戦略的創造研究推進事業
発展研究（SORST）

研究終了報告書

研究課題「特異値分解法の革新による情報処理基盤の構築」

研究期間：平成１８年４月１日～
平成２１年３月３１日

中村 佳正
（京都大学大学院情報学研究科, 教授）

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．研究実施の概要

行列の特異値分解は最小２乗法に基づく様々な情報処理で用いられる重要な線形数値演算である．科学技術振興機構の援助を得て行った研究（さきがけ研究，平成 14 年 12 月から平成 18 年 3 月）において 2 重対角行列の高精度特異値計算部と高速高精度特異ベクトル計算部の双方で大きな進展があり, 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もち，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 の基本的なアイデアを獲得していた．このうち，特異ベクトル計算部で開発した高精度ツイスト分解法については平成 16 年に国内特許出願(特願 2004-166437 号)し, I-SVD 法の並列化についても平成 17 年に国内特許出願(特願 2005-351089 号)していた．なお，特願 2004-166437 号は，その後平成 21 年 6 月 19 日，特許第 4325877 号として国内登録された.

本研究は，I-SVD 法に基づく情報処理基盤の構築を目標に，戦略的創造研究推進事業の発展研究(SORST)として，以下の 3 つの側面から研究を推進した.

１）　理論研究・基礎研究として
２）　計算科学の先端研究として
３）　情報処理基盤の構築として

以下，１）２）３）のそれぞれについて実施状況をまとめる.

１）理論研究・基礎研究として

本研究の開始と同時期に出版した主著「可積分系の機能数理」（共立出版 2006）において基礎理論を展開しているように，本研究は対称な直交多項式のスペクトル変換のもとでのモーメント行列の正定値性を数学的基盤としている．スペクトル変換の反復のための漸化式は離散時間可積分系である離散ロトカ・ボルテラ(dLV)方程式の形をとり，モーメント行列の正定値性はロトカ・ボルテラ方程式の解の正値性を通じて，対応する数値計算アルゴリズム(dLV 法)の数値安定性を保証する． dLV 法は平成 19 年に Moody T. Chu 教授(North Carolina 州立大学)の 1 週間にわたる取材を受け，その後， Acta Numerica 2008 において詳しく紹介された．一方，我々の研究はそのかなり先を進んでおり，平成 17 年には正値性を壊さない原点シフトの導入に成功し，<u>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</u>として発表している(Iwasaki-Nakamura 2006)．この結果，正の値をと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相対精度の意味で高精度，高次収束の意味で高速，指数関数的収束の意味で高い信頼性をもって計算可能となった．mdLVs 法については未だ追随する研究は現れていない.

本報告書でも述べるように，mdLVs 法の実装ルーチン DLVS は，計算された特異値の相対精度では 2 分法(DSTEBZ)，実行時間ではアグレッシブシフトを多用する dqds 法(DLASQ)に次ぐ性能をもつが，バランスのとれた信頼性の高いアルゴリズムとして，QR 法(DBDSQR), 分割統治法(DBDSDC)を上回る現代の標準解法に位置づけられるであろう．ここに括弧内は米国の線形数値計算の標準ライブラリ LAPACK のルーチン名である．また, mdLVs 法では原点シフト量の計算に最小特異値の下からの見積もりを必要とするが，本研究はここでも出来合の見積もり公式は採用せず，<u>一般化ニュートン下界の $O(N)$ 計算手法</u>を独自に開発している．数学という基礎科学からのブレークスルーといわれる所以である.

２）計算科学の先端研究として

本研究における 2 つ目の成果アルゴリズムは<u>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</u>である(岩崎-阪野-中村 2005). mdLVs 法によって計算された真値に極めて近い特異値に対する左右の特異ベクトルを連立一次方程式の解ベクトルとして計算するのであるが, 逆反復法ではなく, 2 種類のコレスキー分解を「ひねって結びつけ」, さらに，ひねった点から前進・後退代入を始めることで誤差の蓄積を最小限にするという考え方である．この発想はもともと 3 重対角行列を係数にする連立一次方程式の直接解法

にあったもので, 特異ベクトル計算への応用も既に Parlett-Dhillon(1997)において qd 型ツイスト分解法として提案されており本研究の独自のアイデアではない．しかし，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とき，コレスキー分解すべき係数行列はほぼ非正則であるにも関わらず，dLV 型ツイスト分解法では高精度に特異ベクトル計算ができるのに対して，qd 型ツイスト分解法では大きな誤差を含む例が小さな次数の行列で見つかっている（岩崎-阪野-中村 2005)．また，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することがある(Takata-Konda-Kimura-Nakamura 2007)．一方，qd 型ツイスト分解にはそのようなパラメータをもたない． LAPACK ではツイスト分解型の特異ベクトル計算ルーチンは公開されていないことから考えて，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いえる．dLV 型ツイスト分解のロバスト性(MRRR 性)の解明などは今後の理論的な課題である．

３）情報処理基盤の構築として

本研究チームが学術目的に限定した公開を開始している逐次型特異値分解のためのバイナリルーチン DLVS, DBDSLV は，商用目的には直ちにライセンシング可能である．特異値分解法 I-SVD の並列化研究で開発された Parallel dDC については, 本研究における第 3 の成果アルゴリズムとして，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 ルーチンを大きくしのぐ高速性と良好なスケーラビリティが確認されている，また，ベンチャー企業において，ライセンシング契約の許で，既に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ている．Parallel dDC の並列化効率をさらに高める実装の余地がある．今後は，改良した Parallel dDC を，本研究においてアクセラレータボード(ClearSpeed CSX600, SONY Cell Broadband Engine)，マルチコアプロセッサ(Intel Core2 Quad, AMD Opteron Quad), GPU(NVIDIA GeForce8800GTX, NVIDIA Tesla)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接続することで，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ってきた． 10 ペタプロップス級スパコンのキラーコンテンツという期待もある．

以上より，本研究は広く情報処理基盤の構築に資する成果をあげたといえよう．

３．研究構想

本発展研究の開始時（平成 18 年 4 月）に設定した目標は，「研究計画書」（平成 17 年 11 月 18 日提出）において以下の通り記されている．

『まず，I-SVD 法による特異値分解の逐次計算ライブラリの一般的な改良とチューニングを継続し, より広いクラスの行列に適用可能な LAPACK レベルの逐次型特異値分解ライブラリを完成する．さらに，より高速性を実現する並列型特異値分解ライブラリを開発する．以上の，高速・高精度な特異値分解ライブラリ群の誕生により，リアルタイムの高精度医療画像処理を含む様々な情報処理ソフトウェアの開発環境が整うと期待される．また, 本研究では高速・高精度な特異値分解を必要とするいくつかのグループとの共同研究・共同開発によって，本研究で開発した特異値分解ライブラリ群の個々の問題に応じたチューニングを行い，革新的な特異値分解法の実用化に向けての研究を開始する．』

