行列平方根におけるニュートン法のベクトルノルム最小化に基づく初期値に関する研究

情報科学科　水野　匠　　　指導教員：曽我部　知広

1　はじめに

行列平方根とは行列 $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ に対して，$X^2 = A$ を満たす行列 $X \in \mathbb{C}^{n\times n}$ のことであり，$\sqrt{A}$ と表記する．行列平方根を求める計算は量子情報科学や物性物理の分野において現れ，その高速かつ高精度な数値計算法の需要がある．

そこで，本研究では効率の良い数値計算法の一つとしてニュートン法 [2] に着目する．ニュートン法は，連立 1 次方程式の求解や行列積を使用する反復法であり，解に近い値を初期値とすることで，少ない反復回数で満足できる精度の解を得られることが知られている．ただし，ニュートン法の初期値は，元の行列 A と可換でなければならないという制約条件があるため，従来の初期値は単位行列とされていた．先行研究 [3] により，制約条件を満たす行列の集合上のある最適化問題を解くことで，単位行列よりもよい初期値が与えられた．しかし，その計算に総計算時間の半分をしめる場合がある．

そこで，本研究では別の最適化問題を解くことによって，初期値候補を導出するための計算時間の削減と，より少ない反復回数で収束する初期値候補を導出することを目標とし，その初期値の効果を数値実験により調べた．

2　ニュートン法の初期値の与え方

本研究では，アルゴリズム 1 に示す行列平方根を求めるためのニュートン法を用いる．

アルゴリズム 1：平方根を求めるためのニュートン法.

```
AX_0 = X_0 A かつ正則な X_0 を選ぶ.
for i = 0, 1, ...
    X_{i+1} = (1/2)(X_i + X_i^{-1} A)
end
```

このときの初期値 X_0 について，もとの行列と可換であるという条件を満たすために，以下に示す行列多項式の集合を用いる．

$$\mathcal{P}_n(A) := \left\{ \sum_{i=1}^{n} c_{i-1}A^{i-1} \,\middle|\, c_{i-1} \in \mathbb{R} \right\}.$$

上式は，$A\left(\sum_{i=1}^{n} c_{i-1}A^{i-1}\right) = \sum_{i=1}^{n} c_{i-1}A^{i} = \left(\sum_{i=1}^{n} c_{i-1}A^{i-1}\right)A$ であるため，$\mathcal{P}_n(A)$ の任意の元はニュートン法の初期値として利用できる．

次に，行列同士の距離の定義を行う．本研究では，行列の 2 ノルムを用い，$\|A - X^2\|_2^2$ とする．このとき，ある n に対して 2 ノルムを最小とする式は，

$$\min_{X\in\mathcal{P}_n} \|A - X^2\|_2^2 \Leftrightarrow \min_{X\in\mathcal{P}_n} \max_{\|\boldsymbol{x}\|_2=1} \|(A - X^2)\boldsymbol{x}\|_2^2$$

となる．この距離の最小化は一般に困難であるため，ベクトル $\boldsymbol{x}$ を $\|\boldsymbol{x}\| = 1$ となる乱数とし，特にここでは簡単のため，行列多項式の集合 $\mathcal{P}_2(A)$ を考えると，

$$\min_{X\in\mathcal{P}_2} \|(A - X^2)\boldsymbol{x}\|_2^2 \Leftrightarrow \min_{c_0,c_1\in\mathbb{R}} \|(A - (c_0I + c_1A)^2)\boldsymbol{x}\|_2^2$$

となる．ここで，$\boldsymbol{a} := A\boldsymbol{x}$，$\boldsymbol{b} := I\boldsymbol{x}$，$\boldsymbol{d} := A(A\boldsymbol{x})$ とし，上式の距離は c_0，c_1 についての 2 変数関数と見ることができる．

$$\begin{aligned} f(c_0,\ c_1) = {}& c_0^4(\boldsymbol{b},\boldsymbol{b}) + 4c_0^3c_1(\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}) + 2c_0^2c_1^2\left(2(\boldsymbol{a},\boldsymbol{a}) + (\boldsymbol{b},\boldsymbol{d})\right) \\ & - 2c_0^2(\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}) - 4c_0c_1(\boldsymbol{a},\boldsymbol{a}) + 4c_0c_1^3(\boldsymbol{a},\boldsymbol{d}) \\ & + c_1^4(\boldsymbol{d},\boldsymbol{d}) - 2c_1^2(\boldsymbol{a},\boldsymbol{d}) + (\boldsymbol{a},\boldsymbol{a}). \end{aligned}$$

ここで，$(\boldsymbol{a},\boldsymbol{b})$ は通常の内積を意味する．この 2 変数関数を以下のアルゴリズム 2 に従い，最小となる c_0，c_1 を求めニュートン法の初期値とする．

アルゴリズム 2：2 変数関数最適化に基づく初期値を与える手順.

1：決定した関数の停留点を求める.
2：停留点の中から，初期値の候補を探す.
3：目的関数値が最小となる候補を選び初期値とする.

3　実験結果

MATLAB 7.13.0.564(R2011b) を利用して実問題で扱われる行列 (S_au256)[1] を用いて数値実験を行った．真の解 $\sqrt{A}$ は未知であるため，近似解 $\hat{X}$ における相対残差 $\frac{\|A-\hat{X}^2\|_F}{\|A\|_F}$ を用いて解との近さを評価した結果を図 1 に示す．図 1 の縦軸は相対残差の常用対数であり，横軸は反復回数を示す．図中の先行研究，従来法，本研究はそれぞれ，先行研究の手法による初期値の与えた結果，初期値に単位行列を与えた結果，本研究の手法による初期値の与えた結果を示す．また，もとの行列 A から最小化する関数を決定する部分の計算時間は先行研究は 1.78 秒であるのに対し，本研究は 0.02 秒であった．

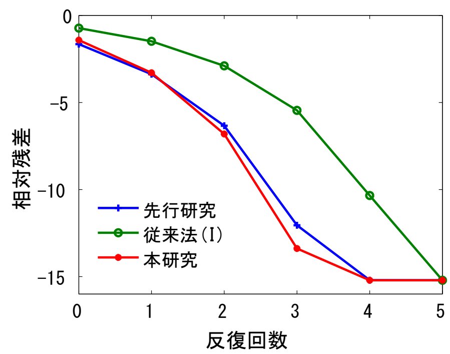

図 1　S_au256.

4　おわりに

本研究ではニュートン法の初期値の与え方に着目し，その制約条件である可換性を満たす行列の集合として n 次行列多項式 $\mathcal{P}_n(A)$ を与えた．次に，先行研究と同様に $\mathcal{P}_2(A)$ を考え，ベクトルノルム最小化に基づく初期値を提案した．数値実験により，先行研究よりも初期値の計算時間が早くなり，先行研究とほぼ同程度の反復回数で収束する結果が得られた．

今後は，行列の 2 ノルムに対する最小化問題を効率よく解くことが課題となる．

参考文献

[1] ELSES，URL: http://www.elses.jp.
[2] N. J. Higham，Functions of Matrices: Theory and Computation，SIAM，Philadelpha，2008.
[3] 森泉佳洋，行列平方根におけるニュートン法の初期値に関する研究，愛知県立大学大学院情報科学研究科修士論文，2013.