固有分解と特異値分解用ライブラリの性能評価のためのテスト行列に関する考察

木村 欣司 *† 髙田 雅美 ‡ 岩崎 雅史 ○ ㅂ 中村 佳正 ㅂ ○ 横山 和弘 † 野呂 正行 ⋆
kimura@math.kobe-u.ac.jp
* 科学技術振興機構 CREST ‡ 奈良女子大学大学院人間文化研究科複合現象科学専攻
† 立教大学理学部数学科 ㅂ 京都大学大学院情報学研究科数理工学専攻
⋆ 神戸大学理学部数学科 ○ 科学技術振興機構 SORST

概要

固有分解または特異値分解用ライブラリの計算精度の評価を行うためには，固有分解または特異値分解の真の値がわかっている行列が必要となる．与えられた行列を高精度な精度保証付き計算で固有分解または特異値分解し，その結果を真値として評価を行うという方法が考えられる．しかし，そのような方法ではライブラリの利用目的や特殊な状況を想定した実験をおこなうことができない．そこで，予め定められた固有値や固有ベクトルまたは特異値や特異ベクトルを解としてもつ行列を構成する方法も述べる．さらに，大次元の行列でテストを行う場合にも対応できるいくつかの特別な方法を紹介する．

Some Matrices for Evaluating the Performance of Numerical Libraries for Eigendecomposition and Singular Value Decomposition

Kinji Kimura *† Masami Takata ‡ Masashi Iwasaki ○ ㅂ Yoshimasa Nakamura ㅂ ○ Kazuhiro Yokoyama †
Masayuki Noro ⋆
* CREST, JST ‡ Graduate School of Humanity and Science, Nara Women's University
† Faculty of Science, Rikkyo University ㅂ Graduate School of Informatics, Kyoto University
⋆ Department of Mathematics, Kobe University ○ SORST, JST

Abstract

In order to evaluate the performance of numerical libraries computing eigendecomposition or singular value decomposition, we need to construct matrices of which we can compute accurate eigendecomposition or singular value decomposition. It is standard method that we compute eigendecomposition or singular value decomposition by using long precision, verify the accuracy, and compare approximate values with the accurate values. However, by using this method, we can not examine, considering purpose of use and special situation. Therefore, we introduce how to reconstruct the matrices from given solutions (eigen values/eigen vectors or singular values/singular vectors). Moreover, we introduce some special method which can be adapted to tests in larger dimension matrices.

1 はじめに

新しい数値計算ライブラリを開発した場合，その性能を評価することは重要である．しかし，性能評価の方法，そのために利用すべきデータは，それぞれの数値計算ライブラリの利用目的に依存する．固有分解と特異値分解用ライブラリの計算精度の議論をするには，固有値や固有ベクトルまたは特異値や特異ベクトルの真の値がわかっている行列を用いての実験が必要となる．本論文では，我々がこれまで利用してきた性能評価のための様々なテスト行列とその構成法をいくつか紹介する．

2 様々なテスト行列とその構成法

新しい数値計算ライブラリと既存のライブラリとの比較評価をする場合，個々のライブラリが真値とどのくらい違った値を計算するかを測定する必要がある．そのためには，あらかじめ固有値や固有ベクトルまたは特異値や特異ベクトルがわかっている行列が必要となる．

1つ目は，整数行列の固有分解と特異値分解を高精度に計算し，それらの値を精度保証する方法である．この方法では，double の数値計算プログラムを多倍長演算に直接的に変換するのみであるため，計算途中に

生じる誤差に対する安定性は double のプログラムと同様の傾向を示す．よって，不安定なアルゴリズムである場合必然的に長い有効桁を必要とする．

2 つ目は，数式処理的な方法を用いたテスト行列作成法である．この方法では，最終結果に影響を与えない部分までも高精度に計算するため，必然的に非効率な計算となる．そのため，作成方法にどのような工夫を施しても膨大な計算量は避けられない．しかし，重根や近接根といった特殊なテスト行列を作成することができるという特徴を持つ．

