様　式　Ｃ－１９、Ｆ－１９、Ｚ－１９　（共通）

科研費 KAKENHI

科学研究費助成事業　　研究成果報告書

平成 ２６ 年　 ６ 月　 ６ 日現在

機関番号：１２６０１
研究種目：研究活動スタート支援
研究期間：2011～2013
課題番号：２３８６００１４
研究課題名（和文）高速特異値計算アルゴリズムの開発

研究課題名（英文）Fast algorithm of the singular value decomposition

研究代表者
相島　健助（AISHIMA, KENSUKE）

東京大学・情報理工学（系）研究科・助教

研究者番号：４０６０９６５８
交付決定額（研究期間全体）：（直接経費）　1,800,000円、（間接経費）　540,000円

研究成果の概要（和文）：行列の特異値分解は，現代の科学技術計算において重要な役割を果たす．本研究では，特異値分解アルゴリズムの高速化を行った．現在，特異値計算の反復計算部分の最も有力なアルゴリズムがdqds法である．本研究では，このアルゴリズムにアグレッシブデフレーションという技法を導入することで高速化した．行列によっては，２倍から５倍の高速化に成功している．理論解析の面では，dqds法におけるシフト戦略部分に対して収束性を明らかにした．さらに，固有値計算アルゴリズムのQR法に対しても新たなマルチシフト戦略を提案し収束証明を与えた．

研究成果の概要（英文）：Matrix singular value decomposition plays an important role in many application areas. In this study, we have improved the differential quotient difference with shifts (dqds) algorithm, which is one of the most efficient iterative algorithms of bidiagonal SVD. We have incorporated a new aggressive deflation into the dqds. Our algorithm is faster than the original algorithm. Also we showed convergence rates of the dqds. Furthermore, we proposed a new multishift QR algorithm for symmetric eigenvalue problems. We also proved its global convergence.

研究分野：工学

科研費の分科・細目：工学基礎

キーワード：線形計算

１．研究開始当初の背景

行列の特異値分解の重要性は，現代工学において言を待たないであろう．行列の特異値計算の反復部分のアルゴリズムとしては dqds 法がよく利用されている．dqds 法とは 2006 年の SIAM の線形計算会議にて，論文賞の対象となった大変有力なアルゴリズムである．しかしながら，収束に関する理論解析の面で，数年前まで多くの課題が残されていた．特異値への収束が証明されていたわけではなく，また収束付近での局所的な収束速度に関しても厳密な評価は与えられていなかった．筆者はこれらの問題をここ数年で解決し，この結果を基にアルゴリズムを見つめ直し洗練する段階に達したと言える．さらに，近年の行列の大規模化に伴い，dqds 法をより高速にすることが求められていた．

２．研究の目的

特異値計算アルゴリズム dqds 法にアグレッシブデフレーションを導入し高速化する．アグレッシブデフレーションとは，もともと QR 法という固有値計算アルゴリズムを高速化する技術である．歴史的経緯を顧みると，もともと dqds 法は QR 法の改良により導出されているため，この経緯に着目し dqds 法の長所である安定性を保持しつつ高速なアグレッシブデフレーションを開発する．さらにこれまでの収束性解析に基づきより高品質なシフト戦略の提案に挑戦する．また，固有値計算において今なお有力視されている QR 法に対しても，同様の改良を行う．

３．研究の方法

対象とするアルゴリズムである dqds 法の漸化式に着目し，混合誤差解析に基づく安定性を失わない形で高速化を試みる．またシフト戦略の改良に基づき高速化を施す．その際，関連の強い QR 法との関係に着目し，両アルゴリズムの長所を継承する形で改良することを考えた．

