

## 特異値計算アルゴリズムの性能評価のための 条件数の大きい行列作成法

高田 雅美<sup>†1</sup> 木村 欣司<sup>†2</sup> 中村 佳正<sup>†2</sup>

本論文では、特異値分解を評価するために、条件数の大きなテスト行列の作成法を提案する。我々が対象とする条件数は、以下の2種類である。1つ目は、連立1次方程式を解く際の困難さを1つの指標とする。2つ目は、特異値の近接度を用いる。1つ目の提案作成法では、2重対角行列のみならず、密行列を作成することも可能である。一方、2つ目の提案作成法では、2重対角行列のみが作成可能である。提案する2種類の作成法の目的は異なるため、それぞれに意義がある。これらの作成法を用いて、LAPACK 3.2.1に含まれているいくつかの特異値分解アルゴリズムを評価する。

### Generating Algorithms for Matrices with Large Condition Number to Evaluate Singular Value Decomposition

MASAMI TAKATA,<sup>†1</sup> KINJI KIMURA<sup>†2</sup>  
and YOSHIMASA NAKAMURA<sup>†2</sup>

In this paper, we propose new generating algorithms for matrices with large condition number to evaluate singular value decomposition. We target two types of condition number. The first means intractableness to solve simultaneous linear equation. The second uses adjacent amount in each singular value. The first proposed algorithm can generate not only bidiagonal but also dense test matrices. On the other hand, the second proposed algorithm can generate only bidiagonal test matrices. Since targets in the proposed algorithms are different, it is important to generate test matrices in two types of condition number. By using two generating algorithms, some singular value decomposition routines in LAPACK version 3.2.1 are evaluated.

### 1. はじめに

特異値分解の優劣を判定するには、実行時間と計算精度の評価などが必要となる。実行時間は、成分を乱数で与えたテスト行列を複数個用意すれば、ある程度評価できる。一方、特異値分解アルゴリズムの数値的な性能に関して、計算された特異ベクトルの計算精度としてその直交性を指標にすることが多い。しかしながら、この指標では、計算された特異ベクトルと正しい特異ベクトルとの数値的なずれを確認することはできない。同様に、計算された特異値と正しい特異値との誤差も扱われない。つまり、ある特異値分解アルゴリズムによって計算された特異ベクトルが、正確でなくても直交性さえ優れていれば、そのアルゴリズムの評価が高くなる危険性がある。よって、特異値と特異ベクトルが既知の行列をテスト行列として用い、性能評価のための数値実験を行うべきである。

テスト行列の作成方法として、次の5つが考えられる。1つ目の方法は、特異値分解アルゴリズムの倍精度演算用プログラムコードを多倍長演算用書き換える方法である。2つ目の方法は、固有値分解アルゴリズムの計算精度を調べる際に利用されるWilkinson行列<sup>8)</sup>などに対して、Cholesky分解を行いう方法である。3つ目の方法として、3角関数で特異値および特異ベクトルを表現できる行列がある<sup>16)</sup>。4つ目は、Golub-Kahan-Lanczos法<sup>6)</sup>の拡張版<sup>14)</sup>を利用している<sup>15)</sup>。5つ目は、対角行列に対してJacobi回転およびGivens回転を繰り返し施すことでテスト行列を作成する<sup>15)</sup>。

本研究では、新たに、条件数の大きいテスト行列の作成法を提案する。条件数には、ある行列の最大特異値を最小特異値で割った値を用いるものと、特異値の相対的な近接度を用いるものがある。これら、それぞれに対応するテスト行列の作成法を開発する。この提案する作成法を用いて、テスト行列の例を示し、数値計算ライブラリとして有名なLAPACK<sup>13)</sup>に搭載されているいくつかの特異値分解アルゴリズムの性質を調べる。

本論文の構成は以下の通りである。2章において、特異値分解アルゴリズムの現状について説明する。3章において、数学的な準備として、固有値と特異値の関係を説明する。4章において、条件数の大きいテスト行列の作成法について説明する。5章において、テスト行列の例を示す。6章において、LAPACK 3.2.1のアルゴリズムに対して性能評価を行う。

