

平成21年 4月27日現在

研究種目：若手研究 (B)
 研究期間：2006～2008
 課題番号：18700025
 研究課題名 (和文) 特定問題への新しい特異値分解アルゴリズムの適用に関する研究
 研究課題名 (英文) Research for application for specific field in new singular value decomposition
 研究代表者
 高田 雅美 (TAKATA MASAMI)
 奈良女子大学・大学院人間文化研究科・助教
 研究者番号：20397574

研究成果の概要：

非常に小さい特異値を持つ行列の特異値分解が可能となるように改良を行った。また、様々な特異値分解アルゴリズムの性能を調べるためのテスト行列の作成法について、まとめた。

交付額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2006 年度	1,500,000	0	1,500,000
2007 年度	1,400,000	0	1,400,000
2008 年度	600,000	180,000	780,000
年度			
年度			
総計	3,500,000	180,000	3,680,000

研究分野： ソフトウェア

科研費の分科・細目： 情報学・ソフトウェア

キーワード： 特異値分解, 可積分, アルゴリズム, 改良

1. 研究開始当初の背景

特異値分解は、通信システムや検索システムなどの多くの分野で利用されている。この特異値分解のための既存の方法として、QRs法や dqds 法がある。これらの方法は、計算精度や計算時間、数学的証明に問題があることが知られている。そこで、我々の研究グループでは、新たな特異値分解法として、I-SVD法を提案している。

この方法は特異値の計算法の収束に関する証明がなされている。特異値および特異ベクトルの真値に対する誤差は、既存の方法より小さい。また、実行時間に関して、dqds法には若干劣るが、一般的に使われている QRs法と比べると速い。また、必要な特異ベク

トルだけを計算させることが可能である。そのため、I-SVD法の応用分野への適用が望まれている。

2. 研究の目的

応用分野に適合させるための改良を施すために、特異値分解法 I-SVD の特性を調べ、改良を行うことが、本研究の目的である。以下、目的のための手段について説明する。

(1) 特異値分解法 I-SVD の性能評価

数学的証明は、既に成されている。しかし、計算機上での様々な行列に対する実性能に関しては、特異値計算部に対する評価は成されているが、特異ベクトル計算部に対する評価はまだである。そこで、本研究では、ラン

ダム行列に対する性能評価を行う。

(2) 特異値分解法 I-SVD の並列化

応用分野の多くは、大規模な配列の特異値分解を必要とする。そのため、分散メモリ環境の下での並列化が必要である。

(3) 小さい特異値を計算するための改良

応用分野によっては、現在開発されているプログラムソースでは、特異値分解が困難な場合がある。特に、非常に小さい特異値に対する改良を試みる。

(4) 左特異ベクトル U の計算法の改良

I-SVD では、特異ベクトル V の計算にはツイスト分解を適用しているものの、もう 1 つの特異ベクトル U の計算は一般的な行列計算で行っていた。しかし、実験の結果、特異値の分布によっては、特異ベクトル U の直交性が非常に悪化することがあった。そこで、特異ベクトル U の計算に対して、ツイスト分解を適用する。

(5) C 言語への移植

ライブラリとして使用することを目的に開発された I-SVD は、FORTRAN77 で記述されている。しかし、近年、C 言語のコンパイラの最適化が FORTRAN77 のそれよりも良好である。そこで、C 言語への移植を試みる。

3. 研究の方法

(1) 性能評価

上 2 重対角行列を対象とする実験を行う。実験において、4 種類の CPU を用いる。これらでえられた性能から、I-SVD の特徴を見出す。

また、性能評価をするためのテスト行列の作成方法についても調べる。

(2) 並列化

特異値計算部はデータ依存関係が強く、並列化に適していない。そこで、分割統治法を改良し、I-SVD の並列化を試みる。

(3) 小さい特異値を計算するための改良

特異ベクトル計算において、各特異ベクトルは独立に計算される。そのため、既存の方法と比較して、直交性が悪い。この問題を解決する方法を模索する。

(4) 左特異ベクトル U の計算法の改良

ツイスト分解は、特異ベクトル V を計算するために開発されている。そこで、新たに、特異ベクトル U のためのツイスト分解の式を導き出し、プログラム開発を行う。

(5) C 言語への移植

FORTRAN77 で開発されたライブラリの構造解析を行い、C 言語への移植を試みる。

4. 研究成果

(1) 性能評価

テスト行列の作成方法として、大きく分けて 4 種類存在することがわかった。それぞれ

の方法において、得意とする特異値の分布範囲、分布状況、行列サイズを網羅的に調べた。また、この 4 種類以外の方法についても調査を行った結果、既存のライブラリが苦手とするテスト行列を見出すことに成功した。