４．研究成果

精度が理論保証できるアグレッシブデフレーション付き dqds 法を提案した．

ここでいう高精度とは，混合誤差解析の意味での安定性を指す．以下に詳細を述べる．

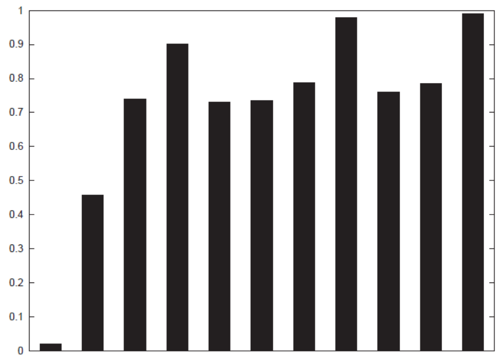
まず dqds 法の実態は上二重対角行列に対する反復式でありこの行列を B とおくことにすると，この B を対角行列に近づけ，その対角成分から求めるべき特異値を得るアルゴリズムである．ただし，数値計算においては丸め誤差がつきものであるため，得られる特異値には丸め誤差がのった値であり，厳密な解ではない．ただし，次の図で示すような混合誤差解析を施すことで，得られる特異値の誤差はマシンイプシロンレベルに抑えられることが数学的に証明されている．

$$
\begin{tikzcd}
B \arrow[r, "\text{computed}"'] \arrow[d, "\begin{array}{l}\text{change}\\ q_i \text{ by } 3\epsilon\\ e_i \text{ by } \epsilon\end{array}"] & \hat{B} \\
\dot{B} \arrow[r, "\text{exact}"] & \ddot{\hat{B}} \arrow[u, "\begin{array}{l}\text{change}\\ q_i \text{ by } 2\epsilon\\ e_i \text{ by } 2\epsilon\end{array}"]
\end{tikzcd}
$$

本研究では，反復計算の途中におけるアグレッシブデフレーションにおいても，dqds 法の漸化式を利用したアルゴリズムを設計した．これを模式的に表したのが下図であり，*が非零成分であり，矢印はある種の直交変換を意味している．そして+がこの一連の変換において新たに生じた非零成分を示している．

$$
\begin{pmatrix} * & * & & & \\ & * & * & & \\ & & * & * & \\ & & & * & * \\ & & & & 0 \end{pmatrix}
\to
\begin{pmatrix} * & * & & & \\ & * & * & & \\ & & * & * & + \\ & & & * & 0 \\ & & & & 0 \end{pmatrix}
$$
$$
\to
\begin{pmatrix} * & * & & & \\ & * & * & & + \\ & & * & * & 0 \\ & & & * & 0 \\ & & & & 0 \end{pmatrix}
\to
\begin{pmatrix} * & * & & & + \\ & * & * & & 0 \\ & & * & * & 0 \\ & & & * & 0 \\ & & & & 0 \end{pmatrix}
$$

重要なのは，上のアルゴリズムはもはや通常のアグレッシブデフレーションのアルゴリズムとはかなり異なるものになっているにも関わらず，数学的には完全にアグレッシブデフレーションの振る舞いを再現できており，メリットとして計算量が大幅に削減されている点である．そして上記の混合誤差解析に基づき精度解析を行うことで，数値的に高い相対精度を保持できる点は特筆に値する．こういった様々な長所を有するアグレッシブデフレーション付き dqds 法を提案し，本研究ではこのアルゴリズムに対し数値実験により性能を調査した．実験の結果は下図にまとめられる．図の横軸が典型的なテスト行列の各サンプルを表し，縦軸は，既存の標準ライブラリである LAPACK(Linear Algebra PACkage)に実装されている dqds 法の計算速度と提案手法の実装の比を表している．ここでのテスト行列では常に縦軸の値が１以下になっており，高速化が確認できる．



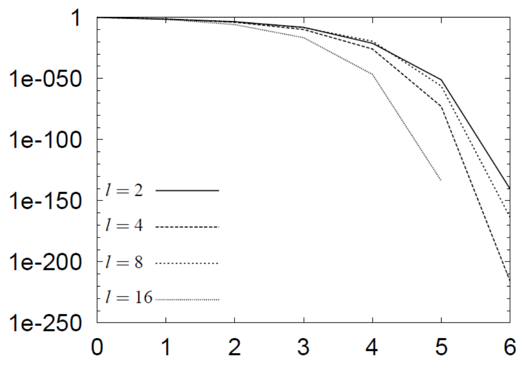
また得られる特異値の相対精度は 10 のマイナス 12 乗程度であり，高い相対精度が保持できている（LAPACK の実装と同等）ことが確認されている．

