テクニカルノート

ランク落ちした行列に対する特異値分解アルゴリズムについて

細田陽介[†] 鉾田雅之[††] 長谷川武光[†]

行列の特異値分解は重要な数値計算手法の1つである．通常，特異値分解はハウスホルダー変換を用いて二重対角化し，それからQRアルゴリズムなどにより特異値を求める．このとき，二重対角化ではランク落ちは考慮されていないため，ランク落ちした行列に対しては無駄な計算がともなうことになる．本論文で我々は二重対角化に対してピボット選択付きのハウスホルダー変換を用いるアルゴリズムを提案する．本方法を用いることによりランク落ちした行列に対して，より少ない計算時間で特異値分解が求まることが数値実験により確認された．

A Singular Value Decomposition Algorithm for Rank-deficient Matrices

Yohsuke Hosoda,[†] Masayuki Hokoda[††] and Takemitsu Hasegawa[†]

In this paper we propose a new singular value decomposition (SVD) algorithm for rank-deficient matrices. This algorithm is based on the use of a row pivoting Householder transform in bidiagonalizing the matrices. Numerical experiments show that our algorithm obtains the SVD faster for the rank-deficient matrices than ordinary SVD algorithms.

1. はじめに

我々の目的は行列 A の特異値分解

$$A = U\Sigma V^T \tag{1}$$

を求めることにある．ここで A は実 $m \times n$ 行列で，$m \geq n$ として一般性を失わない．また，U，V はそれぞれ $m \times m$，$n \times n$ の正規直交行列，Σ は $m \times n$ の対角行列で，その対角成分 $\{\sigma_j\}$ は

$$\sigma_1 \geq \cdots \geq \sigma_n \geq 0$$

の順に並んでいるものとする．この σ_j を特異値，U，V の列ベクトルをそれぞれ左，右特異ベクトルと呼ぶ．

行列の特異値分解はさまざまな線形問題に対して有用である．特に係数行列がランク落ちをおこしているような線形方程式や，悪条件な問題に対する最小二乗問題の数値解法として幅広く使われている[1),4),5)]．

通常，特異値分解は次の手順で計算される．

1. 行列の二重対角化を行う．
2. 二重対角化した行列の特異値を求める．

このうち，1. は行列の左右から順次ハウスホルダー変換を施すことにより求められる．また，2. はQRアルゴリズムの改良[1),3),5)]，あるいは近年では文献 2)，8) などの方法も提案されている．

通常の特異値分解アルゴリズムにおける二重対角化はランク落ちは考慮されていない．そのため，どのような行列に対しても同様の操作を行うことになり，ランク落ちした行列に対しては無駄な計算をともなうことになる．ここで我々は，この二重対角化においてピボット選択付きハウスホルダー変換を用いることにより，ランク落ちした行列に対しての効率的な特異値分解アルゴリズムを提案する．

本方法は行列の二重対角化において行ピボット選択を行うことにより，二重対角性を崩すことなく効率的な計算を図る．特に，ランク落ちをしている行列に対しては高速に分解が得られることが数値実験により確認された．

本論文の構成は以下のとおりである．まず，2 章で我々の提案するピボット選択を用いた二重対角化アルゴリズムについて述べる．3 章で数値実験およびその考察を行い，4 章でまとめる．

† 福井大学工学部
Faculty of Engineering, Fukui University
†† 福井大学大学院工学研究科
Graduate Course in Engineering, Fukui University

2. ピボット選択を用いた二重対角化

本章では，ピボット選択を用いたハウスホルダー変換による二重対角化について述べる．

いま，行列 A と行列要素のゼロ判定を行うための定数 $\varepsilon_a > 0$ が与えられ，$k-1$ 段階までの二重対角化

$$A_{k-1} := \begin{bmatrix} d_1 & f_1 & & & & & \\ & \ddots & \ddots & & & & \\ & & d_{k-1} & f_{k-1} & & & \\ & & & a_{kk}^{(k-1)} & \cdots & a_{kn}^{(k-1)} \\ & & & \vdots & \ddots & \vdots \\ & & & a_{mk}^{(k-1)} & \cdots & a_{mn}^{(k-1)} \end{bmatrix}$$

