

特異値分解アルゴリズムの性能評価のための 大きな条件数を持つ行列作成

高田 雅美^{1,a)} 木村 欣司^{2,b)} 中村 佳正^{2,c)}

受付日 2012年7月14日, 再受付日 2012年11月13日,
採録日 2013年4月16日

概要: 本稿では, 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種類の定義によるものである. 1つ目は, 連立1次方程式を解く際の困難さの指標として知られる最大特異値と最小特異値の比による定義である. 2つ目は, 特異値分解の数値計算の困難さを表す特異値の近接度による条件数の定義である. 1つ目の条件数の大きなテスト行列の作成法では, 行列のべき乗を利用するもので, 密行列を作成することが可能である. 一方, 2つ目の作成法では, 近接固有値を持つ glued Wilkinson 行列の特異値版ともいえるもので, 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. これらの作成法によって作成されるテスト行列を用いて, LAPACK 3.4.2 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.

キーワード: テスト行列, 特異値分解, 条件数, LAPACK 3.4.2

Generating Matrices Having Large Condition Numbers for Performance Evaluation of Singular Value Decomposition Algorithms

MASAMI TAKATA^{1,a)} KINJI KIMURA^{2,b)} YOSHIMASA NAKAMURA^{2,c)}

Received: July 14, 2012, Revised: November 13, 2012,
Accepted: April 16, 2013

Abstract: In this paper, we propose new generating algorithms for matrices with large condition number to evaluate singular value decomposition. We target two types of definitions of condition numbers. The first is a ratio of the maximal and minimal singular values and means the intractableness to solve simultaneous linear equation. The second definition uses adjacent amount in each singular value and indicates the difficulty of numerical singular value decomposition. The first algorithm, which is calculated to a power, can generate dense test matrices. On the other hand, the second algorithm can generate only a bidiagonal test matrix which is an extension of the glued Wilkinson matrix having very closed eigenvalues. Since targets in the proposed algorithms are different, it is important to generate test matrices in two types of condition numbers. By using resulting test matrices which are generated by the proposed algorithms, some singular value decomposition routines in LAPACK version 3.4.2 are evaluated.

Keywords: test matrix, singular value decomposition, condition number, LAPACK version 3.4.2

1. はじめに

LAPACK (Linear Algebra PACKage) [17] には, 様々な特異値分解のための数値計算ルーチンが公開されている. LAPACK のルーチンを利用していることを謳っている汎用ソフトウェアも多い. 特異値分解を必要とする実問題を数値的に解く前に, これらのルーチンの基本性能や実問題

¹ 奈良女子大学
Nara Women's University, Nara 630-8506, Japan
² 京都大学
Kyoto University, Kyoto 606-8501, Japan
a) takata@ics.nara-wu.ac.jp
b) kkimur@amp.i.kyoto-u.ac.jp
c) ynaka@i.kyoto-u.ac.jp

で用いられている行列の特徴との適合性を把握しておく必要がある。また、特異値分解のための新しい数値計算アルゴリズムとその実装ルーチン [16], [21] を開発した際にも、まずは、LAPACK のルーチンとの性能比較をすべきである。そこで、まず、LAPACK のルーチンの正確な性能を知る必要がある。

数値計算ルーチンを評価するためには、計算時間と精度を知る必要がある。計算時間は、ランダム行列を用いることによって、比較することができる。一方、特異値分解の精度では、数値計算ルーチンによって計算された特異ベクトルの直交性と特異値分解された行列と元の行列の差のフロベニウスノルムが議論されることが多い。しかしながら、計算された特異ベクトルの直交性と特異値分解の分解の精度のみでは、計算された特異ベクトルの各要素と正確な特異ベクトルの各要素の違いまでは判定することはできない。同様に、計算された特異値と正確な特異値の比較も困難である。つまり、特異値分解ルーチンによって計算された特異ベクトルの各要素が正確な特異ベクトルの各要素と異なる場合でも、直交性が高ければ、あるいは、分解の精度が高ければ、そのルーチンの性能は高いという評価になる可能性がある。ゆえに、特異値分解において、正確な特異値と特異ベクトルが分かっているテスト行列を用いて、数値計算ルーチンを評価することが重要となる。

一般的なテスト行列の作成方法として、次の 2 種類の方法が考えられる。1 つ目は、倍精度のコードを多倍長のコードに改良して特異値分解をする方法である。この方法では、計算された特異値と特異ベクトルの桁数が増加するため、倍精度のコードで計算した場合よりも正確な値に近い値を得ることができる。ただし、あくまで計算された特異値および特異ベクトルであるため、正確な値とは異なることに注意が必要である。2 つ目は、三角関数などで正確な特異値と特異ベクトルを表現することができる行列である [12], [24]。この方法では、任意の次数の行列を高速に作成することができる。

本稿では、新たに、条件数の大きなテスト行列を作成するための方法を 2 つ提案する。条件数には、2 つの種類がある。1 つ目の条件数は、最大特異値を最小特異値で割ることによって与えられる。2 つ目では、各特異値の隣接度合いを用いる。提案する作成方法では、これら 2 種類の条件数にそれぞれ対応するテスト行列を作成することができる。しかし、各特異値の隣接度合いが高い行列において、正確な特異値および特異ベクトルを得ることのできる行列の作成には、現在のところ成功していない。そこで、本稿では、各特異値の隣接度合いが高いことが経験的に分かっている行列を提案することとする。

これらの提案方法によって作成されたテスト行列を用いて、数値計算ライブラリとして有名な LAPACK 3.4.2 に含まれるいくつかの特異値分解ルーチンを評価する。

2 章において、特異値分解について紹介する。3 章において、条件数の大きなテスト行列の作成法について説明する。4 章において、連立 1 次方程式を解く困難さが大きなテスト行列を作成する際に必要となる正確な特異値と特異ベクトルが判明している行列の例を示す。5 章において、LAPACK 3.4.2 の特異値分解ルーチンに対して性能評価を行う。

2. 特異値分解

2.1 節において、特異値分解の概要を説明する。2.2 節において、特異値分解のためのアルゴリズムで用いられる指標について述べる。2.3 節において、数学的な準備として、固有値と特異値の関係を説明する。

2.1 概要

特異値分解は、長方形行列の特徴を得るための有効な手段として知られている。

特異値分解のための方法として、ヤコビ法 [5], [6], [22] がある。一般的に、ヤコビ法を用いた特異値分解の計算時間は、長い。しかしながら、得られる直交性は、良好である。