これら 2 つの方法では予め設定した値を固有値や固有ベクトルまたは特異値や特異ベクトルを持つ行列を作成するわけではないため，性能評価という観点では都合が悪い．

3 つ目の方法として，精度を保証することはできないが，予め設定した値を固有値や固有ベクトルまたは特異値や特異ベクトルに持つ行列の作成法を紹介する．密行列を構成する場合には，Jacobi 回転により少ない有効桁で与えられた任意の固有値や特異値をもつ行列を作成できる．しかし，3 重対角行列や 2 重対角行列の場合には Jacobi 回転を用いることはできない．そこで，Lanczos 法 [16, 6, 21] を利用して 3 重対角行列や 2 重対角行列を作成する．Lanczos 法では，最小固有値と最大固有値の絶対値の比が大きい行列を構成する場合には有効桁は必然的に長くせざるをえない．そのため，条件数の大きい行列を作成する場合，計算時間が長くなる．

これらの方法は，大次元のテスト行列を作成するという目的には適していない．

4 つ目として，三角関数などで真値が表される行列を紹介する．この方法は，固有値や固有ベクトルまたは特異値や特異ベクトルの真値を三角関数でかけるため，任意のサイズのテスト行列を作ることができる．しかし，極めて特殊な行列であるためその行列を入力とする実験データのみから結論を導き出すことはできない．

5 つ目では，整数の固有値、準上三角行列あるいは固有多項式を持つ非対称整数行列を作成する方法がある．この方法では，大次元であってもその構成の途中段階において計算誤差が発生しないため，誤差評価が容易である．さらに，構成そのものの計算量が小さいこともこの方法の利点である．しかし，固有ベクトルについては一般性を欠くこととなる．

6 つ目の方法では，Kronecker 積を活用する．Kronecker 積は極めて特殊な演算であるためこの演算によって生成される行列の性質も特殊である．しかし，Kronecker 積を用いることで最小固有値と最大固有値の絶対値の比が大きい整数の行列を容易に作ることができる．そこで，最小固有値と最大固有値の絶対値の比が大きい整数の行列を必要とする場合にのみ利用することを薦める．

第 2.1 節では，精度保証付き数値計算を利用する方法について述べる．第 2.2 節では，数式処理を利用して無誤差で固有多項式を計算する方法を説明する．第 2.3 節では，任意の固有値や特異値を与えることによって行列を構成する方法について説明する．第 2.4 節では，三角関数で真値が表されている行列を紹介する．第 2.5 節では，あらかじめ設定した整数の固有値、準上三角行列あるいは固有多項式を持つ非対称整数行列の作成法について述べる．第 2.6 節では，Kronecker 積を利用する方法について述べる．

2.1 精度保証付き数値計算を利用する方法

最初に，計算精度が double のプログラム P をすべて多倍長数演算に置き換えたプログラム Q を作成する．この置換は，Omni OpenMP Compiler Project(GMP)[11][4] や MPFUN/ARPREC[10] を適用することで，容易にできる．次に，Q に対し整数の行列 R を入力し，多倍長数で固有値や固有ベクトルまたは特異値や特異ベクトルの近似値を求める．この近似固有値や固有ベクトルまたは特異値や特異ベクトルに対して，多倍長数で精度保証付き数値計算をおこない精度を調べる．精度保証付き数値計算のための公式は多数存在する．詳しくは [15][20] を参照されたい．近似値の精度が 10 進で 16 桁をはるかに超えているならば，真値とみなす．

以上によって，精度保証付き数値計算を利用する方法では，固有値や固有ベクトルまたは特異値や特異ベクトルの真値がわかる任意の整数行列 R を得ることができる．

2.2 数式処理を利用して十分に高精度な値を計算する方法

数値計算ライブラリの性能を評価することを目的としているため，入力された行列が数値誤差を含まない状態にあることが好ましい．そこで，本節では，整数を要素とする行列についてのみ議論する．

2.2.1 計算法 I

最小多項式の次数が行列サイズに満たない場合にも利用できる算法を紹介する．

多変数多項式を要素とする行列 A の行列式を評価するために，多変数多項式の 1 ノルムを係数の絶対値の総和と定義すると

$$A = \begin{pmatrix} \|a_{1,1}\|_1 & \cdots & \|a_{1,n}\|_1 \\ \vdots & & \vdots \\ \|a_{n,1}\|_1 & \cdots & \|a_{n,n}\|_1 \end{pmatrix}$$