<sup>†1</sup> 奈良女子大学  
Nara Women's University

<sup>†2</sup> 京都大学  
Kyoto University

## 2. 特異値分解

長方形行列の特徴を知る有効な手段として、特異値分解がある。

長方形行列のための方法として、Jacobi 特異値分解<sup>4)</sup>がある。一般的に、Jacobi 特異値分解法は、計算速度は遅いが、高精度であるといわれている。

短時間に特異値分解を行うためには、与えられた  $l \times m$  ( $l \geq m$ ) の長方形行列  $A$  を 2 重対角行列  $B$  に変換する前処理がかかせない<sup>2),6)</sup>。前処理法として、一般的に、Householder 法<sup>2),6)</sup>が利用されている。Householder 法によって、長方形行列  $A$  は、特異値を変化させることなく、2 重対角行列  $B$  に変換することができる。続いて、 $B$  の特異値分解  $B = U\Sigma V^T$  を計算する。つまり、Householder 法と  $B$  の特異値分解を合わせることによって、 $A$  の特異値分解が完了する。ここで、 $\Sigma$  は  $B$  の特異値  $\sigma_i \geq 0$  ( $i: 1 \leq i \leq m$ ) が対角成分に並ぶ対角行列、 $U = (\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_m)$  は  $\sigma_i$  に対する左特異ベクトル  $\mathbf{u}_i$  が列に並ぶ左直交行列、 $V = (\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_m)$  は  $\sigma_i$  に対する右特異ベクトル  $\mathbf{v}_i$  が列に並ぶ右直交行列である。2 重対角行列  $B$  の標準的な特異値分解法として、QR 法<sup>2),3),5)-7)</sup>、分割統治法<sup>1),9)</sup>、拡大行列を用いた 2 分法と逆反復法による解法などが挙げられる。我々が提案している I-SVD (Integrable-Singular Value Decomposition)<sup>10),11),14)</sup> 法も有効である。

特異値計算の性能評価のための指標として、

$$\sum_i^n \frac{|\hat{\sigma}_i - \sigma_i|}{|\sigma_i|} \quad (1)$$

を用いる。ここで、 $\sigma_i$  は正しい特異値であり、 $\hat{\sigma}_i$  は特異値計算アルゴリズムによって計算された特異値とする。

本論文では、特異値分解の条件数として、条件数 1 (CN1) と条件数 2 (CN2) を用いる。CN1 は、連立 1 次方程式を解く際の困難さを表すものである。

$$CN1 = \frac{\sigma_{\max}}{\sigma_{\min}}. \quad (2)$$

CN2 は、相対的な近接度を用いる。

$$CN2 = \max_{i \neq j} \frac{|\sigma_{\max}|}{|\sigma_i - \sigma_j|}, \quad 1 \leq i, j \leq m \quad (3)$$

## 3. 固有値と特異値の関係

任意の  $m \times m$  正方形行列  $\tilde{A}$  において、逆行列  $\tilde{A}^{-1}$  が存在するならば、

$$\frac{\max_i |\tilde{\lambda}_i|}{\min_i |\tilde{\lambda}_i|} \leq \frac{\max_i \tilde{\sigma}_i}{\min_i \tilde{\sigma}_i} \quad (4)$$

が成り立つ。ここで、 $\tilde{\lambda}_i$  と  $\tilde{\sigma}_i$  は、それぞれ、 $\tilde{A}$  の固有値と特異値とする。 $\tilde{A}$  に関して、絶対値最大の固有値と絶対値最小の固有値の比よりも条件数のほうが常に大きい。そのため、 $\tilde{A}$  の特異値分解の困難さの指標として、

$$\frac{\max_i |\tilde{\lambda}_i|}{\min_i |\tilde{\lambda}_i|} \quad (5)$$

を利用してよい。

特に、 $\tilde{A}$  が対称行列である場合、

$$|\tilde{\lambda}_i| = \tilde{\sigma}_i \quad (6)$$

が成り立つ。つまり、

$$\frac{\max_i |\tilde{\lambda}_i|}{\min_i |\tilde{\lambda}_i|} = \frac{\max_i \tilde{\sigma}_i}{\min_i \tilde{\sigma}_i} \quad (7)$$