具体的には，LAPACK レベルの逐次型特異値分解ルーチン DLVS, DBDSLV を完成するとともに，並列計算機環境においてより高速性を実現するために，並列型特異値分解ルーチン Parallel dDC を開発することが当面の目標となった．研究実施体制としては，ライブラリ開発を意図して京都大学外（NICT，名古屋大学，同志社大学，奈良女子大学，京都府立大学）から研究協力者を迎えることとした．このうち，奈良女子大学，京都府立大学の教員はさきがけ研究にポスドクとして参加した本研究プロジェクトのいわば OB, OG である．また，さきがけ研究で有効に機能したポスドク雇用は予算的にも期間的にも困難であ

ったため，研究室（情報学研究科数理解析分野）から意欲のある大学院学生を常時 5 名程度，研究補助者として任用して基礎研究やライブラリ開発を進める編成とした．近在の大学からの参加者には定例のプロジェクトミーティングに参加してもらって日常的な共同研究を進めるとともに，比較的遠隔の大学からの参加者には毎年開催する計算数学研究会，および，必要に応じて開催する研究会等への参加と徹底討論を通じて知識や技術，問題点の共有化をはかることとした．

また, 具体的な応用研究については, NICT 内のベンチャー企業と共同研究契約を結び, 京大側が I-SVD 法について DBFDSLV ルーチンの提供を，NICT 側が FPGA による単精度特異値分解専用チップの開発を分担した．さらに，研究補助者の一人が起業したベンチャー企業とライセンス契約を結ぶこととした．

ライブラリ DLVS, DBDSLV, Parallel dDC は全て 2 重対角行列の特異値分解のためのルーチンである．一方，実問題への応用に必要となる密行列の高速特異値分解を目指して，2 重対角行列への前処理・逆変換の高速化研究にも着手した．とりわけ，省電力低価格の新しい計算機環境であるアクセラレータボード，マルチコアプロセッサ，グラフィックボードの出現を考慮し，PC クラスタやスパコンに加えて，これらの上での高速な前処理・逆変換を研究対象とすることとした．

高速･高精度な特異値分解法である I-SVD 法についても継続して発展を図ることとした．特異値計算部の mdLVs については，mdLVs に適合した原点シフト量の計算法の確立が望まれていた．また，特異ベクトル計算部の dLV ツイスト分解については，mdLVs で計算した特異値がひどく近接している場合に，いかに直交性の優れた特異ベクトルを計算するかという課題があった．これらを解決することで，DLVS, DBDSLV, Parallel dDC ルーチンはさらに信頼性の高いものとなると考えた．

以上のように，新しい特異値分解法に関する基礎研究からライブラリ開発，応用研究の端緒までを 1 つの研究チームのもとで実施し，情報処理基盤の構築とその公開を進めるのが本課題の全体的な研究構想である．

４．研究実施内容

[1] **特異値分解法 I-SVD の左特異ベクトルの直交性の改善**

(1)実施の内容

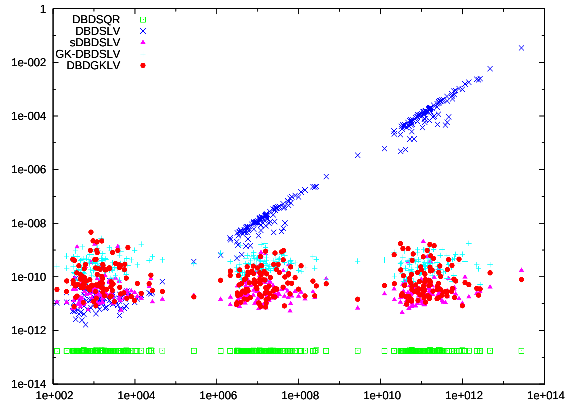
3 年余りの JST さきがけ研究（平成 14 年 12 月～18 年 3 月）では，高い相対精度をもつ特異値計算法である mdLVs と高速な特異ベクトル計算法である dLV 型ツイスト分解の両方を開発し，合わせて新しい特異値分解法 I-SVD 法と名付けた．相対精度が優れ，高速，かつ数値的安定性の優れた特異値計算法である mdLVs 法の実装ルーチン DLVS は，シフト量の設定法を除いてほぼ完成していた．残るは dLV 型ツイスト分解である．I-SVD 法の検証数値実験では，厳密に特異値と特異ベクトルのわかるテスト行列を必要とする．このため，例えば，区間 (0, 1] にランダムに与えた数値からなる対角行列を相似変換して 2 重対角行列を生成してテスト行列としていたが，ランダムに生成した 2 重対角行列に対しては，まれに左特異ベクトルの直交性や精度（真の左特異ベクトルとの誤差）が悪化することがあった．また，特異値がクラスタをなすなど強く近接している場合にも，特異ベクトルの直交性が悪化するという問題があった．本研究では，I-SVD 法におけるこれらの残された課題の解決に取り組んだ．

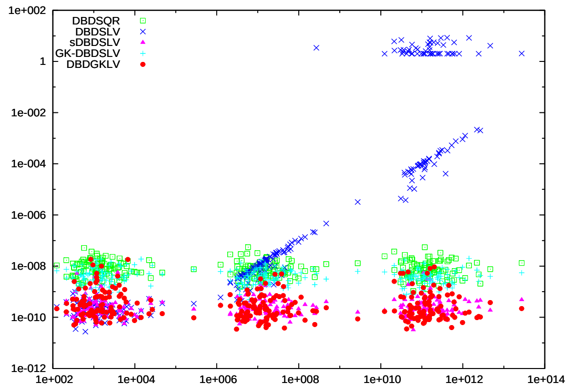
それまでの I-SVD 法では，以下のように，dLV 型ツイスト分解で先に求めた右特異ベクトル Vを一次変換することで高速に左特異ベクトルを計算していた．

$$U=BV\Sigma^{-1}$$

しかし，一次変換で求まった左特異ベクトル U は，テスト行列 B の条件数（最小特異値と最大特異値の比）に比例して直交性が悪化する可能性がある．そこで，左特異ベクトル計算法として新たに以下の 3 つの手法を考案した．ここに Golub-Kahan 行列とは，左右の特異ベクトルを固有ベクトルとして dLV 型ツイスト分解で同時に計算することができる元のテスト行列の 2 倍の次数をもつ新たなテスト行列である．

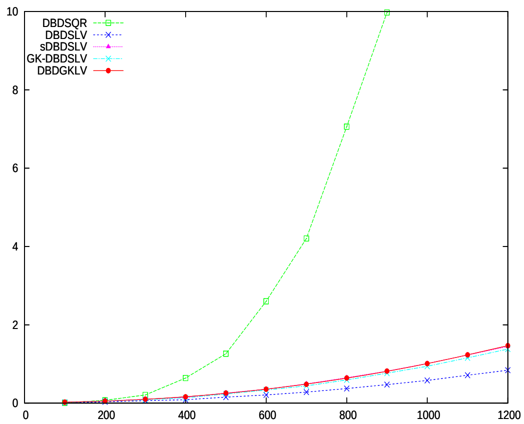
（i）直接左特異ベクトルを与える dLV 型ツイスト分解の定式化“sDBDSLV”
（ii）従来の I-SVD 法による右特異ベクトル計算と Golub-Kahan 行列を通じた左特異ベクトル計算との組合せ
（iii）Golub-Kahan 行列を通じた左右の特異ベクトルの同時計算





