二重指数関数型数値積分公式を用いた行列符号関数計算の研究

2023年度 修論発表会 (2024年2月5日)
電気通信大学 情報理工学研究科 情報・ネットワーク工学専攻
山本有作研究室 宮下朋也

目次

行列符号関数について

- **符号関数**$\mathrm{sign}(z)$
  - 実部が0でない複素数zに対して

$$\mathrm{sign}(z) = \begin{cases} 1, & \mathrm{Re}\, z > 0, \\ -1, & \mathrm{Re}\, z < 0. \end{cases}$$

- **行列符号関数**$\mathrm{sign}(A)$
  - 符号関数を正方行列$A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ に拡張したもの
  - AのJordan標準形を$A = XJX^{-1}$とし，Jの対角要素を$\lambda_1, \ldots, \lambda_n$とすると

$$\mathrm{sign}(A) \equiv X\mathrm{sign}(J)X^{-1} = X\begin{pmatrix} \mathrm{sign}(\lambda_1) & & & 0 \\ & \mathrm{sign}(\lambda_2) & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \mathrm{sign}(\lambda_n) \end{pmatrix}X^{-1}$$

- **応用例**
  - シルベスター方程式の求解
  - 行列平方根計算

行列符号関数の数値計算方法

- **定義に基づく方法**
  - 対角化可能な行列の場合:　　対角化の計算量大
  - 対角化不可能な行列の場合:　Jordan標準形の数値計算の不安定性

- **Newton法**
- **Schur分解法**
- **積分表示に基づく方法**　**本研究で使用**
  - 中屋・田中らによって提案[1]
  - 行列符号関数を半無限区間での積分として表示し，二重指数関数型数値積分公式(DE公式)で計算
  - 各標本点での計算が独立なので並列化に向く

[1] 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，Vol. 31，No. 3(2021), 105-132.

中屋・田中の方法の実用化に向けた課題

- 理論誤差(離散化誤差・打切り誤差)の上界が与えられているが，上界が過大
- 丸め誤差の影響を考慮した解析がされていない
- 悪条件の行列に対して収束性の低下と誤差の増大がみられる
- 並列性能評価が行われていない

研究目的

- **中屋・田中の方法の誤差解析**
  - **新たな誤差上界の導出**
    中屋らによって導出された理論誤差上界(離散化誤差・打切り誤差)を改良する
  - **丸め誤差解析**
    丸め誤差の影響を考慮した誤差上界を導出する

- **中屋・田中の方法の改良**
  - 行列のスケーリングによる収束性の改善
  - 被積分関数変形による丸め誤差の低減

- **並列性能評価**
  - 並列計算機上での計算時間を他手法と比較する

二重指数関数型数値積分公式(DE公式)

- **台形公式**
  - 積分区間が$(-\infty, \infty)$で被積分関数が急減少な解析関数の場合には非常に高精度な数値積分公式

- **DE公式 (Double Exponential formula)**
  - 変数変換により台形公式が効率的に適用できるような被積分関数に変形
  - 被積分関数が二重指数関数的に減衰するように選んだもの

変数変換

$$T_h = \int_0^{+\infty} f(t)\mathrm{d}t = \int_{-\infty}^{+\infty} f\big(\phi(x)\big)\phi'(x)\,\mathrm{d}x$$

ただし，$\phi(t) = \exp\left(\frac{\pi}{2}\sinh t\right)$

変数変換後に台形公式を適用

$$T_h^* = h\sum_{k=-N_-}^{N_+} f\big(\phi(kh)\big)\,\phi'(kh)$$

DE公式による行列符号関数計算法(中屋・田中の方法)

- 行列符号関数の積分表示形式

$$\mathrm{sign}(A) = \frac{2}{\pi} A \int_0^{\infty} (t^2 I + A^2)^{-1}\,\mathrm{d}t$$

  - これにDE公式を適用した計算法が中屋・田中によって提案された

中屋・田中の方法

$$\mathrm{sign}(A) \simeq \frac{2}{\pi} A \sum_{k=-\infty}^{\infty} h(\phi^2(kh) I + A^2)^{-1} \phi'(kh) \qquad \text{離散化}$$

$$\simeq \frac{2}{\pi} A \sum_{k=-N_-}^{N_+} h(\phi^2(kh) I + A^2)^{-1} \phi'(kh) \qquad \text{適当な項数で打切る}$$