計算時間を減少させるために、 $l \times m$ 次行列 A に対して、ハウスホルダ変換 [2], [10] を適用することによって、上 2 重対角行列 B に変換する方法がある。ここで、変数 l と m は、正の整数で、 $l \geq m$ を満たすものとする。ハウスホルダ変換を用いて生成された行列 B の特異値は、行列 A の特異値と一致する。行列 B は、上 2 重対角行列を対象とする適切な特異値分解アルゴリズムを適用することによって、 $B = U\Sigma V^T$ に分解することができる。つまり、ハウスホルダ変換と行列 B のための特異値分解を組み合わせることによって、行列 A の特異値分解を得ることが可能となる。ここで、 Σ は行列 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 σ_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 σ_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 [2], [3], [8], [10], [11], 分割統治法 [1], [13], 拡大行列を用いた 2 分法と逆反復法による解法、拡大行列を用いた MR³ 法 [4], [7], [20] などがあげられる。我々が提案している I-SVD (Integrable-Singular Value Decomposition) [15], [16], [21] 法も有効である。

2.2 性能評価のための指標

一般的に、特異値分解の精度を比較するために、直交性が用いられる。特異ベクトルの直交性は、フロベニウスノルムを用いて次の式で表される。

$$\|U^T U - I\|_F, \quad (1)$$

$$\|UU^T - I\|_F, \tag{2}$$

$$\|V^T V - I\|_F, \tag{3}$$

$$\|VV^T - I\|_F. \tag{4}$$

ここで、行列 I は、単位行列を意味する。また、直交性以外の指標として、

$$\|A - U\Sigma V^T\|_F \tag{5}$$

が用いられることもある。ただし、これらの指標だけでは、与えられた行列の正確な値と比較することはできない。

そこで、与えられた行列の正確な特異値 σ_i とある特異値分解ルーチンによって計算された特異値 $\hat{\sigma}_i$ の誤差を比較するために、我々は、以下の式を用いる。

$$\sum_i^m \frac{|\hat{\sigma}_i - \sigma_i|}{m|\sigma_i|}. \tag{6}$$

本稿では、特異値分解の条件数として、2つの条件数を用いる。

条件数 (a) は、連立1次方程式を解く際の困難さの指標として広く知られているもので、以下のように定義される [24].

$$\frac{\sigma_{\max}}{\sigma_{\min}}. \tag{7}$$

ここで、 σ_{\max} と σ_{\min} は、それぞれ、最大特異値と最小特異値を表す。

条件数 (b) は、特異ベクトル計算の困難さの指標として導入されたもので、以下のように特異値どうしの相対的な近接度を用いる [23].

$$\max_i \frac{\sigma_i}{\min_{j \neq i} |\sigma_i - \sigma_j|}, 1 \leq i, j \leq m. \tag{8}$$

条件数 (b) が大きい場合、いくつかの特異値が非常に近接していることを意味する。

2.3 固有値と特異値の関係

逆行列を持つ $m \times m$ の正方行列 \tilde{A} が対称行列の場合、

$$|\tilde{\lambda}_i| = \tilde{\sigma}_i \tag{9}$$

となるため、

$$\frac{\max_i |\tilde{\lambda}_i|}{\min_j |\tilde{\lambda}_j|} = \frac{\tilde{\sigma}_{\max}}{\tilde{\sigma}_{\min}} \tag{10}$$

を得ることができる。ここで、 $\tilde{\lambda}_i$ と $\tilde{\sigma}_i$ は、それぞれ、行列 \tilde{A} の固有値と特異値を表す。式 (10) の右辺は、条件数 (a) を意味する。

3. 大きな条件数を持つテスト行列の作成方法

3.1 節と 3.2 節において、大きな条件数を持つテスト行列を作成するための方法について提案する。3.1 節では条件数 (a) を、3.2 節では条件数 (b) を対象とする。

3.1 連立1次方程式を解く困難さが大きいテスト行列の作成方法

任意の正方行列 \tilde{A} の特異値は、 $m \times m$ 正方行列 X

$$X = \tilde{A}^T \tilde{A} \tag{11}$$

の固有値の平方根に一致する。次に、正方行列 $Y = \tilde{A} \tilde{A}^T \tilde{A}$ の特異値は、

$$\begin{aligned} Y^T Y &= (\tilde{A}^T \tilde{A} \tilde{A}^T) \tilde{A} \tilde{A}^T \tilde{A} \\ &= X \tilde{A}^T \tilde{A} X \\ &= X^3. \end{aligned} \tag{12}$$

となるため、 $Y^T Y$ の固有値の平方根として計算できる。

つまり、行列 X の固有値が $\tilde{\lambda}_i$ ならば、行列 $Y^T Y$ の固有値は $\tilde{\lambda}_i^3$ となる。また、行列 \tilde{A} の特異値 $\tilde{\sigma}_i$ は、 $\tilde{\sigma}_i = \sqrt{\tilde{\lambda}_i}$ を満たす。ゆえに、行列 Y の特異値は、 $\tilde{\sigma}_i^3$ となる。

行列 \tilde{A} の条件数 (a) は、 $\tilde{\sigma}_{\max}/\tilde{\sigma}_{\min}$ である。よって、行列 Y の条件数 (a) は、 $(\tilde{\sigma}_{\max}/\tilde{\sigma}_{\min})^3$ となる。ここで、 $\tilde{\sigma}_{\max}/\tilde{\sigma}_{\min} \geq 1$ が成り立つため、行列 Y の条件数 (a) は、行列 \tilde{A} の条件数 (a) よりも大きくなる。

以上の式を一般的な形で表すと、 $m \times m$ 正方行列 Z_h に対して、

$$Z_{2d+1} = \tilde{A} (\tilde{A}^T \tilde{A})^d, \tag{13}$$

$$Z_{2d} = (\tilde{A}^T \tilde{A})^d, \tag{14}$$

となる。ここで、 h と d は、0以上の整数である。この際、行列 Z_h の条件数 (a) は、行列 \tilde{A} の条件数 (a) の h 乗で増える。

正確な特異値と特異ベクトルが明らかな行列 \tilde{A} が与えられれば、式 (13) と式 (14) を用いることによって、行列 Z_h の特異値と特異ベクトルを計算することができる。この際、丸め誤差を生じさせないために、式 (45) の $(\tilde{A}^{(1)})^{-1}$ は例外として、一般に \tilde{A} の全要素は整数で表されるものを用いる。この整数演算での桁あふれを防ぐために、多倍長整数を用いる。ただし、最終的に作成された行列の全要素は、4.1 節の誤差を含まないで表現可能な有理数の十分条件を満たさなければならない。式 (13) と式 (14) は、行列乗算を用いて計算される。以上より、大きな条件数 (a) を持つテスト行列 Z_h を作成することが可能となる。

3.2 各特異値の近接度が高いテスト行列の作成方法

2重対角行列の特異値は相異なる非負実数であり、対応する特異ベクトルは互いに直交していなければならない。しかしながら、ある2重対角行列の条件数 (b) が大きい、すなわち特異値のいくつかが非常に近接している場合やクラスタをなしている場合、逆反復法やI-SVD法では、直交性の高い特異ベクトルを得るために、単純な逆反復やツイスト分解の操作に加えて、修正グラムシュミット法などに

3重対角行列の逆行列よりも、特異値分解のためのテスト行列として適切である。ただし、上2重対角行列の逆行列は、上三角行列となる。そのため、3.1節の方法を用いて密行列にする必要がある。

