

# 多倍長計算による固有値分解の実現と応用

藤原宏志

京都大学大学院 情報学研究科

本研究では、多倍長計算による対称密行列の固有値問題の高精度計算とその逆問題への適用を論じる。逆問題で重要なある種の積分作用素に関する固有値は急激に減衰することが知られており、IEEE754 倍精度計算での数値的扱いは困難であった。そこで、多倍長計算による高精度な数値特異値分解 (numerical singular value decomposition) が考えられるが、ソフトウェアによる多倍長計算では計算に要する時間とメモリが問題となる。これに対して多倍長計算環境 `exflib` による並列固有値分解を実現し、提案する NSVD が逆問題解析の新しい手法となり得ることを示す。

## On Eigenproblems and Its Application to Inverse Problems by Multiple-precision Arithmetic

FUJIWARA, Hiroshi

Graduate School of Informatics, Kyoto University

We consider a high-accurate eigen-solver for a symmetric dense matrix by multiple-precision arithmetic and its application to inverse analysis. For an eigenproblem associated with an integral operator in inverse problems whose eigenvalues decay rapidly, accurate numerical treatments in the IEEE754 double precision arithmetic have not been realized. We propose numerical singular value decomposition by multiple-precision arithmetic “`exflib`” and their parallel computation to save computational time and memory. The proposed method shows a possibility of the use of the singular system in inverse analysis on digital computers.

### 1 緒言

工学、医学や地球物理では各種の非破壊検査法が重要であり、逆問題と関係して積極的に研究が進められている。典型的な非破壊検査である断層撮影法 (トモグラフィ) の幾つかは、積分作用素

$$Ku(x) = \int_I k(x, y)u(y)dy, \quad x \in I$$

をもちいて、適当な Hilbert 空間  $X, Y$  上での第一種積分方程式

$$Kf = g, \quad f \in X, g \in Y \tag{1}$$

の扱いに帰着される。典型的な逆問題では、 $X$  が有限次元でなく、 $K: X \rightarrow Y$  がコンパクト作用素となり、 $K^{-1}$  は存在しても有界作用素とならない。これは、観測データに相当する  $g$  に混入する誤差がわずかであっても、“解”として得られる  $f$  が真値を近似しているとは限らないことを意味する。数値計算の立場からは、 $Kf = g$  を直接離散化して得られる連立一次方程式の数値計算は数値的に不安定 (ill-conditioned) となり、10 進法で約 16 桁の精度の IEEE754 倍精度計算 [6] では、丸め誤差の影響によりその数値計算は破綻することが知られている。

一方, コンパクト作用素  $K$  は, 離散的な特異系  $\{(\mu_n, \varphi_n, g_n); n \in \mathbb{N}, \mu_n \geq 0, \varphi_n \in X, g_n \in Y\}$  を有し, 方程式  $Kf = g$  に対して  $g$  が  $K$  の値域に属するとき,

$$f = \sum_{n \in \mathbb{N}} \frac{1}{\mu_n} (g, g_n)_Y \varphi_n$$

が成立する. したがって任意の  $g \in Y$  に対しては

$$f_M = \sum_{n \in M} \frac{1}{\mu_n} (g, g_n)_Y \varphi_n$$

による“近似”が考えられる. これを spectral cut-off 正則化解という [7].  $g$  が誤差を含む場合, 特異系をもちいたノイズ除去や正則化法の計算が考えられるが, 一般に特異系を厳密に求めることは困難であるため, 数値計算により近似的に特異系を構成する数値特異値分解が考えられる [8]. しかし, 逆問題で重要なコンパクト作用素の特異値  $\mu_n$  は急激に減少することが多く, IEEE754 倍精度計算では, これらの解析に必要な精度と個数の特異系の構成は困難であった.