となる。

## 4. 大きな条件数を持つテスト行列の作成法

4.1 節と 4.2 節では、それぞれ、CN1 と CN2 において、大きな条件数を持つテスト行列を提案する。

### 4.1 条件数 1 に対する作成法

正方形行列  $\tilde{A}$  の特異値は、

$$X = \tilde{A}^T \tilde{A} \quad (8)$$

の固有値の平方根である。次に、 $Y = \tilde{A} \tilde{A}^T \tilde{A}$  の特異値は、

$$\begin{aligned} Y^T Y &= (\tilde{A}^T \tilde{A} \tilde{A}^T) \tilde{A} \tilde{A}^T \tilde{A} \\ &= X \tilde{A}^T \tilde{A} X \\ &= X^3 \end{aligned} \quad (9)$$

の平方根となる。



関数で固有値と固有ベクトル (特異値と特異ベクトル) が表現できるテスト行列を採用する .  
このテスト行列のほとんどが , 対称行列である .

5.1 節では , 固有値と固有ベクトルが 3 角関数で表される 3 重対角行列を説明する . 5.2 節では , 5.1 節で述べた 3 重対角行列の逆行列の例を紹介する . 5.3 節では , 5.1 節の行列から導き出される 2 重対角行列を示す .

5.1 固有値と固有ベクトルが 3 角関数で表される 3 重対角行列の例  
ある行列  $\bar{A}$  が

$$\bar{A} = \begin{pmatrix} \alpha\sqrt{a}\sqrt{c} + b & c & & & \\ & a & b & c & \\ & & a & \ddots & \ddots \\ & & & \ddots & \ddots & c \\ & & & & a & b \end{pmatrix} \quad (16)$$

で与えられているとする . この時 , この行列の固有値  $\bar{\lambda}_i$  と固有ベクトル  $\bar{x}_i$  は以下のように表される .  $\alpha = 0$  の時 ,

$$\begin{cases} \bar{\lambda}_i = b + 2\sqrt{a}\sqrt{c} \cos \frac{i\pi}{m+1}, \\ \{\bar{x}_i\}_j = \left(\frac{\sqrt{a}}{\sqrt{c}}\right)^{j-1} \sin \frac{j i \pi}{m+1}, \end{cases} \quad (17)$$

$\alpha = 1$  の時 ,

$$\begin{cases} \bar{\lambda}_i = b + 2\sqrt{a}\sqrt{c} \cos \left(\frac{2i-1}{2m+1}\pi\right), \\ \{\bar{x}_i\}_j = \left(\frac{\sqrt{a}}{\sqrt{c}}\right)^{j-1} \sin \left(\frac{(m+1-j)(2i-1)}{2m+1}\pi\right), \end{cases} \quad (18)$$

$\alpha = -1$  の時 ,

$$\begin{cases} \bar{\lambda}_i = b - 2\sqrt{a}\sqrt{c} \cos \left(\frac{2i-1}{2m+1}\pi\right), \\ \{\bar{x}_i\}_j = \left(\frac{\sqrt{a}}{\sqrt{c}}\right)^{j-1} \sin \left(\frac{(m+1-j)(2i-1)}{2m+1}\pi\right). \end{cases} \quad (19)$$

となる . ここで , 要素  $\{\bar{x}_i\}_j$  ( $j : 1 \leq j \leq m$ ) は , 固有ベクトル  $\bar{x}_i$  の  $j$  番目の要素である .

5.2 3 重対角行列の逆行列の例

本項では , 5.1 項で述べた 3 重対角行列の逆行列の例をあげる .