4.1節では、誤差を含まないで表現可能な有理数の十分条件を説明する。4.2節では、正確な固有値と固有ベクトルを三角関数で表すことができる3重対角行列を示す。4.3節では、4.2節で示した行列の逆行列を示す。4.4節では、4.3節で示した3重対角行列から2重対角行列を求める方法を説明する。

4.1 誤差を含まないで表現可能な有理数の十分条件

3.1節の方法では、行列の積が必要となる。全要素が整数で表されている行列の積は、誤差を含まないで計算できる。しかしながら、有理数で表されている場合、誤差を含まないで計算するためには、IEEE754IEEE Standard for Floating-Point Arithmetic (ANSI/IEEE Std 754-2008) [14]の数の表現を意識する必要がある。

IEEE754IEEE Standard for Floating-Point Arithmetic (ANSI/IEEE Std 754-2008)において、倍精度の正規化数は、

$$\pm(1.s_1s_2\cdots s_{52})_{(2)} \times 2^{t-1023},$$

$$s_k \in \{0, 1\}, 1 \leq k \leq 52, 1 \leq t \leq 2046 \quad (19)$$

と表される。ここで、 s_k を仮数、 t を指数と呼ぶ。そのため、丸め誤差を生じずに表される有理数は、

$$\pm(1.s_1s_2\cdots s_{52})_{(2)} \times 2^{t-1023} = \frac{\pm(1.s_1s_2\cdots s_{52})_{(2)}}{2^{1023-t}} \quad (20)$$

を満たさなければならない。仮に、すべての s_k が $s_k = 0$ ならば、分子は1とする。このとき、分母は 2^{1023-t} を満たす場合には、誤差を含まないで表すことができる。次に、

$$\frac{\pm(1.s_1s_2\cdots s_{52})_{(2)}}{2^{1023-t}} = \frac{\pm(1.s_1s_2\cdots s_{52})_{(2)} \times 2}{2^{1024-t}}$$

$$= \frac{\pm(1s_1s_2\cdots s_{52})_{(2)}}{2^{1024-t}} \quad (21)$$

とする場合、 $s_{k(k \neq 1)} = 0$ ならば、分子は2と3を表すことができる。このとき、分母は 2^{1024-t} を満たす場合には、誤差を含まないで表すことができる。さらに、分子を整数化するために、

$$\frac{\pm(1.s_1s_2\cdots s_{52})_{(2)}}{2^{1023-t}} = \frac{\pm(1.s_1s_2\cdots s_{52})_{(2)} \times 2^{52}}{2^{1075-t}}$$

$$= \frac{\pm(1s_1s_2\cdots s_{52})_{(2)}}{2^{1075-t}} \quad (22)$$

と変換する。このとき、分母は 2^{1075-t} を満たす場合には、誤差を含まないで表すことができる。つまり、分子は1から $2^{53} - 1$ までの整数で表され、分母が 2^{-971} から 2^{1022}

を満たす場合、誤差を含まないで表すことができる。ここで、分母の範囲は、式(20)–(22)から考察される共通範囲である。なお、0は誤差を含まないで表現できる。

ゆえに、誤差を含まずに行列乗算を行うための十分条件は、入力行列および計算結果として得られる行列の両方について、行列の全要素の分子が $-(2^{53} - 1)$ から $2^{53} - 1$ までの整数で表され、分母が 2^{-971} から 2^{1022} を満たす有理数の場合である。ここで、すべての行列要素が整数の場合、 -2^{53} から 2^{53} の範囲を満たすならば、上記の十分条件を満たす。

4.2 三角関数の固有値と固有ベクトルを持つ3重対角行列

正確な固有値と固有ベクトルを三角関数で表現することができる行列が知られている [12], [24].

ある行列 \bar{A} を次のように定義する。

$$\bar{A} = \begin{pmatrix} \alpha\sqrt{a}\sqrt{c} + b & c & & & \\ & a & b & c & \\ & & a & \ddots & \ddots \\ & & & \ddots & \ddots & c \\ & & & & a & b \end{pmatrix}. \quad (23)$$

この行列 \bar{A} の固有値 $\bar{\lambda}_i$ および固有ベクトル \bar{x}_i は、

- $\alpha = 0$ の場合

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

- $\alpha = 1$ の場合

$$\begin{cases} \bar{\lambda}_i = b + 2\sqrt{a}\sqrt{c} \cos \left(\frac{2i-1}{2m+1}\pi\right), \\ \{\bar{x}_i\}_j = \left(\frac{\sqrt{a}}{\sqrt{c}}\right)^{j-1} \cos \left(\frac{(2j-1)(2i-1)}{2(2m+1)}\pi\right), \end{cases} \quad (25)$$

- $\alpha = -1$ の場合

$$\begin{cases} \bar{\lambda}_i = b - 2\sqrt{a}\sqrt{c} \cos \left(\frac{2i-1}{2m+1}\pi\right), \\ \{\bar{x}_i\}_j = \left(-\frac{\sqrt{a}}{\sqrt{c}}\right)^{j-1} \cos \left(\frac{(2j-1)(2i-1)}{2(2m+1)}\pi\right), \end{cases} \quad (26)$$

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

以下に証明を記載する。

$$d_j = \left(\sqrt{\frac{a}{c}}\right)^{j-1} \quad (27)$$

$$D = \begin{pmatrix} d_1 & & & \\ & \ddots & & \\ & & \ddots & \\ & & & d_m \end{pmatrix}, \quad (28)$$

$$T = \begin{pmatrix} \alpha & 1 & & & \\ 1 & 0 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & 1 \\ & & & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (29)$$

とすると,

$$D^{-1}AD = bI + \sqrt{ac}T \quad (30)$$

となる.

$\alpha = 0$ のときの証明は, 文献 [24] に記載されている.

$\alpha = 1$ のとき, $T_1 = T|_{\alpha=1}$ の固有ベクトル \bar{x} を $\bar{x} = [y^{(0)}, \dots, y^{(m-2)}, y^{(m-1)}]^T$ とおくと,

$$y^{(0)} + y^{(1)} = 2 \cos(\theta)y^{(0)} \quad (31)$$

$$y^{(0)} + y^{(2)} = 2 \cos(\theta)y^{(1)} \quad (32)$$

$$\dots \quad (33)$$

$$y^{(m-3)} + y^{(m-1)} = 2 \cos(\theta)y^{(m-2)} \quad (34)$$

$$y^{(m-2)} = 2 \cos(\theta)y^{(m-1)} \quad (35)$$

となる.

$$y^{(j)} = \cos\left(\left(j + \frac{1}{2}\right)\theta\right) \quad (36)$$

とおくと, 3 倍角の公式, 2 倍角の公式, 加法定理を用いて, 式 (31)-(34) が満たされることを確認できる. 式 (35) を満たすためには, θ について

$$\cos\left(\left(m + \frac{1}{2}\right)\theta\right) = 0 \quad (37)$$

という条件が成り立つ必要がある.

$$\theta = \frac{2i-1}{2m+1}\pi, \quad i = 1, 2, \dots, m \quad (38)$$

のとき, 上記の条件が満たされる. 式 (38) は, m 個の異なる固有値を表現できている. ゆえに,

$$y^{(j)} = \cos\left(\left(j + \frac{1}{2}\right)\theta\right) \quad (39)$$

は, 一般性を失わない仮定である.

