博士論文要旨

Multidiagonal matrix analysis with tensor product

（多重対角行列のテンソル積による解析）

情報科学研究科博士後期課程　2014841002 大橋　あすか
主査　臼田　毅教授
副査　代田　健二准教授
曽我部　知広准教授
（名古屋大学）

工学の諸分野では，コンピュータによるシミュレーションが広く利用されている．そのシミュレーション対象に応じて，大規模で特殊な構造を持つ行列に対する数値計算が必要となる．本研究では，その数値計算で現れる特殊な構造の 1 つである多重対角行列に着目する．ここで，多重対角行列とは対角行列，3 重対角行列，5 重対角行列，7 重対角行列を含む行列である．例えば，3 重対角行列は有限差分法を用いた場合の常微分方程式の解法や 2 点境界値問題，そして大規模行列の固有値計算の前処理によって現れる． 5 重対角行列や 7 重対角行列についても同様に，さまざまな応用がある．応用例の性質によって，多重対角行列が大規模になり，その場合，その行列に対する数値計算では数値誤差の蓄積が生じることが考えられる．そこで，本研究では数値誤差への対策として，次の 2 つの特殊な構造をもつ行列に対する解析手法を提案する．第 1 に，3 項テンソル和の最大・最小特異値計算，第 2 に，k-3 重対角行列のテンソル積分解の提案である．いずれの解析においてもテンソル積が重要である．ここで，テンソル積とは 2 つの行列またはベクトルに対して定義され，演算結果の行列またはベクトルのサイズが，元の行列またはベクトルよりも大きくなる演算である．以降では，これら第 1，第 2 の解析の目的，方法，そしてその結果を示す．

まず第 1 の解析対象である 3 項テンソル和は，3 つの正方行列と単位行列に対するテンソル積と行列の和によって定義される行列で，テンソル積の定義により大規模な行列となる．例えば，3 つの正方行列を 100 次正方行列とすれば，3 項テンソル和は 100 万次正方行列となる．これは，ヘルムホルツ方程式や移流拡散方程式のうち，定数係数の 3 次元偏微分方程式の中心差分離散化で現れる行列であるため，離散化の分割数を細かくすることで莫大な行列になる．このような大規模行列に対する線形方程式の数値解において，その精度を見積もることは重要である．

そこで，本研究の第 1 の目的をこの数値解の誤差の程度の見積もりとする．ここで，誤差の程度を見積もりには，係数行列の最大・最小特異値の比（行列の条件数）が有用である．そこで本研究では，3 項テンソル和の最大・最小特異値を，汎用コンピュータにおいて低メモリで計算することを考える．その理由として，100 万次正方行列に対する最大・最小特異値を（特異値計算における一般的な直接法

の１つである）特異値分解によって計算するとき，その所要メモリは約 8TB となり，スーパーコンピュータのような大規模な計算機が必要となることが挙げられる．

この目的に向けて，3 項テンソル和に対する（最大・最小特異値を計算する一般的な反復法の１つである）ベクトル空間上の Lanczos 2 重対角化法に着目した．この手法は，特異値を求める行列の全体の保持を必要とせず，ベクトルとの積の演算結果のみを必要とする．この特徴を利用して，ベクトル空間上の既存アルゴリズムを，それと同型な 3 階のテンソル空間上のアルゴリズムに再構築することで低メモリ化を試みた．再構築のために，既存のアルゴリズムに 2 つの空間の準同型写像である vec 作用素を作用させた．これにより，3 項テンソル和とベクトルとの積は，3 階のテンソルと 3 つの小規模行列のモード積（3 階のテンソルと行列の積）の和で計算可能となった．3 つのN次正方行列に対する 3 項テンソル和を考えたとき，この実装について所要メモリのオーダーで比較すると，既存アルゴリズムが$O(N^4)$，提案手法が$O(N^3)$であり，所要メモリが削減された．この実装について，数値計算による検証をしたところ，最大特異値の収束に比べ最小特異値の収束に多くの反復回数を必要とした．

この結果を受けて，3 項テンソル和の最小特異値計算の高速化のために，3 項テンソル和の逆行列に対する Lanczos 2 重対角化法を 3 階のテンソル空間上に再構築することを考えた．逆行列とベクトルとの積は，一般的に線形方程式を解くことで計算されるが，本研究では 3 項テンソル和の構造を保存したまま分解し，分解で得られた行列とベクトルとの積を 3 階のテンソル空間上で実装した．これにより，小規模行列と 3 階のテンソルに対する計算のみで実装が可能となり，所要メモリが削減された．3 つのN次正方行列の 3 項テンソル和の実装を考えると，その所要メモリのオーダーは$O(N^3)$となった．この実装について，数値計算による検証をしたところ，最小特異値の収束のための反復回数が削減された．

次に第 2 の解析対象は，3 重対角行列を一般化したn次正方k-3 重対角行列のうち，特に Toeplitz 構造をもつ行列である．ここで，k-3 重対角行列とは，非対角成分が主対角成分のk離れた位置に現れる行列である．これらの行列もまた，3 次元偏微分方程式の離散化で現れる行列であるため，行列サイズが大きいことが考えられる．そこで本研究では，行列の保持の低メモリ化，加えて固有値・固有ベクトル，行列式，逆行列，行列のべき乗といった行列の解析を低メモリに行うことを目的とし，この行列に対するテンソル積を用いた分解法を 2 つ提案する．

1 つめの分解として，n次正方k-3 重対角 Toeplitz 行列に対して，パラメータn, kの関係によって，類似の構造を持つ小さな行列と単位行列とのテンソル積に分解が可能であることを示した．特に，$n = 2k$が成り立つとき，nの大きさに関わらず 2 次正方行列と単位行列とのテンソル積に分解された．

そして 2 つめの分解では，n次正方k-3 重対角ℓ-Toeplitz 行列（対角線上に並ぶ成分がℓ個の値の巡回である行列）に対して，3 つのパラメータn, k, ℓの関係から，Toeplitz 構造をもつℓ個の類似の構造の小規模行列と標準ベクトル同士の外積に対するテンソル積と，通常の行列の和を使って分解されることを示した．なお，この分解は 1 つめの分解と併用可能であり，併用することで，より小さな行列に分

解することができる．

以上の 2 つの分解によって，Toeplitz 構造を持つn次正方k-3 重対角行列に対する固有値・固有ベクトル計算やベキ乗，逆行列といった行列の解析が，分解後の小さい行列の解析から簡単に得られることを示した．

最後に，まとめとして，本研究では大規模な行列に対して直接的に数値計算を行った場合に考えられる数値誤差の蓄積という問題点に着目した．第 1 の解析では，テンソル構造を持つ大規模な行列の最大・最小特異値の計算を一般に用いられる Lanczos 2 重対角法がベクトル空間上で実装であることを利用して，それと等価なテンソル空間上での実装をすることで，汎用コンピュータによる誤差の程度の見積もりを可能にした．そして，第 2 の解析では，Toeplitz 構造をもつn次正方k-3 重対角行列に対してテンソル積を利用した分解によって，計算対象となる行列を小さくすることで，大規模行列の解析を小規模行列の解析から容易に計算可能となり，それに伴って数値誤差の蓄積を減少させることができると考えられる．