行列サイズ	QRs	I-SVD
1,000	44.92	1.13
2,000	432.12	4.91
3,000	2253.74	11.27
4,000	10970.31	19.65
5,000	24249.09	30.63
6,000	42573.60	43.73

(表：実行時間の比較 [秒])

計算時間が、従来の方法では、 $O(m^3)$ 必要であるのに対して、I-SVD では $O(m^2)$ であることが確認された。

	QR s	I-SVD
特異値の誤差	$0.89 \cdot 10^{-12}$	$0.32 \cdot 10^{-12}$
右特異ベクトル V の誤差	$10.2 \cdot 10^{-8}$	$0.41 \cdot 10^{-8}$
左特異ベクトル U の誤差	$10.2 \cdot 10^{-8}$	$0.41 \cdot 10^{-8}$
V の直交性	$0.0083 \cdot 10^{-8}$	$0.032 \cdot 10^{-8}$
U の直交性	$0.0069 \cdot 10^{-8}$	$0.398 \cdot 10^{-8}$

(表：1,000 次行列に対する精度)

特異値分解された行列の直交性と真値に対する誤差を調べたところ、直交性では若干劣るものの、誤差が小さいことがわかった。

この過程において、QR 法は、直交性を重視するあまりに、与えられた行列によっては、真値に対する誤差が非常に悪く、本来得られるべき特異値分解とは違う結果が得られる場合があることもわかった。

(2) 並列化

CPU 数	QR の並列化	分割統治法
1	867.98	5.78
2	433.61	2.93
4	173.44	1.50
8	66.78	0.79
16	34.71	0.48

(表：3,000 次行列に対する実行時間[秒])

分割統治法で利用されている特異値計算に関する部分のみを取り出し、その後、I-SVD の特異ベクトル計算部を行うように改良した。この際、分割統治法による特異値計算部にも工夫をいれた。これにより、16 台の CPU を用いて並列化を行った結果、ほぼリニアな結果を得られた。また、その際の精度も、逐次の場合と比べ、大きく劣化することはなかった。

(3) 小さい特異値を計算するための改良

特異ベクトルの計算性能を高めるために、シフトとスケールを導入した。

	既存の I-SVD	スケールの導入
右特異ベクトル V の誤差	計算不可能	0.69×10^{-10}
左特異ベクトル U の誤差	計算不可能	0.69×10^{-10}
V の直交性	計算不可能	7.31×10^{-10}
U の直交性	計算不可能	7.30×10^{-10}

(表: 10^{-20} から 2×10^{-20} までの特異値を持つ行列の特異値分解)

スケールによって, 従来の I-SVD では, 計算不可能だった小さい特異値を持つ行列の特異値分解が可能となった.

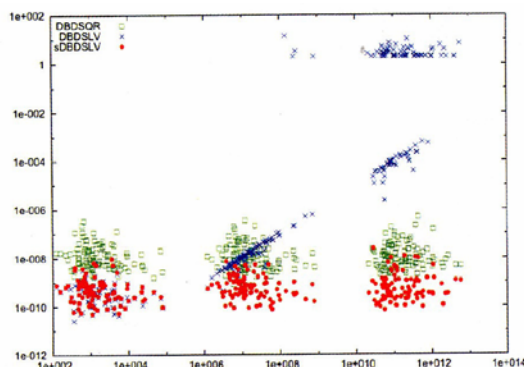
	既存の I-SVD	シフトとスケールの導入
右特異ベクトル V の誤差	5.06×10^{-5}	0.71×10^{-5}
左特異ベクトル U の誤差	5.06×10^{-5}	0.71×10^{-5}
V の直交性	6.41×10^{-6}	0.68×10^{-6}
U の直交性	6.41×10^{-6}	0.68×10^{-6}

(表: 1 から 1.0001 の特異値を持つ行列の特異値分解)

シフトによって, 最小特異値が 0 に近づくように移動させる. スケールによって, 密集した特異値を可能な限り分散させる. これらによって, 従来の I-SVD 法よりも 1桁精度を向上することに成功した.