右上図において，横軸は特異値が（0,1）区間にランダムに分布する 1000 次の上 2 重対角行列の条件数を，縦軸は求まった左特異ベクトルの直交性 $\|U^TU-I\|_\infty$ を表す．ともに対数目盛である．この行列は近接特異値を持たない．緑点は QR 法に基づく現代の標準解法である LAPACK の DBDSQR ルーチン，青点は従来の I-SVD 法（DBDSLV ルーチン），紫点は提案法(i)（sDBDSLV），水色点は提案法(ii)（GK-DBDSLV），赤点は提案法(iii)（DBDGKLV）を示す．条件数に比例して直交性が悪化する従来の I-SVD 法に比べ，提案法(i)～(iii)は，いずれも条件数によらず常に高い直交性を保持する．提案法(ii)はやや劣る．QR 法は直交行列による相似変換を繰り返しながら特異値分解するため，特異ベクトルの直交性は当然ながら高い．

右中図の横軸は右上図と同様であり，縦軸は真の左特異ベクトルとの誤差 $\|U-U_{true}\|_1$ を表す．条件数に比例して真値との誤差が増大する従来の I-SVD 法に比べ，提案法(i)～(iii)は条件数によらず常に高い精度を保持している．直交性と同様，提案法(ii)はやや劣る．標準解法の DBDSQR ルーチンではむしろ特異ベクトル自体の精度が提案法より劣ることが注目される．



次に，高速性を比較する．右下図の横軸は上 2 重対角行列の次数 m を，縦軸は特異値分解の実行時間を表す．DBDSQR は計算量 $O(m^3)$ の QR 法を実装しているため，次数の増加とともに急激に実行時間が増大する．一方で，従来法と提案法(i)～(iii)はいずれも $O(m^2)$ の解法であるため，高速に特異値分解を計算できる．しかし，提案法(i)～(iii)はいずれも従来の I-SVD 法の 2 倍弱の実行時間を必要とする．

一方，固有ベクトルの場合と同様に，特異値が近接するとツイスト分解では，原理的に，直交性と精度のよい特異ベクトルが計算できないと考えられてきたが，特異値，特異ベクトルが厳密にわかる近接テスト行列が知られていないことから，この方面の研究は遅れていた．本研究では，まず，テスト行列の生成に着手し，3 重対角の Wilkinson 行列の類似として，極めて近接する多数の特異値の対をもつ 2 重対角テスト行列を発見した．次に，sDBDSLV と逆反復法，および，修正 Gram-Schmidt 法による再直交化との組合せによって精度よく特異ベクトルを計算することを試みた．すなわち，先に mdLVs 法によって高い相対精度で特異値計算した結果，近接していない特異値に対しては sDBDSLV を用いて個

別の dLV ツイスト分解で特異ベクトルを計算し，近接特異値のグループに対しては逆反復法と修正 Gram-Schmidt 法で特異ベクトルを計算する“H-sDBDSLV”である．

下表は，近接特異値の対をもつ 17×17 の上 2 重対角テスト行列（Kimura 行列）に対する左特異ベクトル計算の数値実験結果である．全ての左特異ベクトルを dLV 型ツイスト分解で計算する sDBDSLV に対し，H-sDBDSLV で計算された左特異ベクトルは十分な直交性と精度をもつことが確認された．なお，H-sDBDSLV の計算量は，近接特異値のなすクラスタの大きさを k とするとき $O(m^2+mk^2)$ である．

	sDBDSLV	H-sDBDSLV	DBDSQR
$\|U^TU-I\|_\infty$	0.999999	2.90743×10^{-12}	5.01209×10^{-15}
$\|U-U_{true}\|_1$	3.450745	7.40946×10^{-12}	1.19566×10^{-11}

(2) 得られた研究成果の状況及び今後期待される効果

研究実施の結果を精度と実行時間の両面から考慮し，本プロジェクトの成果アルゴリズムである高速・高精度な新しい特異値分解法 I-SVD 法の実装ライブラリの利用法は以下のようにまとめられる．

利用目的			ルーチン名	計算量
特異値計算	2 重対角行列の特異値が全て必要		DLVS	$O(m^2)$
特異値分解	近接特異値なし	左右の特異ベクトルが必要	sDBDSLV	$O(m^2)$
		片方の特異ベクトルで十分	DBDSLV	
	近接特異値あり	左右の特異ベクトルが必要	H-sDBDSLV	$O(m^2+mk^2)$
		片方の特異ベクトルで十分	H-DBDSLV	

この結果, 現代の標準解法であるが Demmel-Kahan(1990)の QR 法を実装した LAPACK の DBDSQR ルーチンの計算量 $O(m^3)$，Gu-Eisenstat(1995)の分割統治法を実装した LAPACK の DBDSDC ルーチンの行列によって異なる $O(m^2)$〜$O(m^3)$ の計算量と比較して，特異値全体がひとつのクラスタをなすような行列を除いて，常に大きな高速優位性をもち, 特異ベクトルの精度で上回り, 直交性でやや劣る特異値分解ライブラリが完成した．

ツイスト分解型の特異値分解ルーチンは LAPACK では未だ公開されておらず，平成 18 年に米国(1346144-11569898-PCT/JP2005/010084)，平成 19 年に EP(05746027.1-1527-JP2005010084)国際特許出願を果たした dLV 型ツイスト分解法に関する以上の成果は，広く高速な情報処理基盤の構築に資するものである．

なお, DBDSQR, DBDSDC によって計算された特異値は絶対誤差に意味での高精度性は持たないのに対して，mdLVs 法（DLVS）は相対誤差の意味での高精度性をもつ点でも大きな優位性をもつ．これは精度の良い小さな特異値が必要となる量子化学など科学技術計算で重要となる性質である．

また，画像圧縮，データ検索，信号分離のように，右または左の特異ベクトルのいずれかのみが必要な問題では，より高速な従来型 I-SVD 法（DBDSLV，H-DBDSLV）を利用することができる．

[2] 特異値計算法 mdLVs のシフト量計算部の改善

(1)実施の内容

さきがけ研究において開発した特異値計算の mdLVs 法における残された検討課題は，上 2 重対角行列 $\boldsymbol{B}$ の最小特異値の下からの見積もり量を利用するシフト量の計算において既

知の Johnson 下界を用いていた点である．Johnson 下界は平方根計算と減算を伴い，しばしば負の値となることから, 収束の終盤ではシフトなし反復計算が起きていた. このため, Johnson 下界に代わる最小特異値の下からの見積もりとしてよりシャープ，かつ，計算量の少ないシフト量の計算法が求められていた.