本研究ではこれに対し, 高精度な計算が可能な多倍長計算による固有値解法の利用を提案する. そのため, コンパクトな積分作用素の固有値問題の離散化と NSVD を §2 で提案し, §3 において NSVD の構成に関する固有値分解の並列化について述べる. さらに §3 では, 具体的な問題に対して NSVD の計算例を示し, spectral cut-off 正則化解を計算機上で構成し得ることを示す.

## 2 数値特異値分解

本節では, 区間  $I = [-1, 1]$  と,  $I \times I$  上の解析関数  $k(x, y)$  に対して

$$Ku(x) := \int_{-1}^1 k(x, y)u(y) dy, \quad -1 < x < 1$$

で定義される作用素の  $K : L^2(-1, 1) \rightarrow L^2(-1, 1)$  における特異値分解の離散化と固有値問題について述べる. この  $K$  はコンパクト作用素であり, 随伴作用素  $K^*$  は

$$K^*v(x) = \int_{-1}^1 k(y, x)v(y) dy$$

で与えられる. 以下,  $K$  は単射であると仮定する.  $K^*K$  の固有値の平方根のうち, 正のものを  $K$  の特異値といい,  $L^2(-1, 1)$  の正規直交系  $\{\varphi_n\}, \{g_n\}$  が存在して, 特異系  $\{\mu_n, \varphi_n, g_n\}$  は

$$K\varphi_n = \mu_n g_n, \quad K^*g_n = \mu_n \varphi_n, \quad n \in \mathbb{N}$$

を満たす. したがって特異系の数値計算は,  $\mu_n^2$  を固有値とする固有値問題に帰着される. すなわち, ある特異値  $\mu$  と,  $\mu$  に属する特異関数  $g$  に対して

$$\mu^2 g(x) = KK^*g(x) = \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 k(x, y)k(z, y)g(z) dz dy$$

を満たす  $\mu, g$  を求めればよい. 積分の近似として, 正整数  $N$  に対して  $N+1$  個の積分点  $a_j$  と重み  $w_j$  による数値積分則

$$\int_{-1}^1 f(x) dx \approx \sum_{j=0}^N f(a_j)w_j$$

を適用すると、離散化問題として

$$\tilde{\mu}^2 \tilde{g}_i = \sum_{j=0}^N \left( \sum_{k=0}^N k(a_i, a_k) k(a_j, a_k) w_k w_j \right) \tilde{g}_j, \quad 0 \leq i \leq N$$

を得る. ここで  $\tilde{\mu}, \tilde{g}_i$  は, それぞれ  $\mu, g(a_i)$  の相当値であり,  $\tilde{g}_i$  は  $\|g\|_{L^2(-1,1)}^2 = 1$  を考えて  $\sum_{j=0}^N \tilde{g}_j^2 w_j = 1$  で正規化されているものとする.  $w_i > 0$  より, これは

$$\tilde{\mu}^2 \sqrt{w_i} \tilde{g}_i = \sum_{j=0}^N \left( \sum_{k=0}^N k(a_i, a_k) k(a_j, a_k) w_k \sqrt{w_i w_j} \right) \sqrt{w_j} \tilde{g}_j, \quad 0 \leq i \leq N \quad (2)$$

となり, 対称行列の固有値問題に帰着される.

充分大きい離散化パラメータ  $N$  に対して,  $\tilde{\mu}, \tilde{g}_i$  は  $K$  の特異系  $\mu, g(a_i)$  に収束することが期待される [1]. そこで  $\tilde{\mu}$  が大きいほうから順に  $\tilde{\mu}_1, \dots, \tilde{\mu}_{N+1}$  とし,  $\tilde{\mu}_n$  に属する固有ベクトルを  $(\tilde{g}_{n,0}, \dots, \tilde{g}_{n,N})$  とする. これらをもちいると, Nyström 法と同様にして特異関数の近似を構成することができる. 特に spectral cut-off 正則化解は次で与えられる.

$$u_M^{(N)}(x) = \sum_{n \leq M} \frac{1}{\tilde{\mu}_n^2} \left( \sum_{j=0}^N f(a_j) w_j \tilde{g}_{n,j} \right) \left( \sum_{i=0}^N k(a_i, x) w_i \tilde{g}_{n,i} \right).$$

