様　式　Ｃ－１９、Ｆ－１９－１、Ｚ－１９　（共通）

# 科学研究費助成事業　　研究成果報告書

平成 ３０ 年　 ６ 月 １５ 日現在

機関番号：１２６０１
研究種目：若手研究(B)
研究期間：2013～2017
課題番号：２５７９００９６

研究課題名（和文）特異値分解の高速数値計算アルゴリズムの開発

研究課題名（英文）Fast numerical algorithms for singular value decompositions

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・特任講師

研究者番号：４０６０９６５８

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費）　　2,800,000円

研究成果の概要（和文）：現在の情報化社会において，データサイエンスおよび人工知能の基盤と言える行列の特異値分解は非常に重要視されている．本研究では，特異値計算アルゴリズムに対する収束理論を与え，これに基づきより高性能な特異値分解アルゴリズムへの改良を行った．さらに，特異値分解と関連の強い固有値分解や，情報技術における現代的な行列計算アルゴリズムに対しても同様の理論解析およびそれに基づくアルゴリズム開発を行った．

研究成果の概要（英文）：In the modern information society, it is very important to develop fast algorithms for computing singular value decompositions of matrices because such numerical algorithms are fundamental in data science, artificial intelligence and so forth. In this study, we have provided convergence theory for singular value algorithms, which can be successfully applied to improvement of existing efficient algorithms. In addition, we have established similar important convergence theorems for eigenvalue algorithms. Moreover, using similar mathematical analysis, we have newly constructed convergence theorems for numerical algorithms for modern matrix computations successfully applied to information sciences. On the basis of the above convergence theorems, we have developed high performance algorithms for directly solving important problems in information sciences.

研究分野：数値解析，高性能計算，データサイエンス

キーワード：数値線形代数

**１．研究開始当初の背景**

現在，理工学の様々な分野において行列に関する数値計算は広く応用されている．その中で，データマイニング等，現代の情報処理分野において，特異値分解の数値計算アルゴリズムの重要性は言を俟たないであろう．特異値分解は，特異値と特異ベクトルを求めることで得られる．現在，特異値の標準的数値計算アルゴリズムが dqds 法であり，線形計算の世界標準ライブラリ LAPACK にも実装され幅広く利用されている．私は本研究の開始時点において，この dqds 法の理論的基礎付けを与えるとともにその改良を行い，高速な実装を与えていた．さらに固有値計算のために LAPACK に実装されている QR 法についても同様の研究を行ってきた．この一連の研究に基づき，特異ベクトルの高速な計算，そしてより大規模な行列に対する特異値分解および関連する行列計算のアルゴリズムの設計が期待されていた．

**２．研究の目的**

本研究は，上記の LAPACK に実装のある dqds 法や QR 法のような中規模密行列向けのアルゴリズムの高速化を図るとともに，これまでに得られた高速化に関する知見を大規模疎行列向けの射影法や固有ベクトル，特異ベクトルの数値計算にも応用することで，高速かつ高精度な行列分解アルゴリズムを目指すものである．

具体的には，まず高性能な特異値分解アルゴリズムを設計するために，特異値計算では i)dqds 法のシフト戦略の改良による高速化，特異ベクトル計算では ii)アグレッシブデフレーションの導入による高速化を達成し，パラメータのチューニングにより全体の高性能化を施し，この方向性から iii)大規模問題に対する射影型のアルゴリズムに対して理論解析と高速化を施す．