- 実用化のためには，離散化誤差・打切り誤差の理論的評価が必要

中屋・田中による誤差解析

DE公式を用いた行列符号関数計算の理論誤差上界

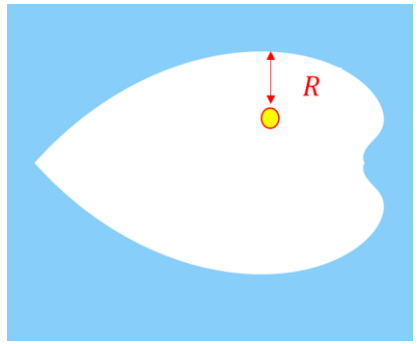
- 行列$A \in \mathbb{R}^{n\times n}$に対し，離散化誤差と打切り誤差の和として次の誤差上界を導出[1]
- 丸め誤差は考慮していない

$$\|E\|_F \leq \frac{n\sqrt{n}C(A,d)\|A\|_F(\sqrt{n}C'(A,d) + \|A^2\|_F)^{n-1}}{\pi R^{2n}} \exp\left(-\frac{2\pi dN}{\log(8dN)}\right)$$

- d: 被積分関数が正則である領域$\mathcal{D}(d)$を決める定数,
  R: 帯状領域の像$\phi(\mathcal{D}(d))$と$\pm i\lambda_j$ $(j = 1, 2, \ldots, n)$との距離の最小値,
  N: 標本点数,　$C(A,d), C'(A,d)$: 正の定数,

本誤差上界の問題点

- 誤差上界が行列サイズnに関して指数関数的 → 大規模行列に対しては過大な上界
- $C(A,d), C'(A,d)$などの評価が難しい定数を含む



Rの模式図

新しい誤差上界

- 本研究では$A = X\Lambda X^{-1}$のように対角化可能な場合について，次の誤差上界を導出した

$$\|E\|_F \leq 4\kappa_2(X)\left\{\frac{1}{\cos d}\left(\frac{\|A^2\|_F}{R^2}+\frac{\sqrt{n}}{3}\right)+\|A\|_F\right\}\exp\left(-\frac{2\pi d N_+}{\log(8dN_+)}\right)$$

N_+: 正の部分の標本点数
N_-: $\|E_{\mathrm{T}}^+\|_F$と$\|E_{\mathrm{T}}^-\|_F$の上界が同程度になるようにN_-を決める

刻み幅hは$2\|E_{\mathrm{T}}^+\|$と$\|E_{\mathrm{D}}\|_F$の上界が同程度になるように決め，以下のようにする

$$h = \frac{\log(8dN_+)}{N_+}$$

- **改善点**
  - $\|A^2\|_F/R^2$への指数関数的な依存性がなくなっている
  - nに関する多項式的な依存性についても改善されている
  - $C(A,d), C'(A,d)$などの定数が不要となり，上界が簡略化できた

ただし，この誤差上界では丸め誤差の影響を考慮できていない → 丸め誤差解析

丸め誤差解析

- 中屋・田中の方法の計算式

$Y(t) \equiv (t^2 I + A^2)^{-1} A$ とすると,

$$\begin{aligned} \mathrm{sign}(A) &= \frac{2}{\pi}\int_0^{\infty} Y(t)\,dt \\ &\simeq \frac{2}{\pi} h \sum_{k=-N_-}^{N_+} Y\big(\phi(kh)\big)\phi'(kh) \end{aligned}$$

- 次の2点で生じる丸め誤差を考える
  1. 各標本点での行列の計算における丸め誤差の合計
  2. 和の計算における丸め誤差

1.

$$\frac{2}{\pi} h \sum_{k=N_-}^{N_+} \left\| Y\big(\phi(kh)\big) - \hat{Y}\big(\phi(kh)\big) \right\|_F \phi'(kh)$$

真の値　　計算値

2.

$$\frac{2}{\pi} h \sum_{k=N_-}^{N_+} \left\| Y\big(\phi(kh)\big) - \hat{Y}\big(\phi(kh)\big) \right\|_F \phi'(kh)$$

丸め誤差解析

1. 各標本での行列の計算における丸め誤差の合計

$$\frac{2}{\pi}h\sum_{k=N_-}^{N_+}\left\|Y\left(\phi(kh)\right)-\hat{Y}\left(\phi(kh)\right)\right\|_F\phi'(kh)$$

$$\leq\left(\gamma_n\left(\kappa_2(X)\right)^4+3n^2\gamma_{3n}\,\hat{\rho}_n\left(\kappa_2(X)\right)^3\right)\left(\frac{4\sqrt{2}}{\pi}+\|\Lambda\|_F^3\left\|\Lambda^{-1}|\mathrm{Re}(\Lambda)|^{-\frac{1}{2}}\right\|_F^2\right)$$