が得られたものとする．ただし，$A_0 := A$ である．このとき，上式右辺の右下 $(m-k+1) \times (n-k+1)$ 小行列を $A^{(k-1)}$ とおき，k 段階目の二重対角化を以下の手順で行う．

Step 1 $A^{(k-1)}$ の中で絶対値が最大の要素を探す．もし，その値が ε_a 以下ならば二重対角化終了．

Step 2 絶対値最大の要素を含む行と $A^{(k-1)}$ の第 1 行とを入れ替える．

Step 3 $A^{(k-1)}$ の第 1 列において，絶対値が最大となる要素を探す．もしその値が ε_a 以下ならば $d_k = 0$ とおき Step 6 へ．

Step 4 $A^{(k-1)}$ の第 1 列の第 2 項以下を 0 とするようなハウスホルダー変換を左から $A^{(k-1)}$ に行う．対角化された第 1 列の対角成分を d_k とおく．$k = n$ ならば二重対角化終了．

Step 5 上の操作で更新された $A^{(k-1)}$ の第 1 行において，第 2 項以降で絶対値が最大となる要素を探す．もし，その値が ε_a 以下ならば $f_k = 0$ とおき Step 7 へ．

Step 6 $A^{(k-1)}$ の第 1 行の第 3 項以降を 0 とするようなハウスホルダー変換を右から $A^{(k-1)}$ に行い，更新された $A^{(k-1)}$ の第 1 行第 2 項を f_k とおく．

Step 7 $k = k+1$ として Step 1 へ．

ただし，$k = n-1$ のときは Step 4〜6 が，$k = n$ のときは Step 2 が不要である．

ここで，Step 2 の行の入れ換えを置換行列 Π_k，Step 4 および Step 6 のハウスホルダー変換をそれぞれ行列 $\tilde{U}_k$，$\tilde{V}_k$ で表すと，上の操作は

$$A_k = \tilde{U}_k \Pi_k A_{k-1} \tilde{V}_k$$

と行列表記することができる．これを $A^{(k-1)}$ の要素がすべて ε_a 以下になるまで，もしくは $k = n$ まで行うことにより二重対角行列が得られる．いま，上の操作を p 回行うことにより二重対角行列 B が得られたとすると，正規直交行列 $\tilde{U}$，$\tilde{V}$ をそれぞれ

$$\tilde{U} := \Pi_1 \tilde{U}_1 \cdots \Pi_p \tilde{U}_p, \quad \tilde{V} := \tilde{V}_1 \cdots \tilde{V}_p \qquad (2)$$

とおくことにより B は，

$$B = \tilde{U}^T A \tilde{V} + O(\varepsilon_a) \qquad (3)$$
$$= \begin{bmatrix} d_1 & f_1 & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & d_p & f_p \\ & & & \end{bmatrix}$$

と書ける．この B に対して文献 2)，3)，5)，8) などで述べられている二重対角行列の特異値を求める方法を適用し，必要に応じて特異値および特異ベクトルの順序を入れ替えることにより特異値分解 (1) が得られる．ただし，B は対角成分として 0 をとりうるため，p は必ずしも A の数値的な階数ではないことに注意する．

また，分解 (3) における正規直交行列 $\tilde{U}$ は式 (2) により求めることができる．このとき，通常の特異値分解アルゴリズムの場合に比べ，置換行列 Π_j がハウスホルダー行列 $\tilde{U}_j$ の間に現れるため，計算の手間を要する．しかし，線形方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ の最小二乗問題を解くときは，陽に分解 (1) の U を求める必要はなく，$U^T\boldsymbol{b}$ が求まればよい．ベクトル $U^T\boldsymbol{b}$ は行列 A に対する左からの直交変換を A に対してと同様に $\boldsymbol{b}$ にも行うことにより求められるため，行変換による計算量の増加は軽減できる．