**３．研究の方法**

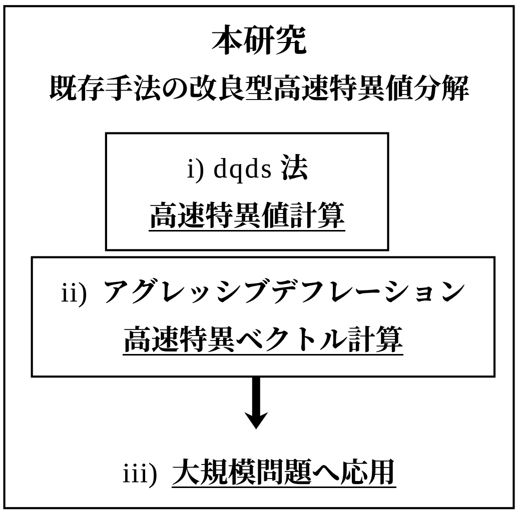


図１．本研究全体像

まず本研究の方法の概略は図１のようにまとめられる．以下に詳細を記す．

**i) dqds 法のシフト戦略の改良による特異値計算の高速化**

**i)-1　新たなシフトの提案**

私は，これまでの研究で現存の線形計算ライブラリ LAPACK において実装されている dqds 法が超 2 次収束であることを証明していた．また同じアプローチで名古屋大学や京都大学の研究グループと共に 2 次以上の収束速度を達成するシフトを新たに提案していた．本研究でも継続してより優れたシフトを考えていく．

**i)-2　最近提案されたシフトの LAPACK への組み込み**

LAPACK におけるシフト戦略に，私の提案する超 2 次収束シフトなどを組み込み高速化する．LAPACK におけるシフトは経験則に基づいた複雑な計算を要するものであるのに対し，私の提案シフトはアルゴリズムから自然に超 2 次収束が証明される簡明なシフトなので，これにより効果的な収束加速を達成できると考えられる．

**ii) アグレッシブデフレーションによる特異ベクトル計算の高速化**

2002 年に QR 法において効果的な実装が施されたアグレッシブデフレーションを，特異ベクトルが計算可能な形で dqds 法に導入して高速化する．私はこれまで QR 法に対しても理論解析を行い，さらに特異値計算においては既にアグレッシブデフレーション付き dqds 法の設計に成功しているため，これに基づき dqds 法の有する高速性，安定性を保持する形で特異ベクトルの数値計算アルゴリズムを開発する．

本アルゴリズムを実装する際，シフト戦略とアグレッシブデフレーションの導入，そしてもとの MRRR 法の特異ベクトル計算等に関して，種々のパラメータを適切に設定する必要があるが，実験データを大量に集めて解析し，最適なパラメータ設定を施す．

**iii) 大規模行列用のアルゴリズムを開発**

上記の研究を基に並列計算可能な特異値分解アルゴリズムを提案する．現在，問題の大規模化とそれを解く計算機の開発の流れから，並列アルゴリズムは非常に重要視されているものの，現状の特異値計算の反復アルゴリズムはシフトで高速化するとそれに伴い並列化には不向きになるというジレンマがある．これに対して本研究では，アグレッシブデフレーションを導入することで高速化

し，シフトの導入を必要最小限にとどめることで，高速かつ並列計算可能なアルゴリズムを設計する．さらに，この知見を射影型のアルゴリズムにも応用し高性能化を図る．

## ４．研究成果

本研究により dqds 法に対し，超 2 次収束シフト戦略を実用的な形で LAPACK に導入する理論基盤が与えられた．この成果は海外の計算数学の査読付きジャーナルに採択されている．また，QR 法に対しても，Wilkinson シフトという標準シフト戦略に対して，収束速度解析を行い，収束パターンを完全な形で列挙することに成功している．また古典的ではあるが並列性のよさから近年注目されているヤコビ法に対しても，数学者と共同で新しい収束証明を与え，並列向きの現代型のヤコビ法に対しても一定の知見を与えることに成功している．

さらに，アグレッシブデフレーションに関しては，dqds 法や QR 法の対象とする行列よりも大規模な問題に対する射影型の有力な反復アルゴリズムである Lanczos 法および Jacobi-Davidson 法におけるリスタートという技術との数理的な関係に焦点を当てることで，より重要な成果を挙げることに成功した．以下に詳細を記す．