固有値が実の行列の場合 $\left(\kappa_F(\Lambda)\right)^3$

2. 和の計算における丸め誤差

$$\left\|\hat{S}_n-S_n\right\|_F\leq\gamma_{N-1}\kappa_2(X)\left\{n-\frac{2}{\pi}\sum_{j=1}^{n}\log\left(\frac{\left|\mathrm{Re}(\lambda_j)\right|}{|\lambda_j|}\right)\right\}$$

S_n: 各標本点の和
$\mathbf{u}$: 丸め誤差の単位
$\gamma_n=\frac{n\mathbf{u}}{1-n\mathbf{u}}$
$\hat{\rho}_n$: 成長因子

– 1での誤差による影響が大きいことがわかる
– 誤差上界は，$\kappa_2(X)$について4次のオーダー，$\kappa_2(\Lambda)$について3次のオーダーとなる

実験目的

- 新たに導出した理論誤差上界の妥当性を検証する
- 丸め誤差上界についても妥当性を検証する

実験条件

- 行列$A \in \mathbb{R}^{100\times100}$に対して計算する
  - $A = X\Lambda X^{-1}$として作成 (Λ: 対角成分に固有値が並ぶ対角行列，X: ランダム行列)
- 行列乗算，逆行列計算はBLAS/LAPACKにより計算
- 計算はすべて倍精度浮動小数点演算

- 計算環境は以下の通り

CPU	AMD Ryzen 7 3700X (8コア，3.59GHz)
OS	Windows11
コンパイラ	Python 3.8.11 + NumPy 1.23.5
BLAS/LAPACK	Intel MKL

誤差上界の検証

- N_+と$\kappa_2(X)$の誤差への依存性を示す

凡例
- 実験結果
- 理論誤差上界
- 理論誤差上界 + 丸め誤差上界

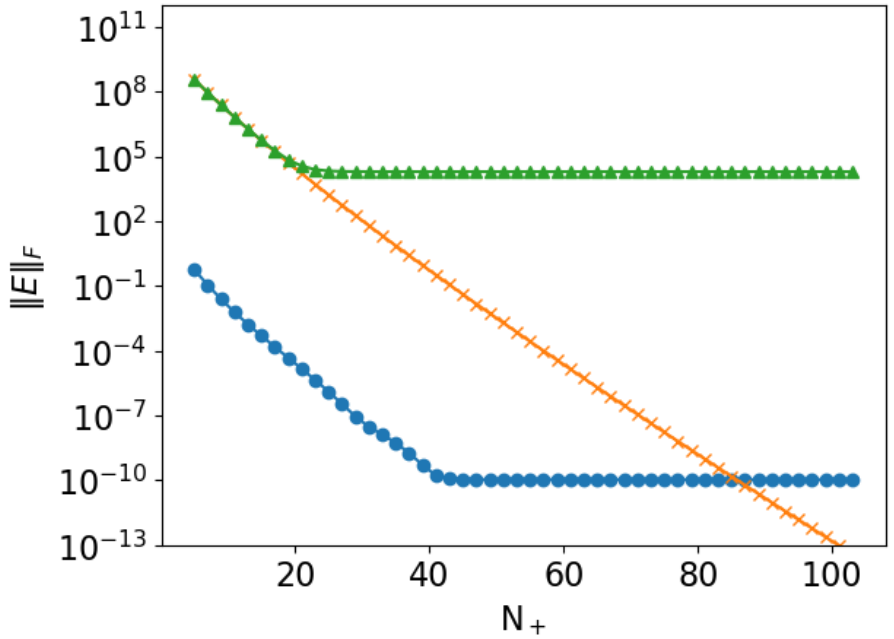


図1: 正の部分の標本点数N_+の誤差への依存性
$\lambda_{\min} = 0.1, \lambda_{\max} = 10, \kappa_2(X) = 100$
$d = 0.526, R = 3.57 \times 10^{-3}$
$\mathbf{u} = 2.22 \times 10^{-16}, \hat{\rho}_n = 10$