3. 数値実験および考察

本章では，我々の提案する方法の有効性を数値実験を用いて検証する．

数値実験は [0,1] 区間上の一様乱数を用いて生成した行列に対して行った．テスト行列はまずランク個の列ベクトルを一様乱数から生成し，それ以降の列ベクトルとして，それらランク個の列ベクトルの適当な線形和を用いることにより作成した．線形和の係数も同様に一様乱数を用いた．サイズ 500×500 のテスト行列を，ランクが 10 から 500 まで，10 刻みでそれぞれ 5 個，ちがう乱数の初期値を用いて作成し，それらの行列に対して特異値分解に要した時間を測定し，平均をとった．ここでは式 (1) における正規直交行列 U および V はすべて求めた．実験は Pentium III 600 MHz 搭載の計算機を用い，数値計算はすべて倍精度実数で行った．プログラムは C 言語で作成し，コンパイラは Linux 上の gcc を用いた．2 章，アルゴリズム中の行列の要素のゼロ判定のために用いる定数

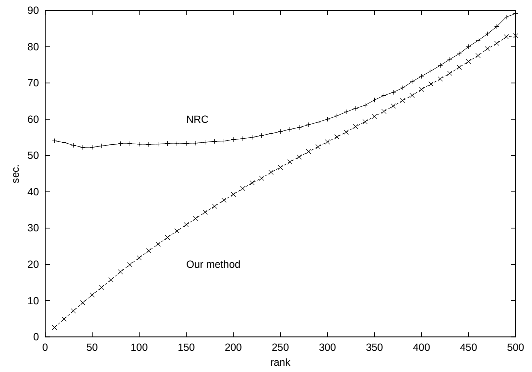


図 1　我々の方法および通常の方法を用いての特異値分解に要した計算時間の比較

Fig. 1　CPU-time in NRC and our algorithms.

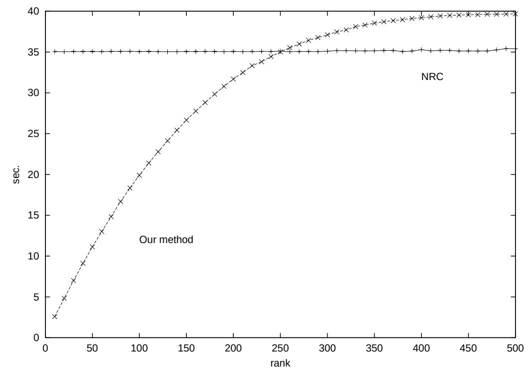


図 2　我々の方法および通常の方法において二重対角化に要した時間の比較

Fig. 2　CPU-time in bidiagonarizations by NRC and our algorithms.

は $\varepsilon_a = 1.0 \times 10^{-15}$ とした．比較のため，一般的な特異値分解ルーチンとしてライブラリ 6) を用いた．このプログラムは本質的にライブラリ 7) の特異値分解プログラムと同じものであり，二重対角行列の特異値分解法としては QR アルゴリズムを改良した文献 3), 5) の方法が用いられている．

それぞれの方法での計算時間の比較を**図 1** に示す．図中の `Our method` と `NRC` はそれぞれ本論文で我々の提案する方法とライブラリ 6) の特異値分解ルーチンを表す．また，縦軸は計算時間（秒），横軸は行列のランクである．ランクが行列のサイズよりも小さいときは，我々の方法ではより速く特異値分解が求められている．

次に，それぞれの方法において二重対角化（1 章の 1）に要した時間および二重対角行列の特異値を求める（1 章の 2）ために要した時間の比較を**図 2** および**図 3** に示す．

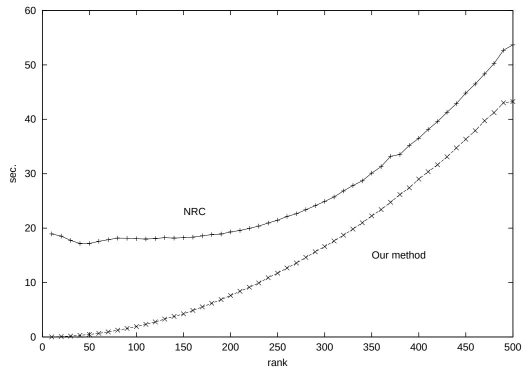


図 3　我々の方法および通常の方法において二重対角行列の特異値分解に要した計算時間の比較

Fig. 3　CPU-time in computing the SVD of bidiagonal matrices by NRC and our algorithms.