となり，

$$\begin{aligned} u_1 &= (\|a_{1,1}\|_1, \ldots, \|a_{1,n}\|_1), \\ &\vdots \end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
u_n &= (\|a_{n,1}\|_1, \ldots, \|a_{n,n}\|_1), \\
v_1 &= (\|a_{1,1}\|_1, \ldots, \|a_{n,1}\|_1), \\
&\vdots \\
v_n &= (\|a_{1,n}\|_1, \ldots, \|a_{n,n}\|_1),
\end{aligned}
$$

が得られる．この式に対して Hadamard 公式

$$
\begin{aligned}
&A\text{ の行列式の係数の絶対値} \le \\
&\min(\|u_1\|_2 \|u_2\|_2 \cdots \|u_{n-1}\|_2 \|u_n\|_2, \\
&\quad \|v_1\|_2 \|v_2\|_2 \cdots \|v_{n-1}\|_2 \|v_n\|_2) \equiv H_1.
\end{aligned}
$$

が成立する [5].

固有多項式の係数については

$$
\begin{pmatrix}
|a_{1,1}|+|1| & \cdots & |a_{1,n}| \\
\vdots & \ddots & \vdots \\
|a_{n,1}| & \cdots & |a_{n,n}|+|1|
\end{pmatrix}
$$

として先の公式を適用する．そのときの値を H_2 とする．H_2 は固有多項式の係数の絶対値の上界を与える．

有限体 $\mathbb{Z}/p\mathbb{Z}$ 上で"ガウスの消去法の拡張"をおこなうと，いかなる整数を要素とする行列も上 Hessenberg 行列に変形できる．さらに，上 Hessenberg 行列から有限体 $\mathbb{Z}/p\mathbb{Z}$ 上の固有多項式が計算できる．p_i を変化させて何度もガウスの消去法の拡張を繰り返す．中国剰余定理をもちいて固有多項式の係数を合成する．中国剰余定理の解の正規化条件が $\left[-\frac{\prod p_i-1}{2}, \frac{\prod p_i-1}{2}\right]$ であるため，$\frac{\prod p_i-1}{2}$ が H_2 以上になると固有多項式を計算できたことになる [1].

"ガウスの消去法の拡張"を利用して固有多項式を計算する代わりに Danilevsky 法を用いて有限体 $\mathbb{Z}/p\mathbb{Z}$ 上の固有多項式を計算することもできる [13].

2.2.2 計算法 II

最小多項式の次数が行列サイズに一致する場合のみに利用できる算法を紹介する．正確には，一致しない場合にもこの計算法を利用することができる．しかし，計算法 I と比較するとこの計算法のほうが非効率であるため利用すべきでない．

v を乱数ベクトルとして $A^k v$ を有限体 $\mathbb{Z}/p\mathbb{Z}$ ではなく整数で計算し

$$
\left(v \,\middle|\, Av \,\middle|\, \cdots \,\middle|\, A^{n-1}v \right)
\begin{pmatrix} c_0 \\ \vdots \\ c_{n-1} \end{pmatrix} = -A^n v
$$

を連立一次方程式の解法で解く．$c_{n-1}, \cdots, c_0$ は固有多項式の係数となる．

一般的な連立一次方程式の解法である Hensel 構成による方法 [3] を紹介する．この方法は，数値計算の連立一次方程式の反復改良法 (残差修正法) に対応する．

$$
x = x_0 + px_1 + p^2x_2 + \cdots
$$

p 進数で展開すると，

$$
A(x_0 + px_1 + p^2x_2 + \cdots) = v \mod p^{\alpha}.
$$

A を mod p で一度 LU 分解すれば

$$
\begin{aligned}
Ax_0 &= v \mod p \\
Ax_1 &= \frac{v - Ax_0}{p} \mod p \\
Ax_2 &= \frac{(v-Ax_0)/p - Ax_1}{p} \mod p \\
&\vdots
\end{aligned}
$$

は高速に解くことができる．さらに，p 進整数から有理数への変換法が存在する．

解があらかじめ整数であるとわかっているとき Hensel 構成の実装は工夫できる．整数から有理数に変換する必要がないのはあきらかであるが，数値計算の残差反復法のアナロジーであることからも明らかなように右辺の残差ベクトルが 0 になった時点で計算を終了してよい．x_j を $[-\frac{p-1}{2}, \frac{p-1}{2}]$ に規格化することにより残差が 0 になる j が存在することが保証されるのである．