式 (16) より ,  $\alpha = 0$  ,  $a = c = -1$  ,  $b = 2$  の場合 ,

$$\bar{A}^{(1)} = \begin{pmatrix} 2 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & -1 & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & -1 \\ & & & -1 & 2 \end{pmatrix}, \quad (20)$$

となる . この固有値  $\bar{\lambda}_i^{(1)}$  と固有ベクトル  $\bar{x}_i^{(1)}$  は ,

$$\begin{cases} \bar{\lambda}_i^{(1)} = 2 - 2 \cos \frac{i\pi}{m+1}, \\ \{\bar{x}_i^{(1)}\}_j = \sin \frac{j i \pi}{m+1}, \end{cases} \quad (21)$$

である . この逆行列は ,

$$(m+1)(\bar{A}^{(1)})^{-1} = \begin{pmatrix} m & m-1 & \cdots & 2 & 1 \\ m-1 & 2(m-1) & \cdots & 4 & 2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 2 & 4 & \cdots & 2(m-1) & m-1 \\ 1 & 2 & \cdots & m-1 & m \end{pmatrix}. \quad (22)$$

となる . この時 ,  $(\bar{A}^{(1)})^{-1}$  の固有値は ,  $1/\bar{\lambda}_i^{(1)}$  となる .

式 (16) より ,  $\alpha = 1$  ,  $a = c = -1$  ,  $b = 2$  の場合 ,

$$\bar{A}^{(2)} = \begin{pmatrix} 1 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & -1 & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & -1 \\ & & & -1 & 2 \end{pmatrix} \quad (23)$$

である . この固有値  $\bar{\lambda}_i^{(2)}$  と固有ベクトル  $\bar{x}_i^{(2)}$  は ,

$$\begin{cases} \bar{\lambda}_i^{(2)} = 2 - 2 \cos \left(\frac{2i-1}{2m+1}\pi\right), \\ \{\bar{x}_i^{(2)}\}_j = \sin \left(\frac{(m+1-j)(2i-1)}{2m+1}\pi\right), \end{cases} \quad (24)$$

である . この逆行列は ,

$$(\bar{A}^{(2)})^{-1} = \begin{pmatrix} m & m-1 & m-2 & \cdots & 2 & 1 \\ m-1 & m-1 & m-2 & \cdots & 2 & 1 \\ m-2 & m-2 & m-2 & \cdots & 2 & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 2 & 2 & 2 & \cdots & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 & 1 \end{pmatrix}. \quad (25)$$

である。

### 5.3 2重対角行列の例

本項では、5.2節の行列から導き出される2重対角行列を示す。

$\bar{A}^{(2)} = (\bar{B}^{(2)})^T \bar{B}^{(2)}$  を満たす上2重対角行列  $\bar{B}^{(2)}$  は、

$$\bar{B}^{(2)} = \begin{pmatrix} 1 & -1 & & & & \\ & \ddots & \ddots & & & \\ & & \ddots & \ddots & & \\ & & & \ddots & -1 & \\ & & & & & 1 \end{pmatrix}, \quad (26)$$

である。よって、 $\bar{B}^{(2)}$  の特異値  $\bar{\sigma}_i^{(2)}$  は、式(24)に3角関数の2倍角の公式を適用し、

$$\begin{aligned} \bar{\sigma}_i^{(2)} &= \sqrt{2 - 2 \cos\left(\frac{2i-1}{2m+1}\pi\right)} \\ &= \sqrt{2 - 2 \left(1 - 2 \sin^2\left(\frac{1}{2} \frac{2i-1}{2m+1}\pi\right)\right)} \\ &= 2 \sin\left(\frac{2i-1}{2(2m+1)}\pi\right), \end{aligned} \quad (27)$$

となる。この逆行列は、

$$(\bar{B}^{(2)})^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 & 1 \\ & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ & & \ddots & \ddots & \vdots \\ & & & \ddots & 1 \\ & & & & 1 \end{pmatrix}, \quad (28)$$