通常の特異値分解アルゴリズムでの二重対角化は行列のランクには無関係なため，ほぼ一定の時間を要するのに対し，我々の方法はランク落ちした行列に対しては高速に二重対角化が行われている．逆に，ランクが行列のサイズに近くなってくるとピボット選択のための行置換および式 (2) における $\tilde{U}$ の計算に時間がかかるため，通常の方法よりも遅くなる．しかし，二重対角行列の特異値の計算には我々の方法の方がすべてのランクの行列に対しても高速であるため，ランクが行列のサイズに近いような行列にも我々の方法は通常の方法と同程度の計算時間で分解が得られる結果となった．

なお，我々の方法と通常の方法によって得られた特異値の差および特異ベクトルの差はすべて 1.0×10^{-13} 程度であった．

4. ま と め

本論文において，我々はランク落ちをした行列に対する高速な特異値分解アルゴリズムを提案した．本方法はハウスホルダー変換による二重対角化において行ピボット選択を行うことにより，高速化を実現する．また，本方法は通常の特異値分解アルゴリズムに比べ，ランク落ちした行列に対しては高速に，ランクが行列のサイズに近い行列に対しても同程度の速度で特異値分解が可能であることを数値実験を用いて確認した．

謝辞　本研究を行うにあたり，有益な助言をいただいた南山大学数理情報学部鳥居達生教授に感謝します．

参 考 文 献

1) Björck, Å.: *Numerical Methods for Least Squares Problems*, SIAM, Philadelphia (1996).

2) Fernando, K. and Parlett, B.N.: Accurate singular values and differential qd algorithms, *Numer. Math.*, Vol.67, pp.191–229 (1994).
3) Golub, G.H. and Van Loan, C.F.: *Matrix Computation*, 3rd ed., Johns Hopkins University Press, Baltimore (1996).
4) Hansen, P.: *Rank-Deficient and Discrete Ill-Posed Problems*, SIAM, Philadelphia (1998).
5) 中川　徹, 小柳義夫：最小二乗法による実験データ解析：プログラム SALS, 東京大学出版会, 東京 (1982).
6) Press, W.H., Flannery, B.P., Teukolsky, S.A. and Vetterling, W.T.: *Numerical Recipes in C : The Art of Scientific Computing*, 2nd ed., Cambridge University Press, Cambridge, New York (1997).
7) Smith, B.T.: *Matrix Eigensystem Routines —EISPACK Guide*, 2nd ed., Springer-Verlag, New York (1975).
8) Tsujimoto, S., Nakamura, Y. and Iwasaki, M.: The discrete Lotka-Volterra system computes singular values, *Inverse Problems*, Vol.17, pp.53–58 (2001).

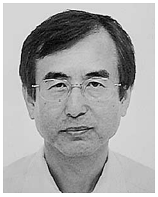
(平成 14 年 4 月 5 日受付)
(平成 14 年 9 月 5 日採録)

細田　陽介（正会員）

1965 年生．1994 年名古屋大学大学院博士課程修了．広島市立大学情報科学部助手，富山県立大学工学部助手を経て，現在福井大学工学部情報・メディア工学科講師．博士（工学）．数値解析，特に悪条件な線形方程式の数値解法の研究に従事．日本応用数理学会会員．

鉾田　雅之

1979 年生．2002 年福井大学工学部情報工学科卒業．現在福井大学大学院工学研究科情報工学専攻博士前期課程在学中．悪条件線形方程式の数値解法の研究に従事．



長谷川武光（正会員）

1944 年生．1972 年名古屋大学大学院博士課程単位修得退学．工学博士．福井大学工学部情報・メディア工学科教授．主たる研究テーマは数値解析，数学ソフトウェアおよびインターネット上での数値計算環境の構築．日本応用数理学会，日本物理学会，AMS，IEEE（Computer）各会員．