

## 研究課題別 事後評価結果

1. 研究課題名： 特異値分解法の革新による情報処理基盤の構築
2. 研究代表者： 中村 佳正（京都大学 大学院情報学研究科 教授）

### 3. 研究内容および成果：

国際標準ライブラリ LAPACK の特異値分解ルーチンに対して、多くのテスト行列について計算速度と精度の両面で優位性を持ち、しかも収束性と数値安定性が理論的に保証された大規模行列の特異値分解法 I-SVD に基づく情報処理基盤の構築を目標とした。

#### 3-1. 理論研究・基礎研究

実用レベルに達した新しい特異値計算アルゴリズム mdLVs 法を開発し、正の値を取る量についての比較的単純な四則演算で、2重対角行列の全ての特異値が高い相対精度、高速高次収束性および高信頼指数関数的収束安定性を持った計算が可能となった。mdLVs 法実装ルーチン DLVS は、バランスのとれた信頼性の高いアルゴリズムとして、DBDSQR や DBSDC を上回る現代の標準解法に位置づけられる。この mdLVs 法の原点シフト量計算において、出来合いの見積もり公式を採用せずに、一般化ニュートン下界の  $O(N)$  計算手法を独自に開発した。

#### 3-2. 計算科学の先端研究

上記の研究成果アルゴリズムの他に、並列性の優れた高速特異ベクトル計算法である dLV 型ツイスト分解法を開発した。dLV 型ツイスト分解法の特徴は、先に計算された特異値が真値にマシンイプシロンの数倍程度と極めて近い時、高精度に特異ベクトル計算が出来ることにある。dLV 型ツイスト分解には 2 個の任意パラメータがあり、I-SVD 法を実装した DBDSLV ルーチンでは、パラメータチューニングにより特異ベクトル相互の直交性が大きく改善されることがある。特異ベクトルの高速計算のためのツイスト分解法としては、現時点では dLV 型ツイスト分解が最も優れていると言える。また、中・小規模の悪条件行列の特異ベクトルの高精度計算に、非線形 Newton 反復計算を提案し、dLV ツイスト分解と相補的に用いることで、さらなる高精度特異ベクトル分解計算に展開出来ることを示した。

#### 3-3. 情報処理基盤の構築

逐次型特異値分解のためのバイナリルーチン DLVS、DBDSLV は学術目的に限定した公開を開始した。特異値分解法 I-SVD の並列化研究で開発された Parallel dDC は、スパコンや PC クラスタにおける数値実験において、米国の並列計算ライブラリ ScaLAPACK の PDBDSQR ルーチンを大きく凌ぐ高速性と良好なスケーラビリティが確認された。Parallel dDC をさらに改良し、本研究においてアクセラレータボード、マルチコアプロセッサ、GPU 等で取り組んできた 2 重対角化の前処理・逆変換の高速化研究と組み合わせることで、大規模密行列の特異値分解の高速並列計算ソフトウェア開発が可能となる。実用化に対しては、ベンチャー企業において、ライセンス契約の許で、医療画像処理やデータ検索への大規模特異値分解の応用研究がスタートした。

#### 4. 事後評価結果

##### 4-1. 外部発表(論文、口頭発表等)、特許、研究を通じての新たな知見の取得等の研究成果の状況

###### 4-1.1 外部発表、特許等

期間中の外部発表、特許等の実績を示す。

発表論文:(邦文) 12件/(英文) 19件

口頭発表:(国内) 52件/(海外) 17件

特許出願:(国内) 2件/(海外) 7件

研究成果の発表は十分に行われた。情報処理学会「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」で最優秀論文賞を受賞したことは評価出来る。

特許出願を確実にしない、ライセンス契約企業を増やすことが出来る体制を整えている。数値計算アルゴリズムの分野としては十分な件数であると考えられる。

###### 4-1.2 研究成果

本研究は、日本の応用数学と計算科学が抱える弱点を見事に把握した課題設定であり、LAPACKレベルの逐次型特異値分解ルーチンDLVSおよびDBDSLVを完成させ、並列計算機環境において高速性を実現した並列型特異値分解ルーチンParallel dDCを開発し、当初計画を上回る成果を上げた。可積分系という非常に理論的な分野の研究に端を発し、海外のデファクトの数値計算ライブラリの性能を凌駕するような独自のアルゴリズムにまで発展させた発想は特記すべきものである。さらに、ITベンチャー企業との共同研究に発展させ、PET医療画像解析による診断技術への応用を行っていることは高く評価出来る。

本プロジェクトの特異値分解法を適用することで、ページ間の関係性やキーワード間の関係性を示すような特徴量を計算することが出来るが、このような技術はインターネットサービスの基礎となるものであり、産業や社会への大きな波及効果が期待出来る。数学ライブラリとして、並列版のさらなる研究により、今後出現するペタフロップス級の超並列システムにもスケールするものが開発されることが期待される。米国勢LAPACKに独占された状態を打開する嚆矢となる可能性がある。

###### 4-1.3 研究推進、研究費

有力な研究補助員や大学院生等と協力して、小規模であるが有力な研究体制を構築している。研究会・シンポジウム等を数多く開催して研究者同士の緊密な技術交流を図っており、研究メンバーを見ても若手の人材育成に役立っている。物品費、人件費ともに適切であり、成果に十分に見合った投資であったと考える。

##### 4-2. 成果の科学技術への貢献

行列の「特異値分解」は様々な情報処理、データベース検索等で用いられる重要な線形数値演算である。現在、汎用パッケージライブラリのLAPACKはMATLAB、Mathematica等世界中で使用されており事実上の標準となっている。今回の研究成果である特異値分解法I-SVDの実装ライブラリのDLVS、DBDSLVや特異値分解の並列計算法であるParallel dDCはLAPACKの対応す

るルーチンを上回る高速性や高精度性を持つものであり、これら分野の技術開発力、国際競争力の強化に多大な貢献をするものである。さらに、これら成果のソフトウェアを公開し、広く学術・研究・実験に利用出来る環境を作っている。応用研究とのさらなる交流によって、本研究の真価が具現化されるであろう。

#### 4-3. その他特記事項(受賞等)

ソフトウェアの公開

公開日:2009年3月

公開者:○中村佳正, 阪野真也, 岩崎雅史, 高田雅美, 木村欣司, 誉田太朗, 坪井洋明,  
片山幹基, 豊川博己

ソフトウェア名: 2重対角行列倍精度特異値計算バイナリルーチン:DLVS

2重対角行列倍精度特異値分解計算バイナリルーチン:DBDLSV

URL: <http://www-is.amp.i.kyoto-u.ac.jp/lab/isvd/>