(4) 左特異ベクトル U の計算法の改良

ツイスト分解を用いて左特異ベクトル U を計算することによって, 従来の I-SVD では分解できなかった行列の特異値分解に成功した.



(図: 左特異ベクトルの精度 < 緑: QR s, 青: 従来の I-SVD, 赤: 改良版 >)

ランダムな上 2 重対角行列に対する性能評価において, 良好な結果を得た.

(5) C 言語への移植

ライブラリの構造解析を行い, 移植をする過程において, 判別式による分岐のうち, いくつかが必要であることが判明した.

5. 主な発表論文等

[雑誌論文] (計 63 件)

- ① 坪井洋明 (他 5 名), 固有値分解を目的としたツイスト分解法による分割統治法の改善, 日本応用数学会論文誌, Vol.18, No.4, 611-630, 2008, 査読有
- ② 片山幹基 (他 5 名), 特異値分解法 I-SVD における左特異ベクトル計算部の改善, 日本応用数学会論文誌, Vol.18, No.3, 389-407, 2008, 査読有
- ③ 当麻英梨子 (他 2 名), 情報爆発時代に向けた大気科学分野のための 3次元可視化モデルの提案, 情報処理学会論文誌数理モデルと応用, Vol.48, No.SIG19(TOM19), 96-98, 2007, 査読有
- ④ 柏木裕恵 (他 3 名), アブストラクトを用いた原子分子物理学分野の論文分類支援システムの設計と実装, 情報処理学会論文誌数理モデルと応用, Vol.48, No.SIG15(TOM18), 189-198, 2007, 査読有
- ⑤ Masami Takata (他 2 名), Navie Mean Field Approximation for Sourlas Error Correcting Code, IEICE Transaction on Information and Systems, Vol.E89-D, No.8, 2439-2447, 2006, 査読有
- ⑥ 高田雅美 (他 3 名), 高精度特異値分解のためのライブラリ開発, 情報処理学会論文誌コンピューティングシステム, Vol.47, No.SIG7(ACS14), 91-104, 2006, 査読有
- ⑦ 誉田太朗 (他 3 名), 分割統治法とツイスト分解による新しい特異値分解アルゴリズム, 情報処理学会論文誌コンピューティングシステム, Vol.47, No.SIG7(ACS14), 81-90, 2006, 査読有

[学会発表] (計 68 件)

- ① Yuki Kohori (他 3 名), Real-time 3D Mpvie Generation by Anaglyph for Live Streaming, International Conference on Parallel and Distributed Processing Techniques and Applications (PDPTA' 08), 2008 年 7 月 14 日, ラスベガス (アメリカ)
- ② Mayumi Kamada (他 4 名), Construction of an Ethanol-Tolerant Yeast Model using the E-cell System, International Conference on Parallel and Distributed Processing Techniques and Applications (PDPTA' 08), 2008 年 7 月 14 日, ラスベガス (アメリカ)