となる。

表1 特異値の計算誤差の総和

m	CN1	(1)	(2)	(3)	
50	$7.05 \times 10^{10}$	$2.84 \times 10^{-6}$	$2.84 \times 10^{-6}$	$2.53 \times 10^{-6}$	$1.59 \times 10^{-6}$
100	$4.39 \times 10^{12}$	$1.36 \times 10^{-4}$	$4.56 \times 10^{-4}$	$1.80 \times 10^{-4}$	$8.69 \times 10^{-5}$
200	$2.77 \times 10^{14}$	$1.64 \times 10^{-2}$	1.00	-	$7.50 \times 10^{-3}$
300	$3.14 \times 10^{15}$	$2.01 \times 10^{-1}$	3.91	-	$1.14 \times 10^{-1}$

表2 700 × 700 の正方行列  $(\bar{A}^{(2)})^{-1}$  に対する性能 (CN1 =  $7.95 \times 10^5$ )

	(1)	(2)	(3')
時間 [sec]	4.17	1.87	25.44
誤差	$8.90 \times 10^{-11}$	$5.09 \times 10^{-10}$	$5.56 \times 10^{-11}$

## 6. 実験

4章で提案したテスト行列を用いて、特異値分解用アルゴリズムを性能比較する。計算機は、CPUとしてIntel Xeon X7350、メモリサイズ128GBを用いる。コンパイラにはgfortran 4.4.3を用い、ライブラリとしてLAPACK 3.2.1およびそれに付随するBLASを適用する。

最初に、大きなCN1を持つ行列に対する実験を行う。テスト行列は、 $\bar{Y} = (\bar{A}^{(2)})^{-1}((\bar{A}^{(2)})^{-1})^T(\bar{A}^{(2)})^{-1}$  とする。 $(\bar{A}^{(2)})^{-1}$  は対称行列であるため、固有値の絶対値と特異値は一致する。アルゴリズムとしては、次の3つを用いる。

- (1) Householder型前処理付きQRアルゴリズム (DGESVD)
- (2) Householder型前処理付き分割統治法 (DGESDD)
- (3) Jacobi特異値分解法 (DGESVJ)

( ) は、LAPACK 3.2.1の関数名を表す。アルゴリズム(3)のJacobi特異値分解法は、与えられた行列に対して、片側からのみJacobi行列を作用させている。そこで、両側からJacobi行列を作用させるアルゴリズム(3')に対しても実験を行う。表1は、2章で説明した特異値計算の誤差を示したものである。この結果より、条件数が大きくなると、全てのアルゴリズムで精度が劣化している。また、アルゴリズム(3)では、 $m \geq 200$ で計算結果が返されなかった。両側からJacobi行列を作用させるアルゴリズムでは、特異値分解が可能となる。表2は、700 × 700の正方行列  $(\bar{A}^{(2)})^{-1}$  に対する実験結果である。この結果より、特異値の誤差の面では、アルゴリズム(1)と(3')は拮抗していることがわかる。しかしながら、実行時間に関して、アルゴリズム(3')の方が非常に遅い。

表 3 1700 × 1700 の GK 行列に対する性能

	(4)	(5)	(6)
時間 [sec]	43.04	3.00	5.22
$\ U^T U - I\ _F$	$2.94 \times 10^{-13}$	$1.19 \times 10^{-13}$	$6.82 \times 10^{-12}$
$\ V^T V - I\ _F$	$2.94 \times 10^{-13}$	$1.18 \times 10^{-13}$	$6.82 \times 10^{-12}$
$\ B - U\Sigma V^T\ _F$	$2.29 \times 10^{-12}$	$8.27 \times 10^{-13}$	$2.11 \times 10^{-11}$

次に、大きな CN2 を持つ行列に対して実験する。このテスト行列は、2 重対角行列であるため、アルゴリズムとしては、次の 3 つを用いる。

- (4) QR 法 (dbdsqr)
- (5) 分割統治法 (dbdsdc)
- (6) 2 分法と逆反復

なお、アルゴリズム (6) では、拡大行列を用いている。そのため、テスト行列のサイズは、3400 × 3400 となる。表 3 は、その結果である。精度に関して、(4) や分割行列に対して QR 法を適用するアルゴリズム (5) のほうが高精度である。実行時間に関して、(5) の時間が最も短い。ゆえに、大きな CN2 を持つ行列に対しては、アルゴリズム (5) のほうが適している。