本研究では，mdLVs 法の原点シフト量として，一般化 Newton 下界

$$\theta_p^2 = (\mathrm{Tr}((\boldsymbol{B}^T\boldsymbol{B})^{-p}))^{-1/p} = (\mathrm{Tr}((\boldsymbol{B}\boldsymbol{B}^T)^{-p}))^{-1/p} \quad (p = 1, 2, \cdots)$$

を用いる．p = 1 の場合はよく知られた Newton 下界である．この量は行列 $\boldsymbol{B}$ の最小特異値$\sigma_{\mathrm{min.}}$の 2 乗の下界であり，次数 p の増大に伴って単調増加し, $p \to \infty$で$\sigma_{\mathrm{min.}}^2$ に下から収束することから，p が大きいほど，最小特異値のよりシャープな見積もりを与え，mdLVs 法の反復回数が減ることが期待されるが，計算量の増加とのトレードオフとなる.

研究の初期において，まず，行列積（$\boldsymbol{B}^T\boldsymbol{B})^p$ または（$\boldsymbol{B}\boldsymbol{B}^T)^p$ の逆行列の対角成分を求める漸化式について，式中に減算を含むものと含まないものの 2 通りの形式のものを予測し，減算を含むものについては一般の次数 p に対して，減算を含まないものについては次数 p が p = 2, 3, 4 の場合に対して，比較的単純な漸化式の具体的な形を与えた. その後, 減算を含まない形式の漸化式についても一般の次数 p に対する具体的な形を与えた．これによって各 p について $O(N)$ の計算量で一般化 Newton 下界の計算が可能となった.

さらに，一般化 Newton シフトを原点シフトとして用いた場合の mdLVs 法の漸近的収束解析を行い，理論上は弱（p + 1）次収束することを証明した．大きな p の一般化 Newton シフトを採用すれば，mdLVs 法の収束次数が上がる反面，シフト量の計算量の増大に伴って mdLVs 法の実行時間が増大する．最適な次数 p を決めることが数値実験の目的となる. このため指定したランダムな特異値を持つ 30,000×30,000 の上 2 重対角行列を 100 個生成し, mdLVs 法による特異値計算を行った．計算環境は以下の通り.

CPU	intel xeon X5482 3.2 GHz	メモリ	64 Gbyte
コンパイラ	intel fortran 10.1.018	オプション	–ipo –O3 –xS

実験では，特異値計算の実行時間および相対誤差を比較した. 実験に用いたアルゴリズムは mdLVs 法の他によく知られた QR 法，2 分法，さらに，高速解法として近年開発された dqds 法(Fernando-Parlett1994, Parlett-Marques2000)である. mdLVs 法以外の方法については米国の標準ライブラリ LAPACK の各ルーチン DBDSQR (QR 法)， DSTEBZ (2 分法)，DLASQ (dqds 法)をそれぞれ用いた. mdLVs 法においては独自に実装を行い，シフト量として，Johnson シフト（Johnson, 1989)，Newton シフト，一般化 Newton シフトを用いて実験を行った．DLVS ルーチンは Johnson シフトを用いた従来型の mdLVs 法である. 一般化 Newton シフトは, p =1, 2, 3, 4 の場合について，減算を含まない漸化式で ($\boldsymbol{B}^T\boldsymbol{B})^{-p}$ の対角成分よりシフト量を計算した.

実験結果を以下の表に示す．特異値計算の実行時間，および，特異値の相対誤差の総和はともに 100 問についての平均値である.

表　特異値計算の実行時間および特異値の相対誤差の総和

	DLASQ (dqds 法)	DBDSQR (QR 法)	DSTEBZ (2 分法)	DLVS (mdLVs)
相対誤差	18.59	29.61	0.29	13.49
実行時間	7.00	69.51	775.84	13.13

一般化 Newton	p=1 (mdLVs)	p = 2 (mdLVs)	p = 3 (mdLVs)	p = 4 (mdLVs)
相対誤差	11.90	9.36	9.26	9.31
実行時間	13.16	9.43	9.33	10.12

単位 ： 相対誤差は$\times 10^{-11}$，計算時間は sec.

最も相対誤差が小さいのは表中に赤色で示した 2 分法による DSTEBZ ルーチンであるが，著しく低速である．最も高速なのは表中に赤色で示した dqds 法による DLASQ ルーチンであるが，相対誤差は Johnson シフトを用いた従来型の mdLVs 法より悪い． QR 法による DBDSQR が低速なだけでなく，相対精度が最も悪い．mdLVs 法は，実行時間，相対精度ともに 2 番目に良く，実行時間の差は僅かで，最もバランスのとれた解法ということができる．注意すべきは，mdLVs 法において，従来の Johnson シフトを一般化 Newton シフト(*p=2,3,4*)に代えることで明らかな改善効果があり，とりわけ，減算を含まない $p = 3$ の漸化式を用いた mdLVs 法が，速度，精度ともに最も優れていることである．表中に緑色で示す．なお，dqds 法に一般化 Newton シフトを組み込めば精度の向上と速度の低下が見られるが 4 つのアルゴリズムの優劣は変わらない．

(2) 得られた研究成果の状況及び今後期待される効果

上の実験の結果，本プロジェクトの最初の成果となった高速・高精度な特異値計算法 mdLVs 法(Iwasaki-Nakamura2006)は，独自のシフト戦略の開発の結果，一段とその性能を向上させることができた．新しい DLVS ルーチンには $p = 3$ の一般化 Newton シフトを実装することを予定している．

なお，mdLVs 法については，中心多様体の存在を示すことで，漸化式の平衡点，すなわち，特異点の周りでは漸化式が局所的に<u>指数関数的安定性を持つ</u>ことが証明されている（Iwasaki-Nakamura2007, Takahashi-Iwasaki-Nakamura2008）．言い換えれば，mdLVs 法は一種の精度保証が可能で，アルゴリズムとして高い信頼性を持つことを意味している．このような安定性が証明されているシフト付き特異値計算法は他に見あたらない．

[3] 特異値分解の並列計算に向けて

(1)実施の内容

本プロジェクトで開発した特異値計算法 I-SVD は $O(m^2)$ の計算量の高速性をもつが，ペタコンのキラーコンテンツとして数 10 万，数 100 万次元の大規模問題を扱うには，一層の高速化に挑戦しなければならない．さきがけ研究において，当初は dLV 法の漸化式の 2 次元配列性に注目した領域分割法による並列特異値計算の並列化を行ったが，その後は，mdLVs 法の並列化はいったん避けて， <u>dLV ツイスト分解の高い並列性を活かし，分割統治法(D&C)による特異値計算と併用した並列化である“ダブル分割統治法”</u>（double Divide and Conquer, dDC）と<u>その並列化実装である“並列ダブル分割統治法</u>”（Parallel dDC）の開発に注力することとした．

