平成１４年度採択　さきがけ研究

「特異値分解法の革新による実用化基盤の構築」

京都大学，大学院情報学研究科，中村佳正

１．研究概要

□ねらい：　中村等が開発した高速高精度の新しい特異値計算法dLVと特異値分解法I-SVDによる実用化基盤の構築を目指して，dLVとI-SVDの基礎研究，改良，実装，ライブラリ開発等を行う．

□構想：　３年間の研究期間中に，原点シフトの導入による特異値計算の高速化と高精度化，原点シフト付き特異値計算法の収束性の証明，収束次数の解明，誤差評価，前進後退の安定性の証明，直交性に優れた特異ベクトルの高速計算法の研究を行うとともに，I-SVDアルゴリズムの実装と並列化を進め，高速高精度の逐次特異値計算ライブラリ，逐次特異値分解ライブラリを開発する．さらに，データ検索，画像処理など実用化に向けての研究を開始する．

□今後の見通し：　これまでに多くの進展を経て，逐次特異値計算ライブラリ，逐次特異値分解ライブラリのプロトタイプが完成した．今後は，並列特異値分解アルゴリズムの特許化とライブラリ化を進める．さらに，これらのライブラリのパラメータチューニングを継続し，インターフェイスの改善による幅広いユーザへの提供に備えるとともに，基礎研究としては上２重対角行列への前処理部分の改善，実用化研究としては複数の企業へのライセンス契約の基づく共同開発を推進する．

２．研究実施内容

(i) mdLVs アルゴリズムによる特異値計算ライブラリ DLVS の開発

本研究は，離散可積分系ロトカ・ボルテラ(dLV)方程式という従来にない方法による行列の特異値計算の実用化を目指して開始されたものであるが，従来法に太刀打ちし，さらには陵駕するような高速高精度かつ数値安定なアルゴリズムに発展させるには幾多の問題を解決しなければならなかった．特異ベクトル計算においても新しいアイデアを必要とした．

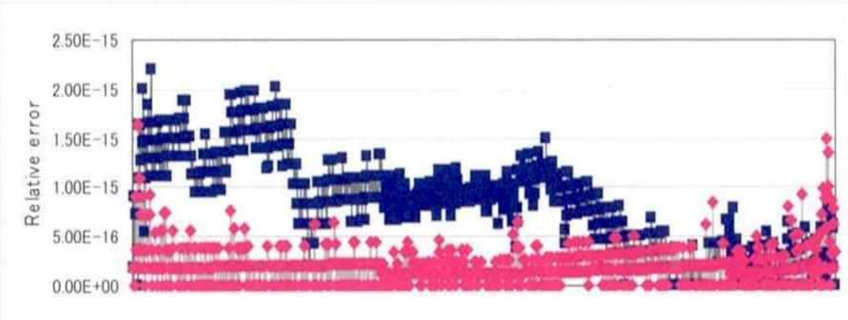
A) 3年間のさきがけ研究における成果の第一は，数値安定性と収束性が保証された新構想の特異値計算法であるmdLVsアルゴリズムを開発したことである．さらに，mdLVsアルゴリズムを実装したライブラリDLVSを構築し，様々なチューニングを行った．原点シフトの大きさをジョンソン境界で推定される最小特異値の平方より小さくとれば，mdLVsアルゴリズムは，丸め誤差があっても，非常に高い相対精度をもって必ず特異値に収束することを数学的に証明し，論文「M. Iwasaki and Y. Nakamura, Accurate computation of singular values in terms of shifted integrable schemes」として発表している．別の論文ではmdLVsアルゴリズムが特異値に3次収束することを示しており，理論的にも数値実験でもmdLVsアルゴリズムの優位性はゆるぎないものとなっている．

B1) 1,000次上２重対角行列の各特異値の相対誤差の総和の（ランダムに生成した行列100個についての）平均値は次表の通り．ここにDBDSQRは信頼性の高いシフト付きQR(QRs)法を実装した