本研究の最大の貢献は上記のアグレッシブデフレーション付き dqds 法にあると言えるが，関連してシフト戦略に関しても有用な知見を与えたので，次にそれについて述べることにする．
アグレッシブデフレーションにより dqds 法が高速化できることは既に述べた通りだが，高速化の方針としてもうひとつの重要な側面としてシフト戦略の開発が挙げられる．
もともと LAPACK の dqds 法では，効果的なシフトを何種類も用意して反復行列の右下の成分をモニタリングすることで最も効果的なシフトを与えるという戦略をとっているが，これは通常のデフレーションを用いる場合に最適化されたシフト戦略であり，アグレッシブデフレーションを導入した dqds 法に対して最適なシフト戦略とは何かを吟味する必要がある．
その際重要になってくるシフト戦略の性質が，反復におけるシフトの採用と棄却の比率である．もともと LAPACK で採用されているシフト戦略は収束を完全に保証するものではなく，一度反復を進めて収束と異なる方向に反復が進んだ場合はその反復を棄却してシフトをとり直して再計算を行うという手順がとられている．したがってもし反復の棄却が生じず必ず収束の方向に進めるシフトが与えられれば理想的である．本研究では，Rutishauser シフトと言う有名なシフトが，１度採用されればその後の反復でもこの性質を保持し続けることを証明した．下図は，あるテスト行列に対して Rutishauser シフト付き dqds 法を実行した場合のシフトの振る舞いを表現しており，n が反復回数，k がシフトを表しており，この実験ではゼロシフトを込みにした複数のシフトを採用している

n	0	1	2	3	4	5	6	7
k^*	9	10	-1	-1	-1	-1	-1	-1

ものの，2 反復目以降は必ず Rutishauser シフト(k=-1)が採用されて反復が進んでいることが確認できる．これは他のシフトにはない優れた安定性である．

最後に，QR 法に対する研究成果について述べる．アグレッシブデフレーションについて，対称行列に対する QR 法にも同様に導入することができる．また QR 法については高速化のため並列計算に適したマルチシフト QR 法というアルゴリズムが提案されているが，本研究では新たなマルチシフト戦略である Wilkinson 型マルチシフト QR 法を提案し，その収束証明を与えている．
もともと通常のシングルシフトの QR 法では Wilkinson シフトが用いられており，このアルゴリズムは収束証明があり多くの行列に対して３次収束と言う高速なレートが実現できるため LAPACK にも実装され広く利用されている．本研究では，このシフト戦略をマルチシフト戦略へ自然に拡張したということである．証明の方針も，すぐに Wilkinson の証明を援用するのは難しく見えるが，ある点列に着目することで Wilkinson の証明を自然に焼き直すことができ，数学的にも興味深い証明となっている．収束の速度に関しては，３次収束性が観察されることを確認した．下図は横軸が反復回数，縦軸が残差に相当する副対角成分の振る舞いを示しており，l は1反復におけるシフト数を意味する．すべての実験結果において反復を進めることで収束し，３次収束であることが確認できる．



この Wilkinson 型マルチシフト QR 法に対しても，dqds 法と同様に安定なアグレッシブデフレーションを導入した．そのアルゴリズムは模式的に下図のように表される．

$$
\begin{pmatrix} * & * & & & \\ * & * & * & & \\ & * & * & * & \\ & & * & * & * \\ & & & * & * \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} * & * & & & \\ * & * & * & & \\ & * & * & * & + \\ & & * & * & + \\ & & + & + & * \end{pmatrix}
$$

$$
\to \begin{pmatrix} * & * & & & \\ * & * & * & & + \\ & * & * & * & + \\ & & * & * & \\ & + & + & & * \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} * & * & & & + \\ * & * & * & & + \\ & * & * & * & \\ & & * & * & \\ + & + & & & * \end{pmatrix}
$$