並列化可能な高速特異値分解アルゴリズムを目指し開発した dDC は,逐次実行の際には,特異値の相対精度を除けば，I-SVD 法とほぼ同程度の性能をもつアルゴリズムである.本研究では,まず，dLV ツイスト分解法の理想的な並列性に加え，分割統治法の持つ並列性を備えた本アルゴリズムの理論的には完全に並列実行可能な計算モデルを構築し，逐次実行の dDC と併せて国内および PCT(JP2007/066445)特許出願した．また， MPI を用いて Parallel dDC を実装し，各種並列計算機上にて性能評価を行った．

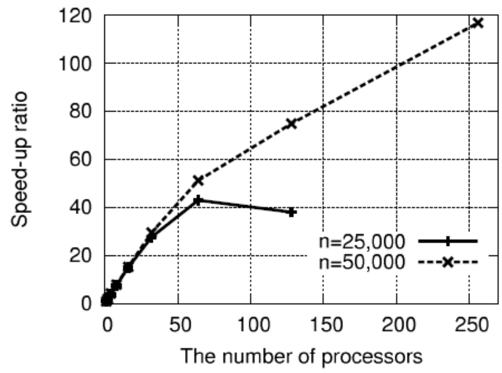
分散メモリ型並列計算機である，16node32CPU（AMD Opteron）をもつ PC クラスタにおいては n=50,000 の行列に対して 16CPU（1node1CPU を使用）で約 15 倍もの実行速度が得られた．この成果を査読付国際会議（PDPTA2006 および PDCN2007）にて発表した．なお，16CPU，n=3,000 のとき，米国の ScaLAPACK で公開されている QR 法に基づく並列特異値分解 PDBDSQR ルーチンと比較して Parallel dDC は約 70 倍高速である．

また，複数の共有メモリ型並列計算機により構成させる京都大学メディアセンターのスパコン PrimePowerHPC2500 においても評価実験を行った．その結果，256CPU

（1node64CPU を使用）で n=50,000 の行列に対しては 110 倍超，n=200,000 の行列に対しては約 150 倍の実行速度が得られた．この成果を査読付国際会議（PDCS2007）にて発表した．

その後, Multi-core 型 CPU を搭載した並列計算機においても性能評価を行った．4core をもつ Intel Core2 Quad においては n=50,000 の行列に対して約 3.7 倍の実行速度が得られた. 同じく 4core の AMD Opteron Quad を 4 つ搭載した並列計算機においては，13 倍を超える実行速度を得られた．これらの結果より，Parallel dDC は Multi-core 型の並列アーキテクチャにおいても良好なスケーラビリティをもつことがわかった．これらの成果を査読付国際会議（PDPTA2008 および Applied Computing2008）にて発表した．

ところで，I-SVD 法の項でも述べたように，ツイスト分解法による特異ベクトル計算を行うアルゴリズムの問題として，近接特異値（クラスタ）が存在した場合に特異ベクトルの精度が悪化しうる点がある．特異値が近接している場合には逆反復法の追加により精度向上を図ることができるが，数値的に重複特異値である場合や，それに近い極近接であった場合には十分な効果が期待できない．この問題に対処するため以下の手法によりダブル分割統治法のアルゴリズムを改訂した．まず計算された特異値に対して特異値の近接度合いを判定する．近接していない特異値については従来どおり対応する特異ベクトルをツイスト分解法により計算する．一方，クラスタが存在する場合にはそれぞれのクラスタに対して，修正 Gram-Schmidt 法による再直交化付き逆反復法を適用することで対応する特異ベクトルを計算する．このとき，計算対象の 2 重対角行列 $\boldsymbol{B}$ より構成した Golub-Kahan 行列に対して計算を行うことで，$\boldsymbol{B}^T\boldsymbol{B}$ を構成した場合の条件数の悪化を避けることが出来る．クラスタを含む 2 重行列である glued Kimura 行列に対して，この改訂を加えた dDC を適用することで性能評価を行った．



実行速度については，再直交化のための追加コストが必要となるため，実行速度は低下する．しかしながら QR 法との比較においては十分な優位性が確認できる．また計算精度については glued Kimura 行列は，極端に近接度合が高いため，dLV ツイスト分解法にて計算できた特異ベクトルについては精度が低下してしまう．しかしながらこのような行列においてもある程度の精度にて正しく計算ができることが確認できた．

Algorithm	dDC	D&C	QR
$n = 1,000$	1.26	0.15	31.29
$n = 2,000$	10.37	0.68	274.97
$n = 3,000$	38.79	1.80	900.15

Algorithm	dDC	D&C	QR
$\|\|V^TV - I\|\|_{\mathrm{abs}}$	6.1e-10	1.3e-12	3.2e-11
$\|\|U^TU - I\|\|_{\mathrm{abs}}$	6.1e-10	1.4e-12	3.2e-11
$\|\|(B - U\Sigma V^T)\|\|_{\mathrm{abs}}$	1.1e-08	1.7e-11	3.1e-10

なお，クラスタが存在する場合，dDC の計算量は $O(n^2+nk^2)$ となる．ここに，k は最大のクラスタの大きさ．また，空間計算量（計算領域）は $O(n)$ のままであり，$O(n^2)$ を必要とする分割統治法に対して優位性を持つ．これらの成果と，Parallel dDC に関する研究をまとめた内容を学術雑誌 Parallel Computing に投稿し，採録が決定した．また，2009 年 3 月に欧州にて開催予定の査読付国際会議（ALGORITMY2009）においては本成果に関する招待講演が予定されている．

2 重対角行列の特異値分解のために開発された dDC は，対称 3 重対角行列の固有値問題に対しても適用可能である．固有値計算後の正定値性やクラスタが存在する場合の対処な

ど，特異値分解の場合との違いを考慮して定式化した．また逐次実行プログラムを実装し評価を行ったところ，QR 法，分割統治法などの従来法と比較し，特異値分解の場合と類似の優位性があることを確認した．その成果を国内および PCT(JP2007/51575)特許出願すると共に，査読付国際会議（PDPTA2006）で成果を発表した．

表　本プロジェクトの成果アルゴリズム（斜線部は既存法からの借用）

特異値分解法	特異値計算部	特異ベクトル計算部	特長
I-SVD	mdLVs	dLV ツイスト分解	高い相対精度，高速性，高信頼，新シフト戦略
dDC	*D&C(分割統治法)*	dLV ツイスト分解	高速性，スケーラビリティ，少ない空間計算量，
Parallel dDC	Parallel D&C	dLV ツイスト分解	高い並列性能，高速性
Parallel I-SVD	Parallel mdLVs	dLV ツイスト分解	高い相対精度を保った並列化へ