### 3 固有値計算の並列化と数値計算例

式 (2) は密対称行列の固有値問題であり, その解法には多くの手法が提案されている. ここでは Householder 変換による三重対角化と陰的シフト QL 法の適用を考える [9]. 非適切問題への適用を考えると, 値の大きな固有値から順に, 必要な個数の固有値と固有ベクトルを高精度で求めることが要求される. 実際には, 扱う積分作用素の性質, すなわち固有値の減衰の状況と要求される特異値の精度に応じて, 固有値分解をおこなう多倍長計算の精度, 数値積分の離散化パラメータと必要な固有値の個数などが決定される.

高精度な演算を実現するための多倍長計算には exflib [2] をもちい, MPI による並列計算の固有値分解の実装をおこなった. Householder 変換においては各プロセスが列毎にデータを保持して分散処理をおこなう. それに続く QL 法では, 固有値を求める計算は全てのプロセスでおこない, 固有ベクトルを求める計算のみの並列化をおこない, プロセス間通信を削減している. 固有ベクトルを求める計算は, 各プロセスが行毎にデータを保持して分散処理をおこなう.

#### 3.1 数値計算例と計算時間

上述の計算手法を, 光の回折や画像再構成に現れる積分作用素 [5, 11]

$$Ku(x) = \int_{-\pi/2}^{\pi/2} ((\cos x + \cos y) \operatorname{sinc} \psi_{x,y})^2 u(y) dy, \quad \psi_{x,y} = \pi(\sin x + \sin y) \quad (3)$$

に適用して得られる特異系を図に示す. 積分則には

$$a_j = \cos \frac{j\pi}{N}, \quad w_j = \frac{2}{N t_j} \left( 1 + \sum_{\substack{k=2 \\ k:\text{even}}}^N \frac{2}{1-k^2} \cos \frac{jk\pi}{N} \right), \quad t_j = \begin{cases} 2 & j = 0, N; \\ 1 & \text{otherwise} \end{cases}$$

表 1: 三重対角化 (上段) と QL 分解 (下段) の計算時間 (単位: 秒), 括弧内は逐次計算との比

N	逐次計算	並列計算		
		8 procs	16 procs	20 procs
200	99	19 (5.2)	12 (8.3)	11 (9.0)
	242	38 (6.4)	23 (10.5)	21 (11.5)
400	789	133 (5.9)	79 (10.0)	71 (11.1)
	1323	184 (7.2)	104 (12.7)	89 (14.9)
800	6263	1037 (6.0)	559 (11.2)	478 (13.1)
	16616	2233 (6.9)	1203 (13.8)	990 (16.8)