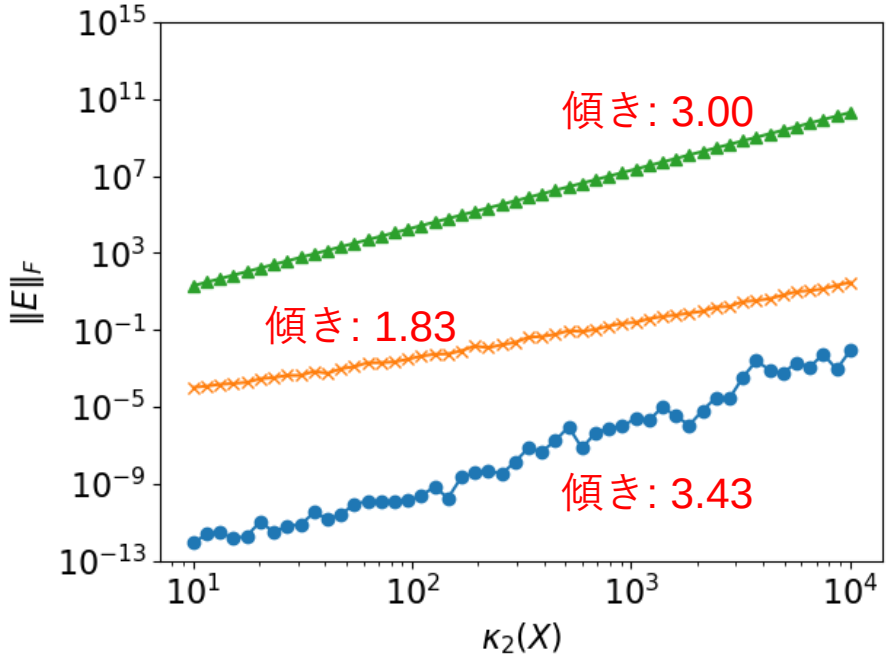


図2: $\kappa_2(X)$の誤差への依存性
$\lambda_{\min} = 0.1, \lambda_{\max} = 10, N_+ = 50$
$d = 0.526, R = 3.57 \times 10^{-3}$
$\mathbf{u} = 2.22 \times 10^{-16}, \hat{\rho}_n = 10$

- 中屋・田中の上界は10^{400}程度となるため，本上界はこれを大きく削減できている

被積分関数の変形による丸め誤差の低減

丸め誤差解析によりA^2の計算で誤差が大きくなっていることが判明

A^2が逆行列の中に含まれないように被積分関数を変形する

1. Aを逆行列の中に入れる方法

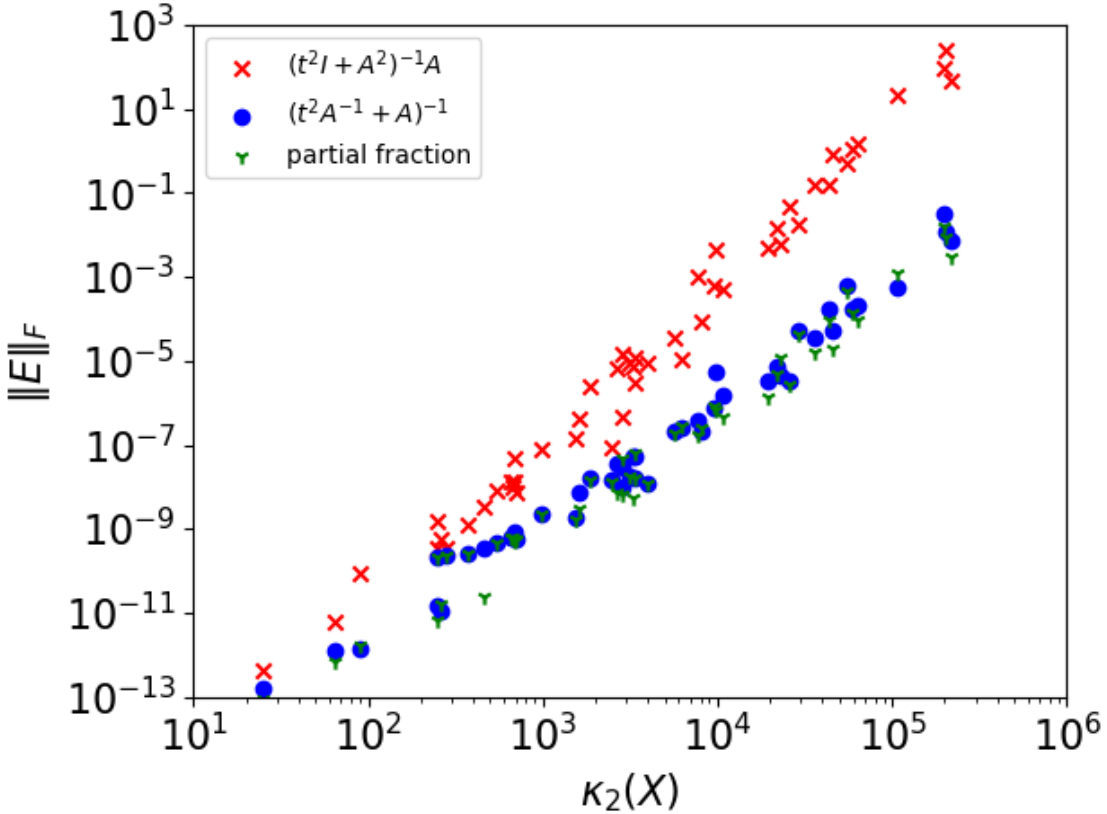
$$(t^2 I + A^2)^{-1} A = (t^2 A^{-1} + A)^{-1}$$

