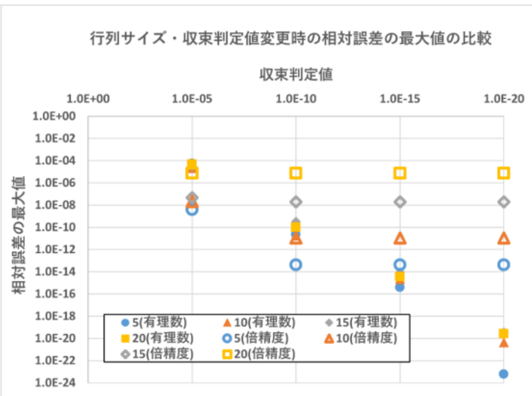

図 3. 相対誤差の最大値

収束判定値を小さくすると，近似固有値の相対誤差の最大値は小さくなっている．これは行列サイズにはよらない．さらに，倍精度では収束判定値を小さくしても，相対誤差の最大値がある一定の値以下にならないが，有理数演算では小さくなっている．

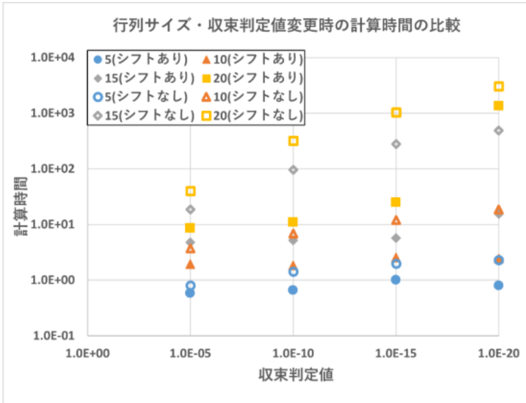

図 4. 計算時間

有理数演算によるシフトなし，および，シフトありの計算時間を図 4 に示す．行列サイズと収束判定値によらず，提案手法による有限桁近似シフトを用いた方がシフトなしより計算時間短いことがわかる．

4. おわりに

本論文では，有理数演算を用いたシフト LR 法による実対称行列の固有値の高精度計算について，基本行列による 3 重対角化と桁数増加を抑制するシフト量への近似方法を提案し評価を行った．提案手法によって桁数増加を抑制しながらシフトによって計算時間を短くし，かつ精度を落とすことなく計算できた．今後は，動的に丸める有効桁数を変化させることによって，さらに桁数増加を抑制しながら，計算時間を短くできる手法を検討したい．他にも，桁数の大きい有理数を精度指定して別の桁数の小さな有理数で表現する最良近似分数[2]を用いたシフト LR 法も検討したい．

参考文献

[1] 寒川光．有理算術演算における最大公約数計算について，HPC2016 論文集, pp. 1-9, 2016.
[2] 寒川光，有理数演算による実対称行列の正確な 3 重対角化による固有値の高精度計算, HPCS2013 論文集, pp. 11-22, 2013.
[3] 杉原正顯, 室田一雄, 線形計算の数理, 岩波書店, 2009.