$\alpha = -1$ のとき, $T_2 = T|_{\alpha=-1}$ とする.

$$F = \begin{pmatrix} f_1 & & & \\ & \ddots & & \\ & & & f_m \end{pmatrix}, \quad f_j = (-1)^{j-1} \quad (40)$$

とすると, $F^{-1} = F$, $T_2 = -F^{-1}T_1F$ である. $\bar{x} = Fz$ とすると,

$$T_1\bar{x} = 2 \cos(\theta)\bar{x}$$

$$T_1Fz = 2 \cos(\theta)Fz$$

$$F^{-1}T_1Fz = 2 \cos(\theta)z$$

$$-F^{-1}T_1Fz = (-2 \cos(\theta))z$$

$$T_2z = (-2 \cos(\theta))z \quad (41)$$

より, T_2 の固有値は,

$$-2 \cos\left(\frac{2i-1}{2m+1}\pi\right) \quad (42)$$

となり, T_2 の固有ベクトル z は, $z = F\bar{x}$ となる.

4.3 3重対角行列の逆行列

本節では, 正確な固有値と固有ベクトルを三角関数で表される 3 重対角行列の逆行列を紹介する.

式 (23) の各変数が, $\alpha = 0$, $a = c = -1$, $b = 2$ の場合, 正確な固有値と固有ベクトルを三角関数で表現できる 3 重対角行列 $\bar{A}^{(1)}$

$$\bar{A}^{(1)} = \begin{pmatrix} 2 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & -1 & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & -1 \\ & & & -1 & 2 \end{pmatrix}, \quad (43)$$

の固有値 $\bar{\lambda}_i^{(1)}$ と固有ベクトル $\bar{x}_i^{(1)}$ は, 以下の式で表される.

$$\begin{cases} \bar{\lambda}_i^{(1)} = 2 - 2 \cos \frac{i\pi}{m+1}, \\ \{\bar{x}_i^{(1)}\}_j = \sin \frac{j i \pi}{m+1}. \end{cases} \quad (44)$$

この行列 $\bar{A}^{(1)}$ の逆行列 $(\bar{A}^{(1)})^{-1}$ は,

$$(m+1) \left(\bar{A}^{(1)}\right)^{-1} = \begin{pmatrix} m & m-1 & \dots & 2 & 1 \\ m-1 & 2(m-1) & \dots & 4 & 2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 2 & 4 & \dots & 2(m-1) & m-1 \\ 1 & 2 & \dots & m-1 & m \end{pmatrix}, \quad (45)$$

である. この行列は, 有理数を含むため, 3.1 節の \bar{A} として利用できないように思えるが, 右辺の行列と $(m+1)$ を分けて計算し, 最後に各要素が 4.1 節で説明した十分条件を満たすかどうか判定することで, 3.1 節の \bar{A} として利用できる. 逆行列 $(\bar{A}^{(1)})^{-1}$ の固有値は, 行列 $\bar{A}^{(1)}$ の固有値の逆数で表されるため, $1/\bar{\lambda}_i^{(1)}$ となる.

次に, 式 (23) の各変数が, $\alpha = 1$, $a = c = -1$, $b = 2$ の場合, 正確な固有値と固有ベクトルを三角関数で表現できる 3 重対角行列 $\bar{A}^{(2)}$

$$\bar{A}^{(2)} = \begin{pmatrix} 1 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & -1 & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & -1 \\ & & & -1 & 2 \end{pmatrix}, \quad (46)$$

の固有値 $\bar{\lambda}_i^{(2)}$ と固有ベクトル $\bar{\mathbf{x}}_i^{(2)}$ は、以下の式で表される。

$$\begin{cases} \bar{\lambda}_i^{(2)} = 2 - 2 \cos\left(\frac{2i-1}{2m+1}\pi\right), \\ \{\bar{\mathbf{x}}_i^{(2)}\}_j = \cos\left(\frac{(2j-1)(2i-1)}{2(2m+1)}\pi\right). \end{cases} \quad (47)$$

この行列 $\bar{A}^{(2)}$ の逆行列 $(\bar{A}^{(2)})^{-1}$ は、

$$(\bar{A}^{(2)})^{-1} = \begin{pmatrix} m & m-1 & m-2 & \cdots & 2 & 1 \\ m-1 & m-1 & m-2 & \cdots & 2 & 1 \\ m-2 & m-2 & m-2 & \cdots & 2 & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 2 & 2 & 2 & \cdots & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad (48)$$

である。

最後に、式 (23) の各変数が、 $\alpha = -1$, $a = c = 1$, $b = 2$ の場合、正確な固有値と固有ベクトルを三角関数で表現できる 3 重対角行列 $\bar{A}^{(3)}$

$$\bar{A}^{(3)} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & & & & \\ 1 & 2 & 1 & & & \\ & 1 & \ddots & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & 1 & \\ & & & & 1 & 2 \end{pmatrix}, \quad (49)$$

は、

$$\bar{A}^{(3)} = F\bar{A}^{(2)}F \quad (50)$$

を満たす。 $FF = I$ が成り立つため、

$$\begin{aligned} F\bar{A}^{(2)}\mathbf{v}_i &= F\bar{A}^{(2)}FF\bar{\mathbf{x}}_i^{(2)} = \bar{A}^{(3)}F\bar{\mathbf{x}}_i^{(2)} \\ &= F\bar{\lambda}_i^{(2)}\bar{\mathbf{x}}_i^{(2)} = \bar{\lambda}_i^{(2)}F\bar{\mathbf{x}}_i^{(2)}, \end{aligned} \quad (51)$$

となる。つまり、 $\bar{A}^{(3)}$ の固有値 $\bar{\lambda}_i^{(3)}$ と固有ベクトル $\bar{\mathbf{x}}_i^{(3)}$ は、以下のようになる。

$$\begin{cases} \bar{\lambda}_i^{(3)} = \bar{\lambda}_i^{(2)}, \\ \bar{\mathbf{x}}_i^{(3)} = F\bar{\mathbf{x}}_i^{(2)}. \end{cases} \quad (52)$$

この行列 $\bar{A}^{(3)}$ の逆行列 $(\bar{A}^{(3)})^{-1}$ は、

$$(\bar{A}^{(3)})^{-1} = \begin{pmatrix} m & -(m-1) & \cdots & 1 \times (-1)^{m-1} \\ -(m-1) & m-1 & \cdots & 1 \times (-1)^m \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 2 \times (-1)^m & \cdots & 1 & -1 \\ 1 \times (-1)^{m-1} & \cdots & -1 & 1 \end{pmatrix}, \quad (53)$$