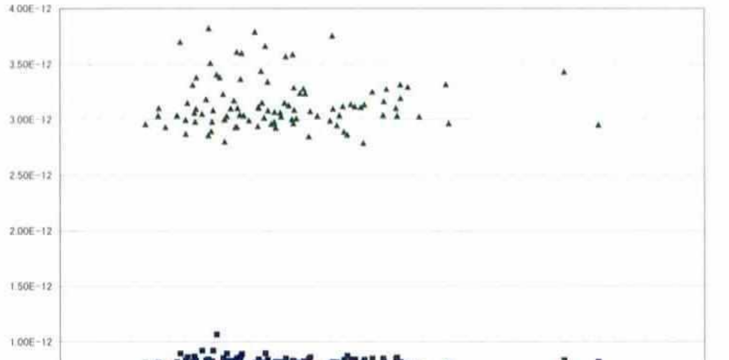
LAPACKルーチン，DLASQは収束証明はないものの現在，最速最高精度とされるLAPACKルーチンである．100例すべてでDLVSが最も高精度である．なお，このプロジェクトでは，数式処理を用いた整数計算によりランダムな特異値をもつ上２重対角行列をテスト行列として誤差なし生成しており実験の信頼性は高い．(Intel Pentium 4(2.8GHz), RAM:3GB, L1Dキャッシュ8KB, L2キャッシュ512KB)

DBDSQR(QRs法)	DLASQ(dqds法)	DLVS(mdLVs法)
9.48e-13	4.56e-13	1.85e-13

B2) 次の図は，ある1000次上２重対角行列について計算された特異値のもつ相対誤差のグラフ化である．ピンクがDLVS，青はDLASQ，左から大きい順に特異値を並べている．小さい特異値を除き，DLVSでは特異値1個あたりの相対誤差はほとんどがマシンイプシロン以下で，より高精度である．DBDSQRの相対誤差はこの図に入りきらないので略している．



B3) 1000次上２重対角行列をランダムに100個生成し，横軸にその条件数の対数を，縦軸に計算された1000個の特異値の相対誤差の総和を，DLVS（ピンク），DLASQ（青），DBDSQR（緑）で色分けしたものである．PGI Fortran compilerを用いオプションによってSSEを使用しない設定にしている．100個の全てにおいて相対誤差の総和は DLVS<DLASQ<<DBDSQR となり，DLVSの高精度性が裏付けられる．



C)計算時間(sec.)の比較は次の通りである．対象はランダムに生成した10,000次行列100個である．DBDSQRと比べると十分に速く，DLASQとほぼ同等の速度で特異値を計算することが可能である．

Pentium 4, GNU compiler 2.95.4			Itanium2, Intel Fortran compiler 8.0		
DBDSQR	DLASQ	DLVS	DBDSQR	DLASQ	DLVS
18.22s	4.73s	9.62s	188.57s	6.82s	6.32s

以上によって本プロジェクトで開発したDLVSルーチンは，最高精度，かつ，収束性が証明されたアルゴリズムを実装した特異値計算ルーチンとして最速であることが確認された．

(ii) I-SVD アルゴリズムによる特異値分解ライブラリ DBDSLV の開発

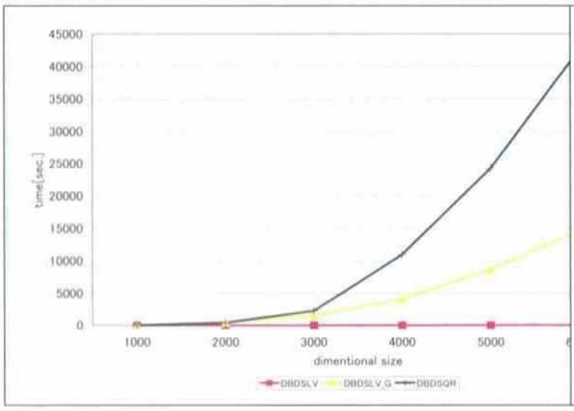
MATLAB, Mathematicaなど汎用ソフトウェアで使われる特異値分解ルーチンはQRs 法に基づくDBDSQRである．QRs法の計算量はO(m^3)であり大規模行列では収束が遅く，一部の特異値特異ベクトルのみを求めることも構造上，困難である．