まず，レイリー商反復という重要な固有値問題に対する反復解法に対し，従来，収束が保証できない場合があることが知られていたが，本研究ではアグレッシブデフレーションと射影との関係に着目することでこれを解決し，収束の保証されるアルゴリズムを提案した．本成果は査読付きジャーナルに採択されている．

さらに，より重要な射影型の有力アルゴリズムである Lanczos 法や Jacobi-Davidson 法に対しても重要な理論的基礎付けを与えた．両アルゴリズムは現存の最有力視される大規模固有値計算アルゴリズムであるが，近年の問題の大規模化に伴い，省メモリ化のためにリスタートと呼ばれる技術の導入が必須であるが，これにより実験的に高速化されるものの，収束自体の理論保証が難しくなり，実際，本研究への着手時点ではその証明は存在しなかった．

上記の背景の下，本研究では，アグレッシブデフレーションとリスタートの数理的関係に着目することで，上記の Lanczos 法や Jacobi-Davidson 法に限らず，部分空間への一般的な射影の技術に対する統一的な収束理論を構築し，リスタート付きの反復型射影法に対する統一的な収束証明を与えた．本研究は数値解析のトップジャーナル Numer. Math. に投稿し採択された．さらに，国際会議 Householder Symposium 2014 に採択され発表を行った．Householder Symposium とは，三年に一度，数値線形代数における著名な研究者が一堂に集う重要な国際会議であるが，招待制でありアジア圏からの参加は難しい中で，本発表が受理されたことは成果の重要性を表していると言える．さらにこの研究の後続として，一般化固有値問題まで込みにした反復型射影法についても統一的な収束証明を与え，本成果は海外の計算数学の査読付きジャーナルに採択されている．

上記の流れをくみ，本研究では，行列計算に限らずより応用的な研究にも手を広げ，実際，いくつか重要な成果を挙げた．以下に詳細を記す．

まずこのような研究の背景として，近年，行列計算の研究として，線形方程式や固有値問題の数値解法および特異値分解の数値計算のみならず，計算物理や情報技術における数理的な問題を上記のような古典的な行列計算のレベルまで変換せず直接的に解く技術，そしてそのために古典的な数値計算の技術を効率的に導入することは非常に重要視されてきている．これまでに述べた dqds 法，QR 法，Lanczos 法の数理基盤である行列分解や射影の技術を抽象化し，実用的な問題を直接的に解く試みである．具体的には，行列が時間発展するタイプの問題や逆問題あるいはランダム性のある問題を解くこと，さらには，情報技術における検索エンジンや情報推薦システムの設計のために，上記の行列分解や射影を効率的に用いるアルゴリズムの設計が重要視されている．本研究はこの流れに沿う成果を挙げることにも成功した．

例えば，情報推薦システムに対し，部分空間へのランダム射影に基づく高速かつロバストな数値計算アルゴリズムを新たに開発し日本応用数理学会 2015 年度年会にて発表した．さらに，上記のレコメンダシステム等を応用とする逆固有値問題に対しても新たな高速かつ柔軟なアルゴリズムを開発し，本成果は Householder Symposium 2017 に採択され発表を行った．

## 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　7　件）すべて査読有り


① K. Aishima: On convergence of iterative projection methods for symmetric eigenvalue problems, Journal of Computational and Applied Mathematics, vol. 311 (2017), pp. 513--521. https://doi.org/10.1016/j.cam.2016.08.035

② K. Aishima: A note on the convergence

theorem of the tridiagonal QR algorithm with Wilkinson's shift, Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics, vol. 32 (2015), pp. 465--487.
https://link.springer.com/article/10.1007/s13160-015-0171-y

③ S. Ito, K. Aishima, T. Nara, M. Sugihara: Orthogonal Polynomial Approach to Estimation of Poles of Rational Functions from Data on Open Curves, Journal of Computational and Applied Mathematics, vol. 273 (2015), pp. 326-345.
https://doi.org/10.1016/j.cam.2014.05.028