である。

4.4 2重対角行列の逆行列

本節では、4.3 節で説明した行列から 2 重対角行列を作成する方法を述べる。

$\bar{A}^{(2)} = (\bar{B}^{(2)})^\top \bar{B}^{(2)}$ より、2 重対角行列 $\bar{B}^{(2)}$ は、

$$\bar{B}^{(2)} = \begin{pmatrix} 1 & -1 & & & \\ & \ddots & \ddots & & \\ & & \ddots & -1 & \\ & & & & 1 \end{pmatrix}, \quad (54)$$

となる。式 (47) に三角関数の 2 倍角の公式を適用することによって、行列 $\bar{B}^{(2)}$ の特異値 $\bar{\sigma}_i^{(2)}$ を次の式で表すことができる。

$$\begin{aligned} \bar{\sigma}_i^{(2)} &= \sqrt{2 - 2 \cos\left(\frac{2i-1}{2m+1}\pi\right)} \\ &= \sqrt{2 - 2 \left(1 - 2 \sin^2\left(\frac{1}{2} \frac{2i-1}{2m+1}\pi\right)\right)} \\ &= 2 \sin\left(\frac{2i-1}{2(2m+1)}\pi\right) \\ &= 2 \cos\left(\frac{2i-1}{2(2m+1)}\pi - \frac{1}{2}\pi\right) \\ &= 2 \cos\left(\frac{i-m-1}{2m+1}\pi\right) \\ &= 2 \cos\left(\frac{m+1-i}{2m+1}\pi\right). \end{aligned} \quad (55)$$

$k = m+1-i$ とおけば、 $k = 1, 2, \dots, m$ となり

$$\bar{\sigma}_k^{(2)} = 2 \cos\left(\frac{k}{2m+1}\pi\right). \quad (56)$$

となる。行列 $\bar{B}^{(2)}$ の右特異ベクトルは、 $\{\bar{\mathbf{x}}_i^{(2)}\}_j$ と一致する。左特異ベクトルは、 $\bar{B}^{(2)}(\bar{B}^{(2)})^\top$ の固有ベクトルと一致するため、

$$\begin{pmatrix} 0 & & & 1 \\ & & 1 & \\ & \ddots & & \\ 1 & & & 0 \end{pmatrix} \bar{\mathbf{x}}_i^{(2)}, \quad (57)$$

となる。行列 $\bar{B}^{(2)}$ に対する逆行列 $(\bar{B}^{(2)})^{-1}$ は、

$$(\bar{B}^{(2)})^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 & 1 \\ & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ & & \ddots & \ddots & \vdots \\ & & & \ddots & 1 \\ & & & & 1 \end{pmatrix}, \quad (58)$$

である。

$\bar{A}^{(3)} = (\bar{B}^{(3)})^\top \bar{B}^{(3)}$ より、2 重対角行列 $\bar{B}^{(3)}$ は、

表 1 大きな条件数 (a) を持つテスト行列に対する性能評価 (計算時間 [$\times 10^{-3}$ sec.])
Table 1 Performance for the test matrix having large condition number (a) (Computational time [$\times 10^{-3}$ sec.]).

m	テスト行列作成時間	Routine (1)	Routine (2)	Routine (3)
50	23.01 (9.79)	3.43	1.83	4.48
100	104.27 (54.01)	9.14	6.87	29.37
200	626.61 (416.46)	61.32	42.92	245.66
300	1905.51 (1457.94)	188.66	124.45	908.59

$$\bar{B}^{(3)} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & & & \\ & \ddots & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & \ddots & 1 \\ & & & & 1 \end{pmatrix}, \quad (59)$$

となる. この行列 $\bar{B}^{(3)}$ の特異値 $\bar{\sigma}_i^{(3)}$ は,

$$\bar{\sigma}_k^{(3)} = 2 \cos \left(\frac{k}{2m+1} \pi \right), \quad (60)$$

と表される. 行列 $\bar{B}^{(3)}$ に対する逆行列 $(\bar{B}^{(3)})^{-1}$ は,

$$(\bar{B}^{(3)})^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 1 & \dots & \dots \\ & 1 & -1 & \dots & \vdots \\ & & \ddots & \ddots & 1 \\ & & & \ddots & -1 \\ & & & & 1 \end{pmatrix}. \quad (61)$$

である.

5. 実験

本章では, LAPACK 3.4.2 に含まれる特異値分解のためのルーチンに関する性能を評価するために, 提案した作成方法によって得られるテスト行列を用いて実験を行う. 提案した作成法は 2 種類ある. 大きな条件数 (a) を持つテスト行列は, 式 (13) もしくは式 (14) によって得られる. 大きな条件数 (b) を持つテスト行列は, 行列 GK で表される.

性能を比較するために, CPU として Intel Xeon X5570, メモリ容量 32GB の計算機を用いる. コンパイラとしては, gfortran 4.7.2 と gcc 4.7.2 を適用する. テスト行列を作成するライブラリとして, GMP 5.0.5 と GNU MPFR 3.1.1 を用いる.

最初の実験では, 大きな条件数 (a) を持つテスト行列 \bar{Y} を用いる. このテスト行列 \bar{Y} は, $\bar{Y} = (\bar{B}^{(2)})^{-1}((\bar{B}^{(2)})^{-1})^\top(\bar{B}^{(2)})^{-1}((\bar{B}^{(2)})^{-1})^\top(\bar{B}^{(2)})^{-1}$ を満たす. 行列 \bar{Y} は, 非対称行列であることに注意する. 密行列のための特異値分解ルーチンとして, LAPACK 3.4.2 に含まれる以下の 3 つを用いる.

- (1) ハウスホルダ変換と QR 法を組み合わせたルーチン (DGESVD)
- (2) ハウスホルダ変換と分割統治法を組み合わせたルーチン (DGESDD)

ン (DGESDD)

(3) ヤコビ法を用いた特異値分解ルーチン (DGESVJ)

表 1 は, 大きな条件数 (a) を持つテスト行列に対する作成時間と計算時間を表す. テスト行列作成時間には, テスト行列の作成, 正確な特異値および特異ベクトルを計算するための時間が含まれており, () 内の数字は, このテスト行列作成時間から特異ベクトルの計算時間を減じた値である. この際, 式 (56) を用いる特異値計算および式 (47) を用いる右特異ベクトル計算では, 浮動小数点数どうしによる減算が存在しないため, 桁落ちは起きない. よって, 仮数として 128 bit を用いていることで, 倍精度浮動小数点数の範囲内で正確な値を計算できる. なお, 左特異ベクトルは, 式 (57) より計算する必要がない. テスト行列の作成時間は, その行列を特異値分解するための時間の数倍程度に収まっている. 行列サイズが大きくなると, 条件数は 10^{16} を超えるため, 倍精度における浮動小数点数で扱える問題の範囲ではなく, そのような問題はテスト行列として不適切である. ゆえに, 提案するテスト行列の作成法は, 実用域において有用である.