さて，特異値分解法 I-SVD の並列化では，これまで大規模問題をスパコンや PC クラスタで解くための Parallel dDC を中心に研究を進めてきたが，マルチコア計算環境が身近なものになったことに鑑み，<u>中規模問題をマルチコアプロセッサ上で高い相対精度を保ったままで並列計算するための新たな計算手法 Parallel I-SVD</u> の開発にも取り組んだ．

mdLVs 法による特異値計算の途中で行列の分割(splitting)が起こることがあり，分割された行列はそれぞれ独立に特異値計算することができる．また，行列の減次(deflation)が起これば特異値の一部が途中で求まるため，その時点で対応する特異ベクトル計算を特異値計算とは独立に開始することができる．これらの性質を利用してマルチコアプロセッサ上で I-SVD 法をできる限り並列化するのが Parallel I-SVD のアイデアである．すなわち，I-SVD 法による特異値分解を「分割が起こるまで mdLVs 法によって特異値計算する」と「求められた特異値に対応する特異ベクトルを dLV 型ツイスト分解によって計算する」という 2 種類のジョブの繰り返しと考え，マルチコアプロセッサ上でこれらのジョブを複数の計算コアに効率的に割り当てることで並列化を試みたものである（図参照）．

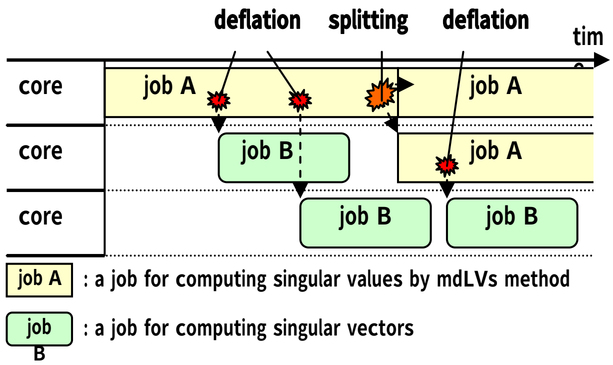


図 1. マルチコアプロセッサ向け並列版 I-SVD 法

dLV 型ツイスト分解は高速であるが，近接特異値に対しては特異ベクトルの直交性が悪くなる．そこで，近接特異値に対応する特異ベクトルの直交性の改善を図った．すなわち，すべての特異値が計算されたら，近接特異値のクラスタを探す．そして，そのクラスタに属する特異ベクトルを逆反復法で計算し，さらに修正 Gram-Schmidt 法でそれらを直交化するというプロセスである．この結果，近接特異値が含まれる行列に対しても，より高精度な特異ベクトルを計算できるようになった．ただし，特異値が近接しているかどうかを判断する基準によって，近接特異値のクラスタの個数や大きさは変化する．数値実験によれば，近接特異値のクラスタの個数や大きさによって，計算にかかる速度や計算される特異ベクトルの直交性は大きく変化する．次の図はある行列に対して Parallel I-SVD を実行した際の，16 個のコアの稼働率の推移を表したものである．あるクラスタに対する計算が最後まで残ってしまうと実行時間が延びる．近接の判定のためにどのような基準を用いるかが検討課題である．

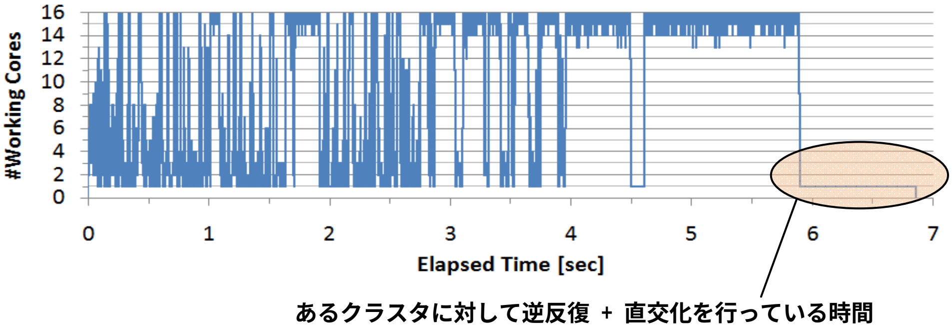
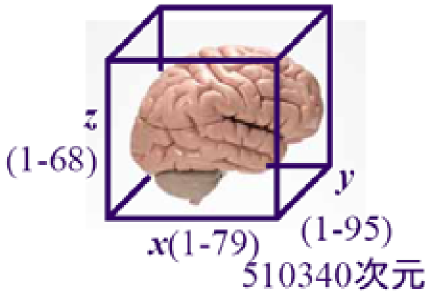


図. CPU 稼働率の例

(2)得られた研究成果の状況及び今後期待される効果

I-SVD や dDC の備える高速性，並列性，そして空間計算量の少なさという利点により，計算時間や必要メモリ量の観点からこれまで扱うことが難しかった大規模な問題に対する応用が今後期待できる．それらの可能性をみるため，いくつかの応用の取り組みを進めている．



国立長寿医療センター研究所と，研究補助者誉田の設立した IT ベンチャー企業（モバセンス株式会社，旧誉田商事）との共同研究により，本研究成果の，医療画像解析による診断技術への応用の取り組みが行われている．これはアルツハイマー病などの脳に疾患をもつ患者の脳画像と，健常な者の脳画像のデータより構成された行列に対して特異値分解を行うことで疾患の脳画像の特徴量を検出し，その特徴量を用いて自動診断および診断補助を行おうとする取り組みである．ここで扱う脳画像は 3 次元画像であり，一患者分あたり 51 万次元という非常に大きなものである．なお，当該研究は，モバセンス株式会社は京都府研究開発補助制度京都ウエルネス産業コンソーシアムウエルネスベンチャー事業化支援事業等の採択を受けている．（関連記事，日本経済新聞，平成 18 年 3 月 21 日）

高速な特異値分解をインターネットから取得したテキストデータの解析に応用する可能性を検討している．形態素解析などの技術を用いることにより，日本語文章から名詞（キーワード）をある程度の精度で抽出することが可能である．この技術を，クローリングにより集めた Web ページに適用することで，ページ-キーワードの関係性を表す行列を作成することが出来る．このような行列に対して特異値分解を適用することで，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できる．実際にこのようなシステムを作成し，約 8000 のページから約 4000 のキーワードを検出し，それらから作成した行列に対して特異値分解を適用し，解析したところ，右の表に示すような，キーワード間の関連性を計算することができた．「お茶」と「ケーキ」など，関連語と考えられる関係性が得られていることがわかる．解析対象とするページを増やすことで，検出精度の向上や，より多くの関係性を得られることが期待できるが計算量が増大する．このため，本研究で開発したような高速な特異値分解アルゴリズムが必要となってくる．従来の，関連語を計算するような様々なアプローチを考慮しながら今後の研究を進めることで，学術的にも実用的にも有意な成果が期待できる．またこのような技術はインターネット・