2.2.3 1 変数代数方程式の実根を求める方法

非対称行列の固有値までも扱うには複素根までもとめる方法を考えなければならないが，複素根までもとめるアルゴリズムは数多く存在しどのような算法が高速であるかすべてを実装し確認することは困難である．対称行列の固有値や特異値の固有多項式は全根が実根であるが，非対称行列では実根と複素根が混在するためその扱いも本質的に異なると思われる．よって，ここでは議論を明確にするという目的と特異値分解法 I-SVD (Integrable-Singular Value Decomposition) [12, 18] の性能評価を主な目的とする立場から実根のみを求める方法についてのみ紹介する．代表的な計算法として，Strum の 方法 [17]，平野の方法 [16]，Uspensky の方法がある．計算量解析の結果より，整数を係数とする 1 変数の多項式の実根を求める場合，Uspensky の方法のほうが Strum の方法よりも優れている [2].

Uspensky の方法を以下で詳細に述べる．実係数をもつ多項式

$$
f(x) = a_0x^n + a_1x^{n-1} + \cdots + a_n
$$

の係数列 $a_0, a_1, \cdots, a_n$ の符号の変りの数 (0 になるものは飛ばして数える) を W とする場合，$f(x)$ の正根 (0 を入れない) の数は W またはそれよりも偶数だけ少なくなる．これを Descarte の符号律という．よって，W が 0 ならば根がないことが確定される．W が 1 ならば，1 根あることが確定する．W が 2 以上の場合，領域を分割してそれぞれの領域を調べればよい [2]. 具体的には，次の操作をおこなう．$x \to 1/(x+1)$ と変数変換すると，$1/(x+1)$ の $(0, \infty)$ の実根の数を

調べるということは，元の x の $(0,1)$ を調べることに相当する．また，$x \to x+1$ と変数変換すると $x+1$ の $(0,\infty)$ の実根の数を調べるということは，元の x の $(1,\infty)$ を調べることと同値である．しかし，この 2 つの操作だけでは $x=1$ の根を得ることができないため，$x \to x+1$ の後定数項が消えていないかを確認することも必要となる．これらの変数変換を分割された領域の実根の数が 0 または 1 になるまで繰り返す．この操作だけでは $x = 10^{10000000}$ のような根には対応できない．そこで，次の定理を用いて原点移動をおこなう．実係数の方程式

$$x^n + a_1 x^{n-1} + \cdots + a_n = 0$$

において，負の係数を $a_\alpha, a_\beta, a_\gamma, \cdots$ とすれば

$$G_4 = 2\max\left[(|a_\alpha|)^{1/\alpha}, (|a_\beta|)^{1/\beta}, (|a_\gamma|)^{1/\gamma}, \cdots\right]$$

が正根の限界である [9]．よって，$x \to 1/x$ により最小の正根を下から抑えられる．

2.3 与えられた固有値や特異値を持つ行列を構成する方法

$n \times n$ の乱数行列 X と対角行列 D を用意する．X に対して多倍長数でグラムシュミットの直交化法を適用することによって，直交行列 Y を得る．この Y を用いて，$B = YDY^T$ を多倍長数で計算し，double の行列 B' に変換することによって，あらかじめ固有値のわかっている対称行列が構成される．

固有値がわかっている非対称行列 C' を作成する場合，多倍長で $C = XDZ$ を計算し，double の行列に変換する．この際，Z は，X に対して多倍長数で計算した逆行列を表す．準上三角行列 S の固有値は高精度に計算することが容易であるため，D の代わりに S を用いて C を計算してもよい．

YDY^T や XDZ の内積計算は誤差を含みやすい．そこで，適当な Jacobi 回転行列を作成し D または S の左右からかける作業を非対角成分が大きくなるまで繰り返すことによって B や C を計算する方法も知られている．

特異値の場合も B' や C' を構成する方法を変形することで対応可能である．

B や C の精度保証をおこなっても，B' や C' へ変換する際に誤差が発生するため，この方法は数学的には厳密ではない．しかし，与えられた固有値や特異値を持つ密行列を構成する場合には便利な方法といえよう．

対称もしくは非対称の 3 重対角行列を作成する場合は，対角行列 D に対して，多倍長を利用した Lanczos 法 [21] もしくは双 Lanczos 法 [13] を用いる．与えられた特異値をもつ 2 重対角行列を構成するには，Golub-Kahan-Lanczos 法を用いる [6]．