上の図において，*が非零成分を示し，矢印がある直交行列による相似変換を示す．+はこの反復において新たに生じた非零成分である．こうして QR 法においても通常とはかなり異なるアグレッシブデフレーションを導入することができた．実験結果については以下のようになった．まず準備したテスト行列は，(i) 対角が 1，副対角が 0.5 の 5000×5000 の行列，(ii) 5000×5000 の Clement 行列，(iii) 5001×5001 の Wilkinson 行列である．下の表において QR が通常の QR 法，QR+ad1 が通常のアグレッシブデフレーションを導入したもの，QR+ad2 が上記のアルゴリズムであり，各手法の計算時間を記している．提案手法は必ずしも最速ではないが，安定した動作を示していることが確認される．

	(i)	(ii)	(iii)
QR	5.7	6.4	3.5
QR+ad1	4.8 (0.71)	4.7 (0.78)	0.60 (0.47)
QR+ad2	4.5 (0.33)	6.8 (0.33)	2.7 (0.20)

5．主な発表論文等

（研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線）

〔雑誌論文〕（計 3 件）すべて査読有り

① Y. Nakatsukasa, K. Aishima, I. Yamazaki: dqds with Aggressive Early Deflation, SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications, vol. 33 (2012), pp. 22--51. http://dx.doi.org/10.1137/110821330

② K. Aishima, T. Matsuo, K. Murota, M. Sugihara: A Wilkinson-like Multishift QR Algorithm for Symmetric Eigenvalue Problems and Its Global Convergence, Journal of Computational and Applied Mathematics, vol. 236 (2012), 3556--3560. http://dx.doi.org/10.1016/j.cam.2011.04.012

③ K. Aishima, T. Matsuo, K. Murota: A Note on the dqds Algorithm with Rutishauser's Shift for Singular Values, Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics, vol. 28 (2011), pp. 251--262. 10.1007/s13160-011-0037-x

〔学会発表〕（計 8 件）

① K. Aishima, Yuji Nakatsukasa, Ichitaro Yamazaki: dqds with aggressive early deflation for computing singular values, SIAM Conference on Applied Linear Algebra, Valencia, Spain, June 18-22, 2012.

② K. Aishima, Yuji Nakatsukasa, Ichitaro Yamazaki: Stability theorem of the dqds with aggressive deflation for singular values, 9th International Workshop on Accurate Solution of Eigenvalue Problems, California, America, June 4-7, 2012.

③ K. Aishima, Yuji Nakatsukasa, Ichitaro Yamazaki: dqds with aggressive deflation for singular values, 12th Advanced Supercomputing Environment (ASE) Seminar, Tokyo, the University of Tokyo, April 25, 2012.

④ 相島 健助，松尾 宇泰，杉原 正顯：コレスキーLR 法の収束性解析，日本応用数理学会 2012 年度年会，稚内 ホテル日航 2012-8-28〜2012-9-2.

⑤ 相島 健助，松尾 宇泰，杉原 正顯： 対称固有値問題に対するレイリー商反復法に対する一注意， 日本応用数理学会 2012 年 研究部会 連合発表会，九州大学 2012-3-8 〜 2012-3-9.

⑥ 相島 健助： 行列の特異値を計算する dqds 法について，第 12 回岐阜数理科学セミナー，岐阜大学 2012-1-12.

⑦ 相島 健助，中務 佑治，山崎 市太郎： 行列の特異値を求めるアグレッシブデフレーション付き dqds 法， 応用数学合同研究集会，龍谷大学 2011-12-15 〜 2011-12-17.

⑧ 相島 健助，松尾 宇泰，杉原 正顯：Wilkinson シフト付き QR 法に対する全成分の収束の理論保証， 日本応用数理学会「行列・固有値の解法とその応用」研究部会 第１２回研究会， 国立情報学研究所 2011-11-21.

〔図書〕（計 0 件）

〔産業財産権〕

○出願状況（計 0 件）

○取得状況（計 0 件）

〔その他〕

ホームページ等

http://www.sr3.t.u-tokyo.ac.jp/~aishima/

６．研究組織
(1)研究代表者　相島　健助
（AISHIMA KENSUKE）
東京大学・大学院情報理工学系研究科・助教
研究者番号：40609658