④ K. Aishima: Global Convergence of the Restarted Lanczos and Jacobi-Davidson Methods for Symmetric Eigenvalue Problems, Numerische Mathematik, vol. 131 (2015), pp. 405-423.
https://link.springer.com/article/10.1007%2Fs00211-015-0699-4

⑤ T. Tsuchiya, K. Aishima: A note on convergence and a posteriori error estimates of the classical Jacobi method, Nonlinear Theory and Its Applications, IEICE, vol. 6 (2015), pp. 391--396.
https://doi.org/10.1587/nolta.6.391

⑥ K. Aishima: A Note on the Rayleigh Quotient Iteration for Symmetric Eigenvalue Problems, Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics, vol. 31 (2014), pp. 575--581.
https://link.springer.com/article/10.1007/s13160-014-0148-2

⑦ K. Aishima, T. Matsuo, K. Murota, M. Sugihara: A shift strategy for superquadratic convergence in the dqds algorithm for singular values, Journal of Computational and Applied Mathematics, vol. 257 (2014), pp. 132--143.
https://doi.org/10.1016/j.cam.2013.08.021

〔学会発表〕（計　13　件）

① 相島 健助： 対称固有値問題に対する数値計算法とその応用について (On numerical algorithms for symmetric eigenvalue problems and their applications), 京都大学数理解析研究所 研究集会「数値解析学の最前線 ---理論・方法・応用---」2017年11月8日, 京都大学（京都）

② 相島健助：重複固有値を指定する逆固有値問題に対する二次収束解法について, 日本応用数理学会 2017 年度年会, 2017年9月7日, 武蔵野大学（東京）

③ K. Aishima: A Quadratically Convergent Algorithm Based on Matrix Equations for Inverse Eigenvalue Problems, The Householder Symposium XX, June 19, 2017, Atlanta (USA), 2017.

④ 相島健助：逆一般化固有値問題に対する擬似ニュートン法, 日本応用数理学会 2016年度年会, 2016年9月13日, 北九州国際会議場（福岡県）

⑤ K. Aishima: A quadratically convergent method for inverse eigenvalue problems, Sapporo Summer HPC Seminar, Autumn 22, 2016, 北海道大学（北海道）.

⑥ K. Aishima: A quasi-Newton method for inverse eigenvalue problems, 20th Conference of the International Linear Algebra Society, July 12, 2016, Leuven (Belgium).

⑦ K. Aishima, T. Ogita: Iterative Refinement for Symmetric Eigenvalue Decomposition and Singular Value Decomposition, SIAM Conference on Applied Linear Algebra, October 23, 2015, Atlanta (USA).

⑧ 相島健助, 佐藤 一誠：特異値分解に基づく行列補完の乱択による補完精度の向上について, 日本応用数理学会 2015 年度年会, 2015年9月10日, 金沢大学（石川）

⑨ K. Aishima: Convergence Proof for Some Iterative Projection Methods from a Perturbation Bound for Symmetric Eigenvalue Problems, 8th International Congress on Industrial and Applied Mathematics, August 11, 2015, Beijing (China).

⑩ 相島健助：対称固有値問題に対する Rayleigh-Ritz の技法において収束を保証するリスタート戦略について, 日本応用数理学会 2014 年度年会, 2014年9月4日, 政策研究大学院大学（東京）

⑪ K. Aishima: Global Convergence of the Restarted Lanczos Method and Jacobi-Davidson Method for Symmetric Eigenvalue Problems, The Householder Symposium XIX, June 9, 2014, Spa (Belgium).

⑫ 相島健助：リスタートを導入した Lanczos 法の大域的収束性, 応用数学合同研究集会, 2013年12月18日, 龍谷大学（滋賀）

⑬ 相島健助：リスタート付き Jacobi-Davidson 法の大域的収束性について, 日本応用数理学会 2013 年度年会, 2013年9月10日, アクロス福岡（福岡）

〔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
https://aishima.cis.k.hosei.ac.jp/research.html

## 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・特任講師
研究者番号：40609658