2. 部分分数に展開する方法

$$(t^2 I + A^2)^{-1} A = \frac{1}{2}\{(A - \mathrm{i}tI)^{-1} + (A + \mathrm{i}tI)^{-1}\}$$

被積分関数の変形による丸め誤差の低減

- $\kappa_2(X)$の誤差への影響を各被積分関数の場合について示す



各被積分関数での$\kappa_2(X)$に関する誤差

被積分関数	傾き（実験）	傾き（理論）
変形なし $(t^2I+A^2)^{-1}A$	3.84	4
Aを逆行列の中に入れる $(t^2A^{-1}+A)^{-1}$	2.79	未解析
部分分数展開 $(A-\mathrm{i}tI)^{-1}+(A+\mathrm{i}tI)^{-1}$	2.78	3

被積分関数の変形により$\kappa_2(X)$に関する誤差の影響が減少していることが確認できる

並列計算条件

- 次のような条件で計算する
  - 行列$A \in \mathbb{R}^{1000\times1000}$に対して行列符号関数を計算する
  - DE公式は標本点数81点，刻み幅0.1で計算
  - 各標本点をプロセスに割り当て並列計算: MPIにより並列化
  - 各標本点内での計算を並列化: openMPによる12スレッド並列
  - Newton法(12スレッド並列)の計算時間と比較
  - Newton法とDE公式での誤差は同程度になるようにする
- 計算機環境は以下のものを使用した

Newton法による行列符号関数計算

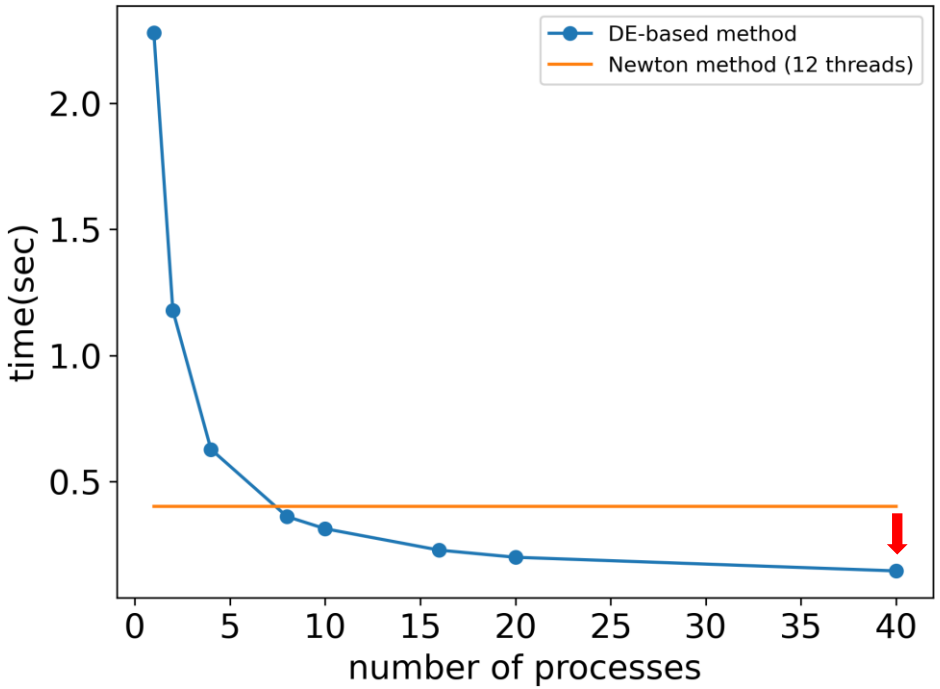
$$X_{k+1} = \frac{1}{2}\left(X_k + X_k^{-1}\right), \qquad X_0 = A$$