本研究の第二の成果は，高精度ツイスト分解法を開発し，与えられた行列とその特異値を用いて,特異ベクトルをO(m^2)の計算量で高精度かつ十分な直交性をもって計算できるようになったことである．悪性の行列の２重コレスキー分解の計算に2種類のdLV型変換を組み合わせて使用し，その結果，高精度なツイスト分解が可能となる．高精度ツイスト分解の成功により，mdLVsアルゴリズムによる特異値計算を前段部とする新しい特異値分解法I-SVDアルゴリズムが定式化された．特異値計算部と特異ベクトル計算部の分離によりQRs型特異値分解法と比べてはるかに高速に特異値分解が完了する．高精度ツイスト分解によって単純な逆反復法や最近アメリカで開発されているMR^3法と比べてより高精度で数値安定な特異ベクトル計算が可能となる．しかも，特異ベクトル計算は完全に並列実行可能で，I-SVDの一層の高速化も容易である．本研究では，DLVSルーチンを特異値計算部とし，新しいツイスト分解と逆反復計算を特異ベクトル計算部で行うI-SVDアルゴリズムを実装したライブラリDBDSLVを開発した．

A) 1,000次元行列の特異値分解の結果が次表である．Uは左特異ベクトル行列，Vが右特異ベクトル行列，Σが特異行列，^Tは転置，数値は2ノルムである．DBDSQRの特異ベクトルの直交性は良好であるが真値に対する誤差が大きい．一方，DBDSLVでは特異ベクトルの直交性はやや劣るものの，真値に対する誤差は小さい．1ノルム，∞ノルムをみると両者にはほとんど精度の差はない．また，DBDSLVにおいて特異ベクトルの直交性を重視して修正グラムシュミット法による再直交化を行なうライブラリDBDSLV_Gを開発した．

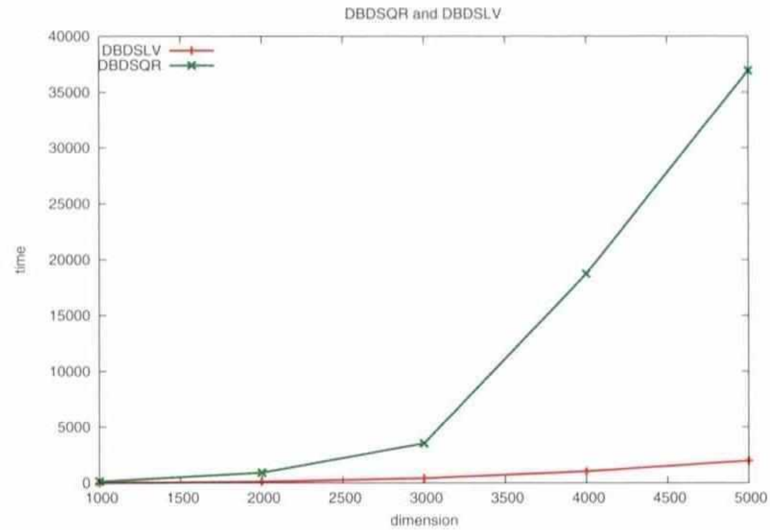
	DBDSQR	DBDSLV	DBDSLV_G
V-V'	$1.02*10^{-7}$	$4.23*10^{-9}$	$4.15*10^{-9}$
U-U'	$1.02*10^{-7}$	$4.14*10^{-9}$	$3.92*10^{-9}$
V^TV-I	$8.31*10^{-11}$	$3.24*10^{-10}$	$7.53*10^{-12}$
U^TU-I	$8.28*10^{-11}$	$3.15*10^{-10}$	$8.65*10^{-12}$
B-UΣV^T	$6.90*10^{-11}$	$3.98*10^{-9}$	$6.21*10^{-11}$