計算環境: Opteron 2214 (2.2GHz), gcc, exflib, 10 進 1500 桁

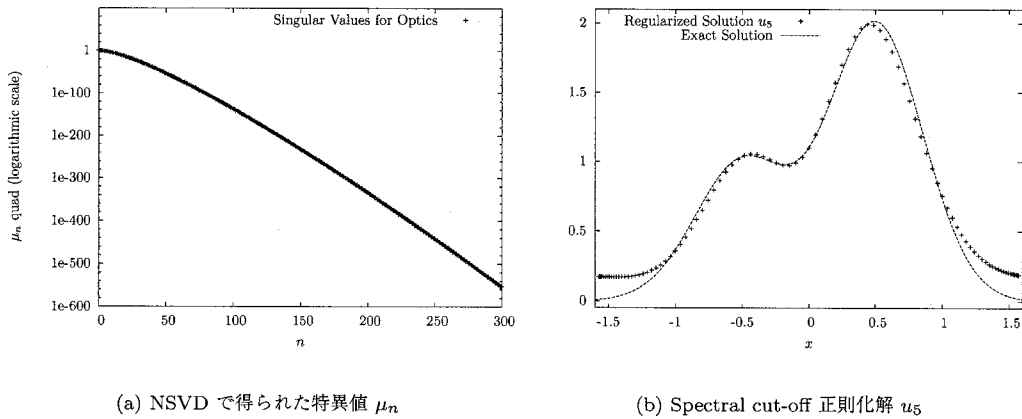


図 1: 作用素 (3) に対する数値特異値分解の計算結果

による高精度積分 [3] を利用した。計算精度を 10 進法で 1500 桁とし, Opteron 2214 (2.2GHz) で計算に要した時間を表 1 に示す。使用したメモリは  $N = 800$  の場合で合計約 1.1GB であった。

この計算で得られた特異値を図 1(a) に示す。縦軸を対数目盛で表しており, この場合,  $n$  に従って特異値が指数的に減衰していることがわかる。また, 得られた NSVD をもちいて

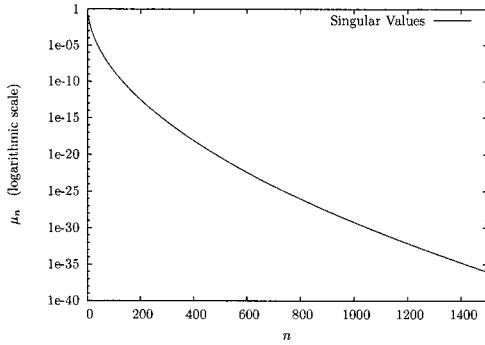
$$u(x) = 2 \exp(-4(x - 0.5)^2) + \exp(-4(x + 0.5)^2), \quad -\pi/2 \leq x \leq \pi/2$$

を解とする場合, 1% の相対誤差を含むデータに対する spectral cut-off 正則化解  $u_5$  を図 1(b) に示す。

### 3.2 実 Laplace 逆変換への適用

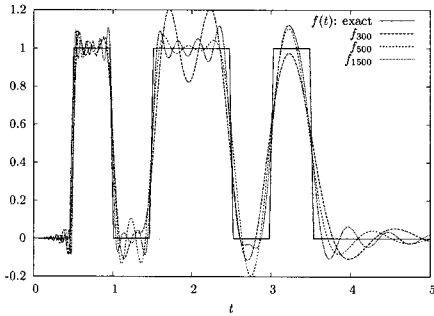
理学および工学において基本的な解析手法である Laplace 変換

$$F(p) = \mathcal{L} f(p) = \int_0^{\infty} e^{-pt} f(t) dt$$

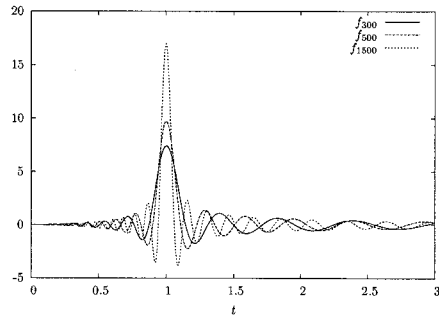


$n$	Computed $\mu_n$
1	0.63385083662845985406
2	0.26410894288321943850
3	0.13597862611602033697
4	0.07771564257385000623
5	0.04743480283724090860
6	0.03032839290174012146
1500	$9.5760396312657578231 \times 10^{-37}$

図 2:  $L$  の特異値に対する数値計算結果



(a) 階段関数の Laplace 変換に対する正則化解



(b) 超関数の意味の Laplace 変換に対する正則化解

図 3: 実 Laplace 逆変換に対する NSVD の結果

に対して、実逆変換、すなわち  $p \geq 0$  で  $F(p)$  が与えられたときに  $f(t)$  を求める問題を考える。 $t \geq 0$  で定義されて絶対連続で、 $f(0) = 0$  かつ

$$\|f\|_{H_K}^2 := \int_0^\infty |f'(t)|^2 \frac{e^t}{t} dt < \infty$$

を満たす函数  $f(t)$  からなる  $H_K$  を考える [10]。  $Lf(p) := (\mathcal{L}f)(p)p$  とすると、  $L: H_K \rightarrow L^2(0, \infty)$  は単射なコンパクト作用素であり [4]、提案する NSVD が適用できる。  $L$  の NSVD で必要な半無限区間上の積分の離散化では、  $L, U$  を打ち切りパラメータ、  $N$  を離散化パラメータとして

$$h = \frac{U-L}{N}, \quad x_j = L + jh, \quad a_j = \exp\left(\frac{\pi}{2} \sinh x_j\right), \quad w_j = \frac{\pi}{2} h a_j \cosh x_j$$