2.4 三角関数などで真値を書くことのできる行列を利用する方法

三角関数等で厳密解が表される行列がある．[7] は，そのような行列が多数記載された優れた本である．

三角関数で表される行列として，n 次の 3 重対角行列 [22]

$$\begin{pmatrix} b & c & & & \\ a & b & c & & \\ & a & b & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & c \\ & & & a & b \end{pmatrix}$$

がある．この固有値 λ_j，固有ベクトル $x^{(j)}$ は次式で与えられる，

$$\begin{aligned} \lambda_j &= b + 2\sqrt{ac}\cos\frac{j\pi}{n+1}, \quad (1 \le j \le n), \\ x^{(j)} &= \left[\sin\frac{j\pi}{n+1}, \sqrt{\frac{a}{c}}\sin\frac{2j\pi}{n+1}, \right. \\ &\qquad \left. \cdots, \left(\sqrt{\frac{a}{c}}\right)^{n-1}\sin\frac{nj\pi}{n+1}\right]^T. \end{aligned}$$

Helmholtz 方程式や Poisson 方程式の 5 点差分行列の固有値問題は，適当な行列を左右からかけることによりこの形式の 3 重対角行列に変換できるため厳密解が三角関数で書き下せる [8]．

この形式の 3 重対角行列の逆行列は，密行列となる．その際，固有値と固有ベクトルは $1/\lambda_j$ と $x^{(j)}$ でそれぞれ与えられる．たとえば，3 重対角行列 A が

$$A = \begin{pmatrix} 2 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & -1 & 2 & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & -1 \\ & & & -1 & 2 \end{pmatrix},$$

と与えられた場合，逆行列 A^{-1} は

$$(n+1)A^{-1} = \begin{pmatrix} n & n-1 & \cdots & 2 & 1 \\ n-1 & 2(n-1) & \cdots & 4 & 2 \\ n-2 & 2(n-2) & \cdots & 6 & 3 \\ n-3 & 2(n-3) & \cdots & 8 & 4 \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots \\ 2 & 4 & \cdots & 2(n-1) & n-1 \\ 1 & 2 & \cdots & n-1 & n \end{pmatrix}.$$

と表される．この際，固有値は $1/(4\sin^2(j\pi/2(n+1)))$ となる．

三角関数で表される別の 3 重対角行列として

$$\tilde{A}_n = \begin{pmatrix} 1 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & -1 & 2 & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & -1 \\ & & & -1 & 2 \end{pmatrix},$$

$$\tilde{A}_n^{-1} = \begin{pmatrix} n & n-1 & \cdots & 2 & 1 \\ n-1 & n-1 & \cdots & 2 & 1 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 2 & 2 & \cdots & 2 & 1 \\ 1 & 1 & \cdots & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

がある [21]．$\tilde{A}_n$ の固有値 λ_j，固有ベクトル $x^{(j)}$ は次式で与えられる，

$$\begin{aligned} \lambda_j &= 4\sin^2\left(\frac{2j-1}{2(2n+1)}\pi\right), \quad (1 \le j \le n), \\ x^{(j)} &= \left[\sin\left(\frac{n(2j-1)}{2n+1}\pi\right), \sin\left(\frac{(n-1)(2j-1)}{2n+1}\pi\right),\right. \\ &\qquad \left.\cdots, \sin\left(\frac{2j-1}{2n+1}\pi\right)\right]^{\mathrm{T}}. \end{aligned} \tag{1}$$

$\tilde{A}_n$ をコレスキー分解することによって，三角関数で特異値分解の真値を書くことができる 2 重対角行列を作成することができる．

$$\tilde{A}_n = \tilde{L}\tilde{L}^{\mathrm{T}}$$

$$\tilde{L} = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ -1 & 1 & & & \\ & -1 & 1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & -1 & 1 \end{pmatrix},$$

より $\tilde{L}^{\mathrm{T}}$ の特異値は

$$\sigma_j = 2\sin\left(\frac{2j-1}{2(2n+1)}\pi\right), \quad (1 \le j \le n).$$

となり，右特異ベクトル $x^{(j)}$ は，式 (1) で与えられる．

この 2 重対角行列の逆行列を用いることで，特異値と特異ベクトルの真値がわかっている密行列を作成することができる．$\tilde{L}^{\mathrm{T}}$ の逆行列は

$$\tilde{L}^{-\mathrm{T}} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ & & 1 & \cdots & \vdots \\ & & & \ddots & 1 \\ & & & & 1 \end{pmatrix}$$