B1) ランダムに生成した1000次から6000次上2重対角行列100個について，DBDSQR（青），DBDSLV（ピンク），DBDSLV_G（黄）ルーチンによる特異値分解の平均計算時間(sec.)を比較したのが次の図表である．例えば，4000次では，DBDSQRが3時間もかかるのに対して，DBDSLVでは20秒である．DBDSLVの計算量がO(m^2)であることと良好なスケラビリティをもつことが確認される．



m	DBDSLV	DBDSLV_G	DBDSQR
1000	1.13	40.44	44.92
2000	4.91	445.62	432.12
3000	11.27	1503.01	2253.74
4000	19.65	4090.16	10970.31
5000	30.63	8613.28	24249.09
6000	43.73	14523.7	42573.6

B2) 与えられた密行列Aをハウスホルダー変換により上２重対角化（前処理）し，I-SVDアルゴリズムを実装したDBDSLVルーチンにより上２重対角行列Bの特異値と特異ベクトルをすべて計算し，さらに行列を１次変換して元の行列Aの左右の特異ベクトルを計算する（後処理）ことで特異値分解が完了する．次の図は前処理・後処理まで含めた特異値分解の全工程について，標準解法のDBDSQR（緑）とDBDSLV（赤）の実行時間の比較である．MR^3法には左特異ベクトルの機能がないため比較の対象としない．横軸は密行列の次数，縦軸は特異値分解完了までの総時間(sec.)である．DBDSLVルーチンの優位性が顕著に現れている．全部の特異ベクトルが必要ではないとき，両者の差はもっと大きくなる．



アルゴリズムI-SVDの高精度性の背景には可積分系と直交多項式理論，特に正値性を保つモーメントの変形理論があり，新しい理論的基盤をもつ基礎アルゴリズムが誕生したと考えられる．この正値性に支えられて，特異値計算とツイスト分解が高精度に実行可能となり，特異値計算と特異ベクトル計算を完全に分離した高速高精度かつ高信頼の特異値分解が実現された．40年余り続くQR法ベースの固有値計算，特異値分解の歴史の中で，可積分系に基礎を置く新しいアルゴリズム理論が誕生したのである．

今後はDBDSLVの実用化のための様々なチューニングやパラメータ設定を行うとともに，企業へのライセンス化を経て，幅広いユーザにDBDSLVを提供したい．

(iii) I-SVDアルゴリズムの並列化について

本研究の成果の第三はI-SVDアルゴリズムの並列化についての重要なアイデアを得たことである．I-SVDアルゴリズムの特異ベクトル計算部分（ツイスト分解と逆反復）の並列実行は容易である．しかしながら，次表のように，実行時間全体の約3割を占める特異値計算部分（mdLVsアルゴリズム）は並列実行が難しく，全体の並列化効率は低いものとなっていた．(行列次数3000)

プロセッサ数(CPUs)	1	2	4	8	16	32
I-SVD実行時間	6.43	4.21	3.02	2.47	2.16	2.02
全実行時間並列度	1.00	1.53	2.13	2.60	2.98	3.18
特異値計算時間	1.62	1.62	1.62	1.62	1.62	1.62
ベクトル計算並列度	1.00	1.95	3.81	7.56	14.87	27.88
特異ベクトル計算時間	4.46	2.29	1.17	0.59	0.30	0.16
その他計算時間	0.35	0.30	0.23	0.26	0.24	0.24

本研究では，あるアイデアにより，特異値計算部の並列度を高めることに成功している．これについては現在，特許出願準備中のため，この要旨の中で詳しく触れることはできない．