- ③ Eriko Toma (他 7 名), An Interactive 3D Visualization Model by Live Streaming for Remote Scientific Visualization, the Third International Conference on Computer Graphics Theory and Applications, 2008 年 1 月 22 日, マンデラ島 (ポルトガル)
- ④ Yusaku Yamamoto (他 6 名), Accelerating the Singular Value Decomposition of Rectangular Matrices with the CSX600 and the Integrable SVD, Parallel Computing Technologies 2007, 2007 年 9 月 14 日, Brasov (ルーマニア)
- ⑤ Masami Takata (他 3 名), Algorithms for Generating Bidiagonal Test Matrices, International Conference on Parallel and Distributed Processing Techniques and Applications (PDPTA' 07), 2007 年 6 月 25 日, ラスベガス (アメリカ)
- ⑥ Sachi Kimura (他 4 名), Development of Molecular Dynamics Simulation based Flexible Docking System, International Conference on Parallel and Distributed Processing Techniques and Applications (PDPTA' 07), 2007 年 6 月 25 日, ラスベガス (アメリカ)
- ⑦ Naomi Ashida (他 5 名), Construction of Paper Classification System Using SVD, International Conference on Parallel and Distributed Processing Techniques and Applications (PDPTA' 07), 2007 年 6 月 25 日, ラスベガス (アメリカ)
- ⑧ Eriko Touma (他 5 名), 3D Visualization System Gateau for Atmospheric Science: Design Concept and Practical Evaluation, International Conference on Parallel and Distributed Processing Techniques and Applications (PDPTA' 07), 2007 年 6 月 25 日, ラスベガス (アメリカ)
- ⑨ Manami Sasaki (他 3 名), Optimization of Molecular Dynamic Simulation on Cell Processor, International Conference on Parallel and Distributed Processing Techniques and Applications (PDPTA' 07), 2007 年 6 月 25 日, ラスベガス (アメリカ)
- ⑩ Masami Nakazawa (他 5 名), Development of an SVM based Prediction System for Metalbinding Sites in Protein, International Conference on Parallel and Distributed Processing Techniques and Applications (PDPTA' 07), 2007 年 6 月 25 日, ラスベガス (アメリカ)
- ⑪ Miho Komatsubara (他 5 名), Auto Classification of Feces for Health Condition Analysis, International Conference on Parallel and Distributed Processing Techniques and Applications (PDPTA' 07), 2007 年 6 月 25 日, ラスベガス (アメリカ)
- ⑫ Masami Takata (他 3 名), Verification of dLVv Transformation for singular Vector Computation with High Accuracy, the IADIS International Conference on Applied Computing 2007, 2007 年 2 月 18 日, サラマンカ (スペイン)
- ⑬ Taro Konda (他 4 名), PARALLELISM OF DOUBLE DIVIDE AND CONQUER ALGORITHM FOR SINGULAR VALUE DECOMPOSITION, the 25th IASTED International Multi-Conference, Parallel and Distributed Computing and Networks (PDCN' 07), 2007 年 2 月 13 日, インズブルック (オーストリア)
- ⑭ Yi Yu (他 2 名), Similarity Searching Techniques in Content-based Audio Retrieval via Hashing, 13th International Multimedia Modeling Conference (MMM 2007), 2007 年 1 月 9 日, シンガポール (シンガポール)
- ⑮ Yi Yu (他 2 名), Index-based Similarity Searching with Partial Sequence Comparison for Query-by-Content Audio Retrieval, the First International Workshop on Learning the Semantics of Audio Signals (LSAS 2006), 2006 年 12 月 6 日, アテネ (ギリシャ)
- ⑯ Machiko Nakagawa (他 2 名), Automatic Viewpoint Selection for a Visualization I/F in a PSE, 2nd IEEE International Conference on e-Science and Grid Computing, 2006 年 12 月 4 日, アムステルダム (オランダ)
- ⑰ Masami Takata (他 3 名), Verification of dLVv Transformation for Singular Vector Computation with High Accuracy, International Conference on Parallel and Distributed Processing Techniques and Applications (PDPTA' 06), 2006 年 6 月 26 日, ラスベガス (アメリカ)
- ⑱ Taro Konda (他 4 名), Preliminary Result of Parallel Double Divide and Conquer, International Conference on Parallel and Distributed Processing Techniques and Applications (PDPTA' 06), 2006 年 6 月 26 日, ラスベガス (アメリカ)
- ⑲ Hiroaki Tsuboi (他 5 名), Evaluation of a New Eigen Decomposition Algorithm for Symmetric Tridiagonal Matrices,

International Conference on Parallel
and Distributed Processing Techniques
and Applications (PDPTA'06), 2006 年
6 月 26 日, ラスベガス (アメリカ)

〔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〕

なし

6. 研究組織

(1) 研究代表者

高田 雅美

奈良女子大学・大学院人間文化研究科・助教

研究者番号：20397574

(2) 研究分担者

なし

(3) 連携研究者

なし