となる．$\tilde{L}^{-\mathrm{T}}$ の特異値は

$$\sigma_j = \frac{1}{2\sin\left(\frac{2j-1}{2(2n+1)}\pi\right)}, \quad (1 \le j \le n),$$

となり，左特異ベクトル $x^{(j)}$ は，式 (1) で与えられる．さらに，

$$\tilde{L}^{-1}\tilde{L}^{-\mathrm{T}} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 & 1 \\ 1 & 2 & \cdots & 2 & 2 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 1 & 2 & \cdots & n-1 & n-1 \\ 1 & 2 & \cdots & n-1 & n \end{pmatrix}$$

に対して

$$P = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 \\ 0 & 0 & \cdots & 1 & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & 1 & \cdots & 0 & 0 \\ 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

を用いると

$$P\tilde{A}^{-1}P = \tilde{L}^{-1}\tilde{L}^{-\mathrm{T}}$$

となる．$x = Py$ とし，$P^2 = I$ であることに注意すると

$$\begin{aligned} \tilde{A}^{-1}x &= \lambda x \\ \tilde{A}^{-1}Py &= \lambda Py \\ P\tilde{A}^{-1}Py &= \lambda y \end{aligned}$$

となる．よって，$y = Px$ が $\tilde{L}^{-\mathrm{T}}$ の右特異ベクトルとなる．

2.5 あらかじめ設定した整数の固有値、準上三角行列あるいは固有多項式を持つ非対称整数行列の作成法

1 変数代数方程式

$$f(x) = x^n + a_{n-1}x^{n-1} + \cdots + a_0$$

の根を固有値とするコンパニオン行列 C_n は

$$C_n = \begin{pmatrix} 0 & \cdots & \cdots & 0 & -a_0 \\ 1 & \ddots & \ddots & 0 & -a_1 \\ 0 & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & 0 & -a_{n-2} \\ 0 & \cdots & & 1 & -a_{n-1} \end{pmatrix}$$

である．

よって，$\tilde{A}_n C_n (\tilde{A}_n)^{-1}$ などにより与えられた整数を係数とする固有多項式の根を固有値とする整数の非対称行列を構成することができる．あらかじめ根のよくわかっている多項式を利用するとよい．整数を要素とする対角行列 D もしくは準上三角行列 S に対して $\tilde{A}_n D(\tilde{A}_n)^{-1}$ または $\tilde{A}_n S(\tilde{A}_n)^{-1}$ などにより整数の非対称行列を構成することも可能である．

2.6 Kronecker 積を利用する方法

m 次正方行列 A と n 次正方行列 B の Kronecker 積 $A \otimes B$ は mn 次正方行列であるが，A の固有値を $\lambda_1, ..., \lambda_m$，$B$ の固有値を $\mu_1, ..., \mu_n$ とすると $A \otimes B$ の固有値は $\lambda_i \mu_j (i = 1, ..., m : j = 1, ..., n)$ である．さらに，m 次正方行列 A の固有ベクトルを $v_1, ..., v_m$ として n 次正方行列 B の任意の固有ベクトルを $w_1, ..., w_n$

とすれば Kronecker 積 $A \otimes B$ の固有ベクトルは $v_i \otimes w_j (i = 1, ..., m : j = 1, ..., n)$ である．すなわち

$$(A \otimes B) \times (v_i \otimes w_j) = (A \times v_i) \otimes (B \times w_j) \\ = (\lambda_i v_i) \otimes (\mu_j w_j) = (\lambda_i \mu_j)(v_i \otimes w_j)$$

ここで，$\times$ は通常使う行列とベクトルの積である．$(A \times v_i) \otimes (B \times w_j) = (\lambda_i v_i) \otimes (\mu_j w_j)$ を示すことは容易でないので，[14] を参照されたい．また，$A \otimes B$ の逆行列は，$A^{-1} \otimes B^{-1}$ である．