お茶	ケーキ
女性	土産
子供	大人
歯医者	近所
歯医者	ご飯
ランチ	デザート
北海道	ごはん
記憶	音楽
ごはん	お菓子
カレー	パン
サービス	ナイス
試合	BS
スーツ	社会人
楽しい	先輩
楽しい	コメント

ネット	文字化け
財布	楽しい
先生	地元
ネット	サービス
楽しい	結婚式
大学	お気に入り
電話	地元
先輩	学校
尻	涙
ビール	改正
ごはん	幸せ
ラッキー	改正
ネット	楽しい
隣	地元
忘年会	場所

サービスの基盤となるものであるため，産業や社会への大きな波及効果が期待できる．

[5] 2 重対角行列への前処理・逆変換の高速化

(1)実施の内容

これまで述べたように，本研究は 2 重対角行列の特異値分解の逐次計算と並列計算の両方で，基礎研究，発展研究，ルーチン開発，応用研究のステップを着実に上ってきた．実問題への応用で避けて通れないのが，与えられた密行列を I-SVD や dDC が適用可能な 2 重対角行列に変換する前処理部，さらには，2 重対角行列の特異値分解からもとの密行列の特異値分解を与える逆変換部の高速化である．I-SVD や dDC の開発によって 2 重対角行列の特異値分解部は $O(N^2)$, 大きさ K のクラスタのある場合でも $O(N^2+NK^2)$ の計算量で実行できるようになった．一方，次数 N の密行列の乗算でも $O(N^3)$ の計算量が必要なことからわかるように，密行列の特異値分解の実行時間の大部分を占めることになった前処理部，逆変換部の高速化は，実用に向けての最大の課題である．以下ではマルチコアプロセッサとグラフィックボード上での前処理・逆変換の高速化研究の現状について述べる．アクセラレータボード上での前処理・逆変換の高速化については「平成 19 年度研究実施報告書」で詳述したのでここでは割愛する．

従来の 2 重対角化アルゴリズムでは，行列 A に対して両側からハウスホルダー変換を繰り返し作用させることで 2 重対角化を行う．このアルゴリズムでは，計算量のほとんどを行列とベクトルの積，および行列の rank-1 更新と呼ばれる演算が占める．しかし，これらの演算では，$O(N^2)$ 個の要素を持つ行列データに対して同じく $O(N^2)$ 回の演算しか行わないため，原理的にデータの再利用性がなく，キャッシュメモリが有効に利用できない．そのため，メモリからのデータ転送速度がボトルネックとなり，プロセッサの演算性能が十分発揮できない．マルチコアでは，複数のプロセッサがメモリのバンド幅を奪い合うため，このボトルネックが更に深刻になり，十分な加速を得ることが困難になる．これを改善する手法として，rank-1 更新の部分を行列乗算に変形してキャッシュ利用効率を高めた Dongarra(1992)の方法があるが，行列ベクトル積の部分はそのままのため，効果は限定的である．

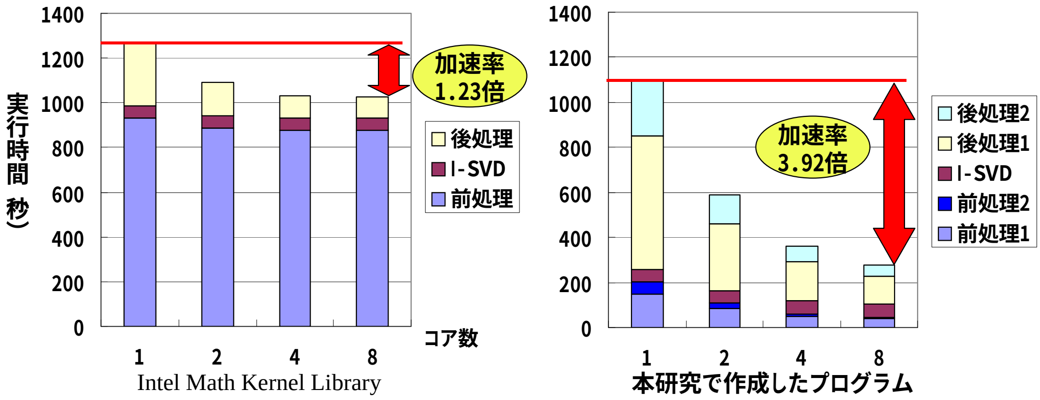
そこで本研究では，Bischof(1993, 1994)により提案された 2 段階型の 2 重対角化アルゴリズムに着目した．この手法では，A をまず帯幅 L の下三角帯行列 C に変換し，次に C を 2 重対角行列 B に変換する．同様に逆変換も 2 段階で行う．本手法では，逆変換の演算量が 2 倍になる代わりに，前処理，後処理の演算のほとんどがキャッシュ利用効率の高い行列乗算で実行できる．C から B への変換のみは，行列乗算で行えないが，その部分の演算量は $O(N^2L)$ と小さい．本アルゴリズムは，演算量が大幅に増加することから，従来はあまり使われてこなかった．しかし我々は，マルチコアプロセッサにおいてはメモリボトルネック解消の効果のほうが演算量増加のデメリットよりも大きいと考え，本アルゴリズムをマルチコア向けに実装した．実装に当たっては，C から B への変換も OpenMP を用いて並列化するなど，全体に渡って最適化を行い，アルゴリズムの性能が最大限に引き出せるよう注意を払った．

次にグラフィックボードを用いた高速化について述べる．画像処理を目的に開発された GPU(Graphic Processing Unit)の処理能力は近年急激に向上して，単精度演算においては CPU を大きく上回る性能を持っている．また，NVIDIA 社 GPU の大半では，同社が提供している GPU 向けの統合開発環境である CUDA(Compute unified device architecture)を用いて，GPU 上で計算を行うプログラムを書くことができる．CUDA 環境で GPU を使って行列計算を行う方法としては，プログラム全体を移植して nvcc コンパイラを使用する方法と，CUDA の BLAS(CUBLAS)を使用する方法との 2 通りがある．nvcc コンパイラを使用する方法では，複雑な計算にも GPU の使用が可能となるが，性能を引き出すためには様々な工夫が必要となる．そのため，本研究ではあらかじめ GPU 向けにチューニングされた CUBLAS を用いた．前処理には，CUBLAS で計算できない除算が含まれるため，除算の部分だけ CPU 上で計算し，それ以外は GPU 上で計算するよう実装を行った．その際，メインメモリと GPU メモリ間のデータ転送が最小限になるよう工夫した．以上により，前