図 1 は, 各特異値に対する相対誤差をグラフ化したものである. この相対誤差は, 仮数を 128 bit の多倍長演算で計算されている. 横軸には, 特異値を昇順に並べている. 図 1 より, 行列サイズや特異値分解ルーチンの種類に関係なく, 小さい特異値に対する相対誤差が大きい傾向にあることが分かる.

表 2 は, 大きな条件数 (a) を持つテスト行列の各特異値に関する相対誤差の和を表している. 表 2 も, 図 1 と同様に, 仮数を 128 bit の多倍長演算で計算されている. 各誤差の計算には, 式 (6) を用いる. 表 2 より, 条件数 (a) が大きい場合, すべてのルーチンにおいて, 行列のサイズ m が大きくなるにつれて, 誤差が大きくなっていることが分かる. 特に, 条件数 (a) が大きい 300 次元のテスト行列 \bar{Y} の場合は, ハウスホルダ変換と分割統治法を組み合わせたルーチン (2) の計算精度が著しく悪化している.

次に, 大きい条件数 (b) を持つ行列に対する実験を行う. テスト行列として, 3.2 節で説明した行列 GK を用いる. 行列のサイズは, 1700×1700 , 2550×2550 , 3400×3400 とする. 行列 GK の変数 δ は, 8^{-3} , 8^{-4} , 8^{-5} , 8^{-6} とする. この行列 GK は, 2 重対角行列である. そこで, 比較

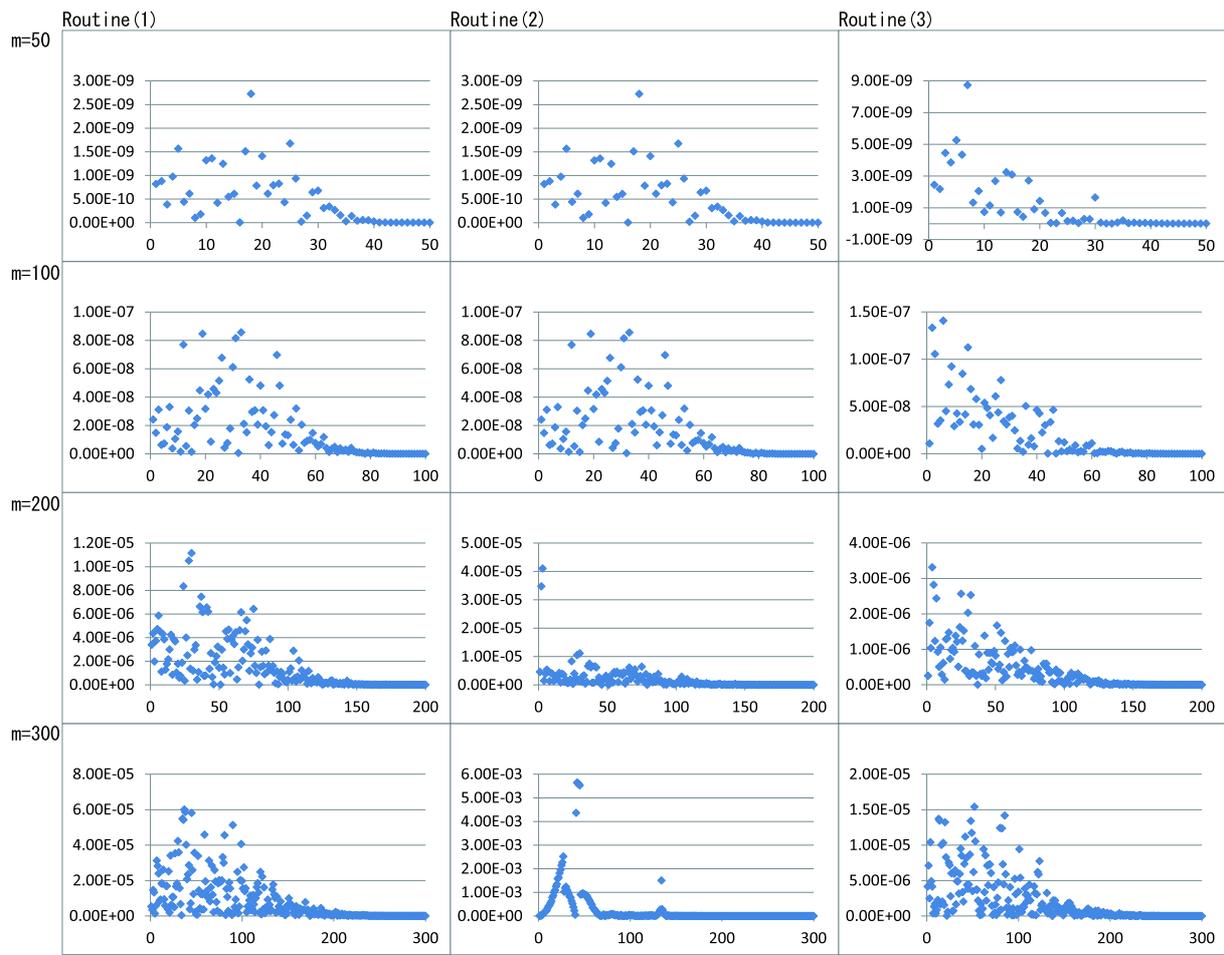


図 1 大きな条件数 (a) を持つテスト行列に対する相対誤差

Fig. 1 Relative errors to the test matrix having large condition number (a).

表 2 大きな条件数 (a) を持つテスト行列に対する性能評価 (計算された特異値の持つ相対誤差の和)

Table 2 Performance for the test matrix having large condition number (a) (Total of relative errors of computed singular values).

m	条件数 (a)	Routine (1)	Routine (2)	Routine (3)
50	1.10×10^9	5.20×10^{-10}	5.20×10^{-10}	1.14×10^{-10}
100	3.43×10^{10}	1.66×10^{-8}	1.66×10^{-8}	2.15×10^{-8}
200	1.08×10^{12}	1.46×10^{-6}	1.80×10^{-6}	3.94×10^{-7}
300	8.20×10^{12}	7.78×10^{-6}	2.55×10^{-4}	2.00×10^{-6}

するルーチンとして、次の 4 種類を用いる。

- (4) QR 法 (DBDSQR)
- (5) 分割統治法 (DBSDC)
- (6) 2 分法 (DSTEBZ) と逆反復法 (DSTEIN) を用いた特異値分解
- (7) MR³ 法 (DSTEGR) を用いた特異値分解

これらのルーチンのうち、ルーチン (6) と (7) は、拡大行列を必要とする。そのため、ルーチン (6) と (7) で扱うテスト行列のサイズは、 3400×3400 , 5100×5100 , 6800×6800 となる [19].