以上の実験より、行列の持つ性質によって、適切な特異値分解アルゴリズムは異なる。そのため、適用する特異値分解アルゴリズムの選択には、注意が必要である。

## 7. ま と め

本稿では、大きな条件数を持つテスト行列の作成方法を 2 種類提案した。CN1 では、特異値と特異ベクトルが既知の行列が必要となる。そこで、このための行列として、3 角関数で表される行列を紹介した。CN2 では、提案した作成法によって、近接特異値を持つ行列を組み合わせることで、大規模行列の作成を可能となる。提案手法によって作成されたテスト行列を用いて、LAPACK 3.2.1 に搭載されている特異値分解アルゴリズムの実験を行った。その結果、実行時間および精度の面から、与えられたテスト行列の性質によって適切な特異値分解アルゴリズムが異なることがわかった。ゆえに、特定の性質を持つテスト行列の作成は、必要であると考えられる。

今後は、条件数以外の性質的な違いを持つテスト行列の作成法を調査すべきである。

謝辞 この研究の一部は、日本学術振興会科学研究費補助金基盤研究 (A) (20246027) により支援を受けております。

## 参 考 文 献

- 1) Cuppen, J.J.M.: A divide and conquer method for the symmetric tridiagonal eigenproblem, *Numerische Mathematik*, Vol.36, 1981, 177–195.
- 2) Demmel, J.: *Applied Numerical Linear Algebra*, SIAM, Philadelphia (1997).
- 3) Demmel, J. and Kahan, W.: Accurate singular values of bidiagonal matrices, *SIAM J. Sci. Sta. Comput.*, Vol.67, pp.191–229 (1994).
- 4) Drmac, Z. and Veselic, K., New fast and accurate Jacobi SVD algorithm: I, LAPACK WORKING NOTE 169. Zlatko Drmac and Kresimir Veselic, New fast and accurate Jacobi SVD algorithm: II, LAPACK WORKING NOTE 170.
- 5) Francis, J.G.F.: The QR transformation a unitary analogue to the LR transformation—part 1, *Computer J.*, Vol.4, pp.265–271 (1961).
- 6) Golub, G. and Kahan, W.: Calculating the singular values and pseudo-inverse of a matrix, *SIAM J. Numer. Anal.*, Vol. 2, pp.205–224(1965).
- 7) Golub, G. and Reinsch, C.: Singular value decomposition and least squares solutions, *Numer. Math.*, Vol.14, pp.403–420 (1970).
- 8) Gregor, R.T. and Karney, D.L.: A Collection of Matrices for Testing Computational Algorithms Interscience., *Wiley-Interscience*, 1969.
- 9) Gu, M. and Eisenstat, S.C.: A divide-and-conquer algorithm for the symmetric tridiagonal eigenproblem, *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, Vol.16, No.1, 1995, 172–191.
- 10) Iwasaki, M. and Nakamura, Y.: On the convergence of a solution of the discrete Lotka-Volterra system, *Inverse Problems*, Vol.18, pp.1569–1578 (2002).
- 11) 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 SVD への応用, *応用数理学論文誌*, No.15, Vol.3, pp.461–481 (2005).
- 12) Johnson, C.R.: A Gersgorin-type lower bound for the smallest singular value, *Lin. Alg. Appl.*, Vol.112, pp.1–7 (1989).
- 13) LAPACK-Linear Algebra PACKage  
<http://www.netlib.org/lapack/>
- 14) 高田雅美, 木村欣司, 岩崎雅史, 中村佳正: 高速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), pp.91–104 (2006).
- 15) Takata, M., Kimura, K., Iwasaki, M. and Nakamura, Y.: Algorithms for Generating Bidiagonal Test Matrices, *In Proceedings of International Conference on Parallel and Distributed Processing Techniques and Applications*, Vol.II, pp.732–738 (2007).
- 16) 山本哲郎: 数値解析入門 (増訂版), サイエンス社 (2003)