対称行列と対称行列の Kronecker 積は対称行列となる．さらに，上記の Kronecker 積の性質を考慮すると最小固有値と最大固有値の絶対値の比が大きい行列の生成が可能であることは明らかである．しかし，最終的に生成される行列の固有値の精度を 10 進 16 桁以上にするために最小構成単位となる行列の固有値の計算精度をあらかじめ見積もることは難しい．最小構成単位となる行列の固有値や固有ベクトルを適当な精度の区間数を用いて表現し，それ以降では Kronecker 積と同時にその固有値や固有ベクトルを区間数で計算する．しかし，区間膨張は避けられないため最小構成単位の行列の固有値や固有ベクトルは高精度に計算する必要がある．

3 まとめ

数値計算ライブラリの性能を評価するためにあらかじめ真値のわかっている行列を構成する方法を網羅的に述べた．それぞれの方法には一長一短があり一種類のみを用いて実験を行うことは客観的考察とはいえない．よって，必然的に多種の行列と構成法が必要となる．それぞれのライブラリの利用状況や目的に応じて本論文で紹介した方法の中から複数を選択することにより実験の妥当性が十分に保証できると期待する．特に，特異値分解計算ライブラリの評価に対応した行列とその構成法を記載したことによりさらなる特異値分解の計算法の進展が期待される．

参考文献

[1] H.Cohen, A Course in Computational Algebraic Number Theory. Graduate texts in mathematics, **138**, Springer-Verlag, 1995.

[2] G.E.Collins and Alkiviadis G.Akritas, Polynomial Real Root Isolation Using Decarte's Rule of Signs, Proceedings of the 1976 ACM Symposium on Symbolic and Algebraic Computation

[3] K.O.Geddes, Stephen R.Czapor, George Labahn, Keith O.Geddes, S. R.Czapor, G.Labahn, Algorithms for Computer Algebra, Kluwer Academic Pub., United States, (1992).

[4] GNU Multiple Precision Arithmetic Library, http://www.swox.com/gmp

[5] A.J. Goldstein, R.L. Graham, A Hadamard-type bound on the coefficient of a determinant of polynomials, SIAM Review 16,394-395,(1974).

[6] G. Golub, W. Kahan, Calculating the singular values and pseude-inverse of a matrix, SIAM J. Numeri. Anal., Vol. 2, pp.205-224, (1965).

[7] R.T. Gregor and D.L. Karney, Collection of Matrices for Testing Computational Algorithms Interscience. (1969)

[8] E. Ishiwata, Y. Muroya, K. Isogai, Adaptive improved block SOR method with orderings, J.JIAM, vol.16, No.3, pp.443-466 (1999).

[9] J.R.Johnson, Algorithms for Polynomial Real Root Isolation, Quantifier Elimination and Cylindrical Algebraic Decomposition, Springer-WienNewYork, Austria, (1998).

[10] Multiprecision Software Directory, htpp://crd.lbl.gov/ dhbailey/mpdist/.

[11] Omni OpenMP Compiler Project, http://phase.hpcc.jp/Omini.

[12] M. Takata, K. Kimura, M. Iwasaki and Y. Nakamura, Performance of a New Singular Value Decomposition Scheme for Large Scale matrices, In Proceedings of The IASTED International Conference on Parallel and Distributed Computing and Networks (PDCN2006), pp.304-309(2006).

[13] 有本卓, 数值解析 (I), コロナ社, 東京, 1997.

[14] 伊理正夫, 一般線形代数, 岩波書店, 東京, 2003.

[15] 大石進一, 非線形解析入門, コロナ社, 東京,2000.

[16] 齋藤友克, 竹島卓, 平野照比古, グレブナー基底の計算 実践篇, 東京大学出版会, 東京, 2003.

[17] 髙木貞治, 代数学講義 (改訂新版), 共立出版, 東京, 1965.

[18] 髙田雅美, 木村欣司, 岩﨑雅史, 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 (ACS14), 採録決定

[19] 野呂正行, 横山和弘, グレブナー基底の計算 基礎篇, 東京大学出版会, 東京, 2003.

[20] 宮島信也, 荻田武史, 大石進一, 実対称行列の各固有値に対する精度保証付き数値計算法, 日本応用数理学会論文誌, **15(3)**, pp. 253-268, (2005).

[21] 森正武, 数値解析第 2 版, 共立出版株式会社, 東京, 2002.

[22] 山本哲朗, 数値解析入門 [増訂版], サイエンス社, 東京, 2003.