表 3 は、行列 GK を特異値分解した場合の性能評価を示す。条件数 (b) は、2 分法による計算結果を調べると、IEEE754 の基準では、完全に特異値が一致してしまう組が存在するため、倍精度浮動小数点数の範囲で無限大である。このことを確認するために、コンパイラ gfortran の中に含まれている 4 倍精度浮動小数点演算を用いた 2 分法を LAPACK のソースコード [17] より作成した。この際、2 分法の制御パラメータ $ABSTOL$ は 4.95×10^{-616} に設定している。この設定によって、倍精度浮動小数点数で表現できる桁数よりも多くの桁を正確に計算できる。表 4 は、2 分法を用いて行列 GK の条件数 (b) が倍精度浮動小数点数の範囲で無限大であることを確認するために要した計算時間である。この計算時間は、行列サイズが大きくなるのに比例して長くなっている。また、表 3 と表 4 の計算時間を比較すると数倍程度であることが分かる。ゆえに、各サイズの行列 GK はテスト行列として適切である。表 3 より、実行時間に関して、ルーチン (4) は、他のルーチンよりも遅い。直交性 $\|U^T U - I\|_F$, $\|V^T V - I\|_F$ と特異値分解の精度 $\|B - U \Sigma V^T\|_F$ に関して、ルーチン (4) または (5) が、良好な結果を示している。ゆえに、大きな条件

表 3 大きな条件数 (b) を持つテスト行列 GK に対する性能評価
 Table 3 Performance for the test matrix GK having large condition number (b).

m	δ		Routine (4)	Routine (5)	Routine (6)	Routine (7)
1700	8^{-3}	Exec. time [sec]	33.56	3.01	3.70	4.02
		$\ U^T U - I\ _F$	2.92×10^{-13}	1.41×10^{-13}	3.59×10^{-12}	1.62×10^{-12}
		$\ V^T V - I\ _F$	3.02×10^{-13}	1.44×10^{-13}	3.62×10^{-12}	1.620×10^{-12}
		$\ B - U\Sigma V^T\ _F$	2.25×10^{-12}	8.19×10^{-13}	7.81×10^{-12}	1.15×10^{-11}
	8^{-4}	Exec. time [sec]	34.16	2.40	3.62	4.13
		$\ U^T U - I\ _F$	3.13×10^{-13}	1.26×10^{-13}	3.20×10^{-11}	1.71×10^{-12}
		$\ V^T V - I\ _F$	3.10×10^{-13}	1.26×10^{-13}	3.20×10^{-11}	1.71×10^{-12}
		$\ B - U\Sigma V^T\ _F$	2.42×10^{-12}	7.72×10^{-13}	9.85×10^{-11}	1.25×10^{-11}
	8^{-5}	Exec. time [sec]	34.23	1.82	3.55	4.22
		$\ U^T U - I\ _F$	3.00×10^{-13}	1.07×10^{-13}	2.54×10^{-13}	1.30×10^{-12}
		$\ V^T V - I\ _F$	3.01×10^{-13}	1.08×10^{-13}	2.54×10^{-13}	1.30×10^{-12}
		$\ B - U\Sigma V^T\ _F$	2.33×10^{-12}	7.72×10^{-13}	2.76×10^{-12}	8.05×10^{-12}
8^{-6}	Exec. time [sec]	34.59	1.55	3.48	4.33	
	$\ U^T U - I\ _F$	2.89×10^{-13}	9.96×10^{-14}	5.22×10^{-12}	6.27×10^{-11}	
	$\ V^T V - I\ _F$	3.06×10^{-13}	9.99×10^{-14}	5.18×10^{-12}	6.27×10^{-11}	
	$\ B - U\Sigma V^T\ _F$	2.38×10^{-12}	6.95×10^{-13}	2.16×10^{-11}	5.79×10^{-10}	
2550	8^{-3}	Exec. time [sec]	122.85	10.15	12.06	9.13
		$\ U^T U - I\ _F$	4.31×10^{-13}	2.22×10^{-13}	4.05×10^{-11}	2.66×10^{-11}
		$\ V^T V - I\ _F$	4.43×10^{-13}	2.15×10^{-13}	4.03×10^{-11}	2.66×10^{-11}
		$\ B - U\Sigma V^T\ _F$	3.32×10^{-12}	1.17×10^{-12}	8.00×10^{-11}	1.93×10^{-10}
	8^{-4}	Exec. time [sec]	123.86	7.97	11.89	9.39
		$\ U^T U - I\ _F$	4.51×10^{-13}	1.89×10^{-13}	1.54×10^{-11}	2.78×10^{-11}
		$\ V^T V - I\ _F$	4.61×10^{-13}	1.89×10^{-13}	1.56×10^{-11}	2.78×10^{-11}
		$\ B - U\Sigma V^T\ _F$	3.51×10^{-12}	1.18×10^{-12}	4.80×10^{-11}	2.56×10^{-10}
	8^{-5}	Exec. time [sec]	125.57	5.73	11.74	9.67
		$\ U^T U - I\ _F$	4.37×10^{-13}	1.73×10^{-13}	3.36×10^{-13}	1.34×10^{-11}
		$\ V^T V - I\ _F$	4.48×10^{-13}	1.73×10^{-13}	3.36×10^{-13}	9.33×10^{-11}
		$\ B - U\Sigma V^T\ _F$	3.32×10^{-12}	1.11×10^{-12}	4.15×10^{-12}	9.33×10^{-11}
8^{-6}	Exec. time [sec]	128.04	4.85	11.60	9.91	
	$\ U^T U - I\ _F$	4.42×10^{-13}	1.54×10^{-13}	7.98×10^{-11}	1.06×10^{-9}	
	$\ V^T V - I\ _F$	4.49×10^{-13}	1.54×10^{-13}	7.98×10^{-11}	1.06×10^{-9}	
	$\ B - U\Sigma V^T\ _F$	3.47×10^{-12}	1.01×10^{-12}	3.24×10^{-10}	9.78×10^{-9}	
3400	10^{-3}	Exec. time [sec]	299.38	24.46	29.21	16.30
		$\ U^T U - I\ _F$	5.84×10^{-13}	2.59×10^{-13}	1.02×10^{-10}	1.66×10^{-11}
		$\ V^T V - I\ _F$	5.97×10^{-13}	2.60×10^{-13}	1.01×10^{-10}	1.66×10^{-11}
		$\ B - U\Sigma V^T\ _F$	4.43×10^{-12}	1.42×10^{-12}	2.24×10^{-10}	1.13×10^{-10}
	8^{-4}	Exec. time [sec]	302.30	20.54	28.90	16.83
		$\ U^T U - I\ _F$	6.01×10^{-13}	2.24×10^{-13}	1.63×10^{-10}	4.08×10^{-12}
		$\ V^T V - I\ _F$	5.94×10^{-13}	2.26×10^{-13}	1.63×10^{-10}	4.08×10^{-12}
		$\ B - U\Sigma V^T\ _F$	4.48×10^{-12}	1.29×10^{-12}	1.14×10^{-9}	2.18×10^{-11}
	8^{-5}	Exec. time [sec]	313.51	13.34	28.65	17.29
		$\ U^T U - I\ _F$	5.93×10^{-13}	1.89×10^{-13}	3.74×10^{-12}	1.25×10^{-11}
		$\ V^T V - I\ _F$	6.12×10^{-13}	1.88×10^{-13}	3.82×10^{-12}	1.25×10^{-11}
		$\ B - U\Sigma V^T\ _F$	4.61×10^{-12}	1.27×10^{-12}	2.12×10^{-11}	1.14×10^{-10}
8^{-6}	Exec. time [sec]	313.48	10.90	28.42	17.82	
	$\ U^T U - I\ _F$	5.92×10^{-13}	1.81×10^{-13}	6.02×10^{-11}	2.02×10^{-9}	
	$\ V^T V - I\ _F$	6.18×10^{-13}	1.82×10^{-13}	6.06×10^{-11}	2.02×10^{-9}	
	$\ B - U\Sigma V^T\ _F$	4.58×10^{-12}	1.21×10^{-12}	2.46×10^{-10}	1.87×10^{-8}	