とする二重指数型積分公式 [12] をもちいる。  $L = -7, U = 7, N = 12000$  とし、Opteron (2.2GHz) と Athlon64 (2.2GHz) で構成されるクラスタによる 28 プロセスの並列計算をおこなったところ、三重対角化に 45 時間 40 分、QL 法に 40 時間 30 分を要し、メモリは合計で約 24 GB を要した。得られた特異値のうち  $\{\mu_n\}_{n=1}^{1500}$  を図 2 に示す。また、階段関数および  $F(p) = \exp(-p)$  の場合の正則化解をそれぞれ図 3(a),(b) に示す。

## 4 Concluding Remarks

本研究では、多倍長計算での固有値分解による積分作用素の特異値分解を実現し、並列計算により大規模かつ高精度な数値計算と逆問題への適用のひとつの可能性を示した。

固有値問題の解法とその並列化は数多く提案されている。本研究では、対称行列に限った固有値分解に限定して三重対角化と QL 法の並列化をおこなったが、必要な固有値の値の範囲を取り込む手法が必要であると考えられる。並列計算においては、IEEE754 倍精度計算で適するとされている並列化が必ずしも多倍長計算でも適するわけではない。多倍長計算では、個々の四則演算の速度と多倍長数の通信速度は演算の精度などに依存しており、これらの比を考慮にいたれた新たな指標が必要となると考えられる。

## 参考文献

- [1] ATKINSON, K. E.: The numerical solution of the eigenvalue problem for compact integral operators. *Trans. Amer. Math. Soc.* **129** (1967), 458–465.
- [2] <http://www-an.acs.i.kyoto-u.ac.jp/~fujiwara/exflib>.
- [3] FUJIWARA, H.: Numerical method for integral equation of the first kind under multiple-precision arithmetic. *Theoretical and Applied Mechanics Japan* **52** (2003), 192–203.
- [4] FUJIWARA, H., MATSUURA, T., SAITOH, S. and SAWANO, Y.: The real inversion of the Laplace transform by numerical singular value decomposition. (in preparation).
- [5] HANSEN, P. C.: Analysis of discrete ill-posed problems by means of the L-curve. *SIAM Review* **34** (1992), 561–580.
- [6] IEEE standard for binary floating-point arithmetic : ANSI/IEEE std 754-1985 (1985). Reprinted in *SIGPLAN* **22** (1987), 9–25.
- [7] KRESS, R.: *Linear Integral Equations (1st Ed.)*. Springer-Verlag (1989).
- [8] MIKHLIN, S. G. and SMOLITSKIY, K. L.: *Approximate Methods for Solution of Differential and Integral Equations*. American Elsevier (1967).
- [9] PRESS, W. H., TEUKOLSKY, S. A., VETTERLING, W. T. and FLANNERY, B. P.: *Numerical Recipes in C++*, 2nd ed. Cambridge University Press (2002).
- [10] SAITOH, S.: Approximate real inversion formulas of the Laplace transform. *Far East J. Math. Sci.* **11** (2003), 53–64.
- [11] SHAW, C. B.: Improvement of the resolution of an instrument by numerical solution of an integral equation. *J. Math. Anal. Appl.* **34** (1992), 561–580.
- [12] TAKAHASI, H. and MORI, M.: Double exponential formulas for numerical integration. *Publ. Res. Inst. Math. Sci.* **9** (1974), 721–74.