(iv) 特許出願

平成16年6月3日にI-SVDアルゴリズムについて「行列の高速高精度特異値分解法，プログラムおよび装置」（特願2004-166437号）として国内特許出願した．悪性の行列が現れるため単純な数値計算では特異ベクトル計算における精度の悪化や不安定化が避けられないが，請求項では，プログラミング上の工夫によって誤差の増大を回避する方法を示している．アルゴリズム特許は日本では例が少ないが，計算機でなければできない工夫を明示することで特許出願が可能となったものである．本特許出願についてはその後，JST知的財産委員会にてPCT出願が認められた．平成17年6月1日にPCT出願（出願番号：PCT/JP2005/10084）を終え，今後は米国，カナダ，EP（英，独，仏）への外国特許出願を進める予定である．さらに，並列特異値分解についても決定的なアイデアを得ることができ，現在特許出願準備中である．

３．主な研究成果

(1)論文発表

[1] M. Iwasaki and Y. Nakamura, An application of the discrete Lotka-Volterra system with variable step-size to singular value computation, Inverse Problems, Vol. 20(2004), 553—563.

[2] Y. Nakamura, A new approach to numerical algorithms in terms of integrable systems, Proceedings of International Conference on Informatics Research for Development of Knowledge Society Infrastructure ICKS 2004, Eds. T. Ibaraki, T. Inui and K. Tanaka, IEEE Computer Society Press, 2004, pp. 194—205.

[3] 高田雅美，岩崎雅史，木村欣司，中村佳正，高精度特異値計算ルーチンの開発とその性能評価，情報処理学会論文誌, Vol. 46, No. SIG12(2005), 299—311.

[4] M. Takata, M. Iwasaki, K. Kimura and Y. Nakamura, An evaluation of singular value computation by the discrete Lotka-Volterra system, Proceedings of The 2005 International Conference on Parallel and Distributed Processing Techniques and Applications, Vol. II, pp. 410—416.

[5] 岩崎雅史, 中村佳正,特異値計算アルゴリズムdLVの基本性質について, 日本応用数理学会論文誌, Vol. 15, No. 3(2005), 287—306.

[6] 岩崎雅史, 阪野真也, 中村佳正, 実対称3重対角行列の高精度ツイスト分解とその特異値分解への応用, 日本応用数理学会論文誌, Vol. 15, No. 3(2005), 461—481.

(2)口頭発表

[1] 岩崎雅史（JST・京大情報学），中村佳正（京大情報学・JST），不等間隔差分ロトカ・ボルテラ系の特異値計算への応用, 第32回数値解析シンポジウム, 箱根ホテル小涌園, 2003.5.21.

[2] Y. Nakamura (Kyoto Univ./JST), M. Iwasaki(JST/Kyoto Univ.) and S. Tsujimoto(Kyoto Univ.), Integrable algorithm for singular value computations, 5th International Congress on Industrial and Applied Mathematics (ICIAM 2003), Sydney, 2003.7.7.

[3] Y. Nakamura (Kyoto Univ./JST), I-SVD: A new singular value decomposition algorithm with a high relative accuracy, GAMM Workshop Applied and Numerical Linear Algebra, FernUniversit¥"at in Hagen, 2004.7.3.

[4] 岩崎雅史（JST・京大情報学），中村佳正（京大情報学・JST），可積分特異値分解I-SVDアルゴリズムの収束性について, 日本応用数理学会「行列・固有値問題の解法とその応用」第１回研究集会, 電気通信大学, 2004.11.26.

[5] 髙田雅美（JST・京大情報学），岩崎雅史（JST・京大情報学），木村欣司（九大数理），中村佳正（京大情報学・JST），ロトカ・ボルテラ系による特異値計算アルゴリズムの実装と性能評価, 2005年 ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム(HPCS2005), 東京大学, 情報処理学会, 2005.1.18.

[6] M. Takata (JST/Kyoto Univ.), M. Iwasaki (JST/Kyoto Univ.), K. Kimura (JST/Rikkyo Univ.) and Y. Nakamura (Kyoto Univ./JST), An evaluation of singular value computation by the discrete Lotka-Volterra system, The 2005 International Conference on Parallel and Distributed Processing Techniques and Applications (PDPTA2005), Monte Carlo Resort, Las Vegas, 2005.6.28.