数 (b) を持つ行列 GK を特異値分解するためには、ルーチン (5) を利用することが適切であることが分かる。

条件数 (a) と条件数 (b) の結果より、与えられた行列の持つ特徴によって、効果的な特異値分解法が異なることが

表 4 2 分法による行列 GK の条件数 (b) の計算時間

Table 4 Computational time in condition number (b) of GK by using bisection method [sec.].

m	$\delta = 8^{-3}$	$\delta = 8^{-4}$	$\delta = 8^{-5}$	$\delta = 8^{-6}$
1700	118.09	114.88	111.70	108.12
2550	262.91	255.72	248.58	240.56
3400	462.59	449.87	437.25	422.84

分かる。特に、条件数 (b) の実験において適切であるとされたルーチン (5) はルーチン (2) の内部に含まれているが、条件数 (a) に関する実験では計算精度が著しく悪化しているため良くない。以上より、特異値分解を適用する際には、行列とルーチンの相性の関係を確認すべきであることが分かる。

6. まとめ

本稿では、大きな条件数を持つテスト行列を作成するための方法を 2 種類提案した。大きな条件数 (a) を持つテスト行列の作成方法では、正確な特異値と正確な特異ベクトルが明かな行列が必要である。そこで、正確な特異値と正確な特異ベクトルを三角関数で表現できる行列を紹介した。大きな条件数 (b) を持つテスト行列の作成方法では、近接特異値を持つ行列を組み合わせることによって、テスト行列を作成することができる。これらのテスト行列を用いて、LAPACK 3.4.2 に含まれるいくつかの特異値分解ルーチンの実験を行った。計算時間と精度に関する結果より、行列の性質によって、適切なルーチンが異なることが分かった。以上より、特定の性質を持つ行列を作成することは重要であることが分かる。

今後の課題として、各特異値の隣接度合いが高い行列において、正確な特異値および特異ベクトルを得ることのできる行列を作成する必要がある。さらに、様々な性質を持つテスト行列を作成する方法を開発することがあげられる。

参考文献

[1] Cuppen, J.J.M.: A divide and conquer method for the symmetric tridiagonal eigenproblem, *Numerische Mathematik*, Vol.36, pp.177–195 (1981).
 [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] Dhillon, I., and Parlett, B.: Orthogonal eigenvectors and relative gaps, *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, Vol.25, No.3, pp.858–899 (2004).
 [5] Drmac, Z. and Veselic, K.: *New fast and accurate Jacobi SVD algorithm: I*, LAPACK WORKING NOTE 169.
 [6] Drmac, Z. and Veselic, K.: *New fast and accurate Jacobi SVD algorithm: II*, LAPACK WORKING NOTE 170.
 [7] Fernando, K.: On computing an eigenvector of a tridiagonal matrix, part 1: basic results, *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, Vol.18, No.4, pp.1013–1034 (1997).

[8] Francis, J.G.F.: The QR transformation a unitary analogue to the LR transformation—part 1, *Computer J.*, Vol.4, pp.265–271 (1961).
 [9] The GNU MP Bignum Library, available from (<http://gmplib.org/>) (accessed 2012-11-12).
 [10] 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).
 [11] Golub, G. and Reinsch, C.: Singular value decomposition and least squares solutions, *Numer. Math.*, Vol.14, pp.403–420 (1970).
 [12] Gregor, R.T. and Karney, D.L.: *A Collection of Matrices for Testing Computational Algorithms Interscience*, Wiley-Interscience (1969).
 [13] 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, pp.172–191 (1995).
 [14] 石渡恵美子, 洲之内治男: 数値計算 (新訂版), サイエンス社 (2002).
 [15] 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).
 [16] 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, 応用数学会論文誌, Vol.3, No.15, pp.461–481 (2005).
 [17] LAPACK-Linear Algebra PACKage, available from (<http://www.netlib.org/lapack/>) (accessed 2012-11-12).
 [18] The GNU MPFR Library, available from (<http://www.mpfr.org/>) (accessed 2012-11-12).
 [19] 大石進一: 精度保証付き数値計算, コロナ社 (2000).
 [20] Parlett, B. and Dhillon, I.: Fernando’s solution to wilkinson’s problem: An application of double factorization, *Lin. Alg. Appl.*, Vol.267, pp.247–279 (1981).
 [21] 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).
 [22] Veselic, K. and Hari, V.: A Note on a One-sided Jacobi Algorithm, *Numer. Math.*, Vol.56, pp.627–633 (1989).
 [23] Watkins, D.S.: *Fundamentals of Matrix Computations, Second Edition*, Wiley-Interscience (2002).
 [24] 山本哲郎: 数値解析入門 (増訂版), サイエンス社 (2003).



高田 雅美 (正会員)

1977 年生。2004 年奈良女子大学大学院人間文化研究科複合領域科学専攻修了。博士 (理学)。2004 年京都大学大学院情報学研究所にて JST 委嘱研究員。2006 年奈良女子大学助手。2007 年奈良女子大学助教。2013 年奈良女子大学大学院自然科学系講師。数値計算アルゴリズム, 分散メモリ環境を対象とする並列プログラムの開発に関する研究に従事。



木村 欣司 (正会員)

1976年生。2004年神戸大学大学院自然科学研究科情報メディア科学専攻博士課程修了。博士(理学)。2006年京都大学大学院情報学研究科特定有期雇用助手。2007年新潟大学大学院自然科学研究科助教。2008年京都大学大学院情報学研究科特定講師。2009年京都大学大学院情報学研究科特定准教授。離散可積分系, 計算機代数, 数値解析に関する研究に従事。日本応用数理学会, 日本数式処理学会各会員。



中村 佳正 (正会員)

1955年生。1983年京都大学大学院工学研究科博士課程修了。工学博士。岐阜大学助教授, 同志社大学教授, 大阪大学大学院基礎工学研究科教授等を経て, 2001年より京都大学大学院情報学研究科数理工学専攻教授。専門は応用数学, とりわけ, 応用可積分系や計算数学, 高速高精度の特異値分解法 I-SVD を開発している。主著に『可積分系の機能数理』(共立出版, 2006年)がある。日本応用数理学会, 日本数学会, SIAM, AMS 各会員。