- kについて逐次的(並列化不可)
- ただしX_k^{-1}の計算は並列化可能

計算機名称	「富岳」1~10ノード
CPU	Armv8.2-A SVE (48コア．2.0GHz, 512ビットSIMD)
OS	Red Hat Enterprise Linux 8
コンパイラ	Fujitsu C/C++ Compiler 4.10.0 Tcdsds-1.2.38 オプション: -Kfast,KSVE,Kopenmp,SSL2BLAMP
BLAS/LAPACK	富士通 SSL II

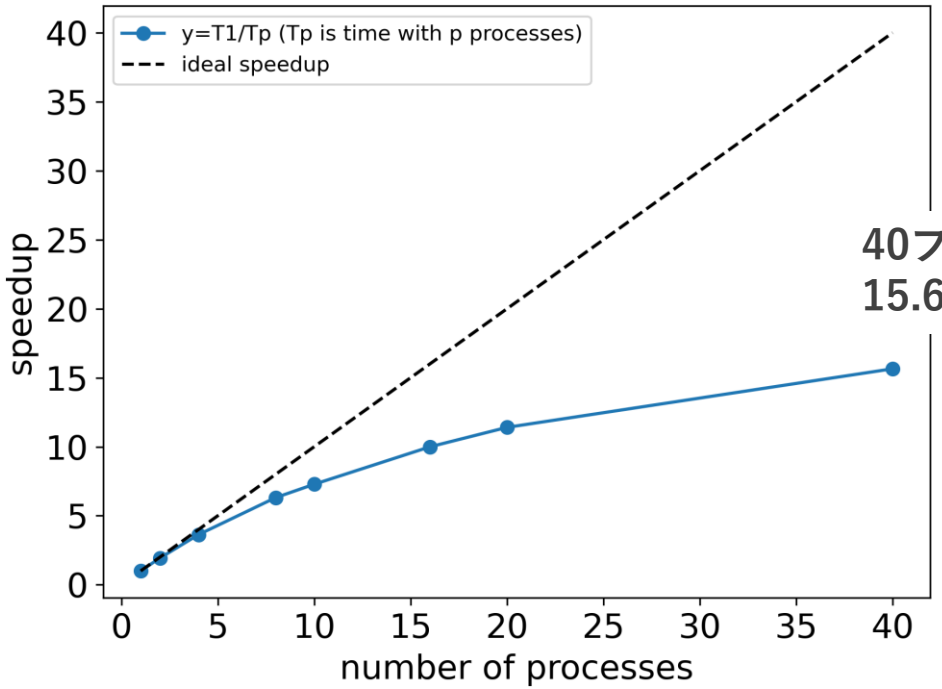
実験結果

- 左図にプロセス数に対する計算時間，右図に並列加速率を示す
  - Newton法は7回の反復での計算時間



2.76倍

図1: プロセス数に対する計算時間
8プロセス以上でニュートン法より高速
40プロセスではニュートン法の2.76倍



40プロセスで
15.6倍

図2: 並列加速率
プロセス数が増えるとき加速率が落ちるのは
プロセス0での計算の負荷不均衡などが原因

まとめと今後の課題

- **まとめ**

  DE公式に基づく行列符号関数計算の実用化に向け，次のことを行った

  1. 中屋・田中による理論誤差上界を改良した
  2. 丸め誤差の上界を導出した
  3. 被積分関数を変形することにより丸め誤差を低減する方法を提案した
  4. 本手法は既存手法に比べ並列性が高く，並列数を増やすことで高速に計算できることを示した

- **今後の課題**
  - 悪条件行列に対する精度改善のための改良 (丸め誤差の更なる低減)
  - より小さな誤差上界の導出
  - 被積分関数変形した場合についての丸め誤差解析 (特に$(t^2A^{-1}+A)^{-1}$の場合)
  - より高度な並列実装

- **論文・学会発表**
  - 公刊済み論文(英語)1件，投稿中論文(和文)1件，国際会議発表1件，国内会議発表3件