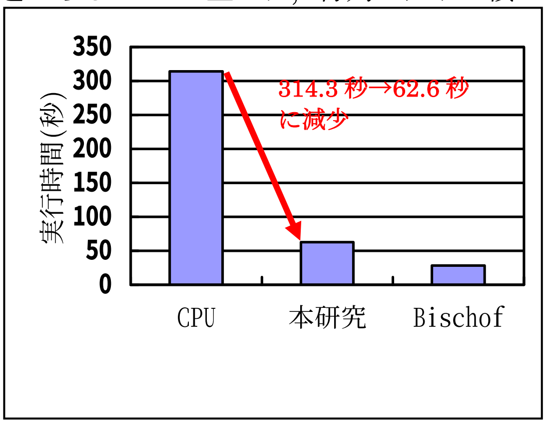
処理・逆変換部を GPU 上で行い，2 重対角行列の特異値分解を CPU で行うことで，密行列の特異値分解全体の高速化を図る．

(2) 得られた研究成果の状況及び今後期待される効果

本研究で作成したプログラムを 8 コア（4 コア Intel Xeon プロセッサ×2）のマシンで実行した結果を図に示す．比較のため，Intel プロセッサ向けでは現在最高水準の性能を持つ Intel Math Library（Dongarra のアルゴリズムを使用）の性能も載せた．図より，従来法では前処理がネックとなり，8 プロセッサでもほとんど加速が得られないが，我々のプログラムでは約 4 倍の加速が得られていることがわかる．したがって，本研究の成果はマルチコアプロセッサの性能を引き出すことができ，画像処理など大規模な特異値分解が必要な応用で高速化に大きな効果を発揮すると期待される．今後は，100 個以上のコアを持つメニーコアプロセッサに対しても本アルゴリズムを適用し，改良を行っていく予定である．



次に，GPU を用いた前処理の高速化の現状を報告する．本研究で作成したプログラムを，Nvidia GeForce8800GTX で N=5120 について実行した結果を右図で示す．本研究で作成した Dongarra のアルゴリズムによるプログラムは，CPU1 コアで実行したプログラムに比べて約 6 倍高速となった．しかし， Bischof のアルゴリズムを用いて GPU で計算したプログラム（名大・深谷氏提供）に比べれば低速である．GPU 上では，行列ベクトル積の能力が行列積に比べて非常に低いため，前処理に関しては行列積のみを用いた Bischof のアルゴリズムのほうが速いと考えられる．しかしながら，Bischof のアルゴリズムでは逆変換の計算量が Dongarra のアルゴリズムに比べて大きい．最新の数値計算用 GPU である Tesla においては，行列ベクトル積の，行列積に対する性能が向上している．そこで，今後は Tesla 上の前処理・逆変換全体について，Bischof と Dongarra のアルゴリズムでいずれが高速かを比較する予定である．



マルチコアプロセッサや GPU は比較的安価かつ省エネルギー型である．前処理・逆変換の高速化を通じて高速特異値分解法 I-SVD や dDC が身近な計算機環境で幅広く使われていくようになることが期待される．

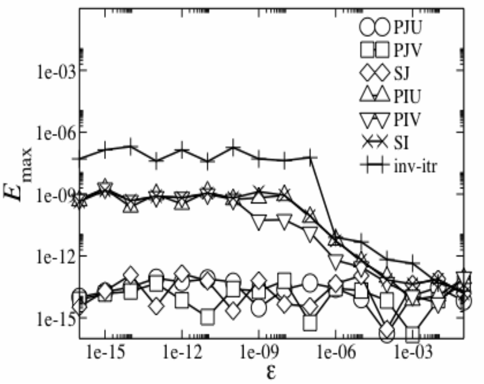
[6] **非線形 Newton 反復に基づく高精度特異ベクトル計算法の開発**

(1)実施の内容

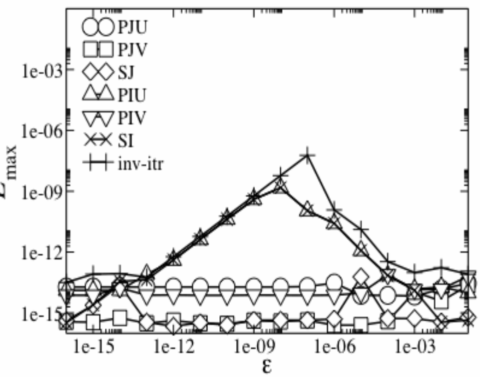
I-SVD と dDC のキーとなったのは国内 3 件，PCT3 件，国外 4 件の特許出願に至った dLV 型ツイスト分解による高速特異ベクトル計算である．コレスキー分解による連立一次方程式の直接解法の特異ベクトル計算への応用であるが，2 種類のコレスキー分解を「ひ

ねって結びつける」ところがアイデアである．これによりベクトル 1 本は僅か $O(N)$ の計算量で計算可能となる．しかし，クラスタをなす近接特異値をもつ行列では，特異ベクトルの逆反復と Gram-Schmidt 再直交化のため計算量は増大する．また，特異値が重複する場合は，原理的には複数の互いに直交する特異ベクトルは構成できない．そこで，中・小規模の悪条件（特異値が近接）行列の特異ベクトルの高精度計算に限定して，特異ベクトルの計算原理を根本から変更するに至った．dLV 型ツイスト分解を利用せず実行時間を度外視することとした．

新たな提案法では，非線形方程式の解法により左右の特異ベクトルを計算する．左特異ベクトル，右特異ベクトル，特異値の対がみたす連立方程式は未知変数の個数に対して条件式が１つ不足する．提案法では左特異ベクトルの存在範囲をある超平面上に制限することで条件式を追加する．このとき特異対がみたす連立方程式は非線形方程式となる．この非線形方程式をニュートン法により解くことで特異ベクトルを計算する．



一般にニュートン法は方程式の残差を零に近づける強力な縮小写像であるため，繰り返し反復計算を行うことで解の精度向上が保証される．ニュートン法は初期値を解の十分近くにとると局所的に２次収束することが知られている．しかし，大域的な収束条件は難しく，初期値と極限の関係を図示するとフラクタル状の図形となり，求めたい解に収束する初期値を選定することは非常に困難である．



提案法ではこの問題を解決するため逆転の発想を行う．すなわち，既に得られた特異ベクトルで生成される部分空間の直交補空間から法線ベクトルを選定する．超平面と既得の特異ベクトルは交点をもたないため，非線形方程式は既得の特異ベクトルを解にもたない方程式に変化する．この結果，任意の初期値でこのニュートン法の反復は既得の特異ベクトルに収束することはない．

この提案法の性能評価のため様々な種類の特異値の分布をもつ行列を作成し実験を行った．重複特異値をもつ行列，近接特異値をもつ行列，条件数が大きい行列，またこれらを組み合わせた行列により悪条件な行列を作成した．結果はすべての行列に対して提案法は高精度特異ベクトルが得られるという結果が得られた．

(2) 得られた研究成果の状況及び今後期待される効果

提案法は，逆反復法とは異なる原理と数値的な性質をもつ新しい特異ベクトルの反復計算法である．本研究でこれまで推進してきた dLV ツイスト分解と相補的に用いることで，目的に応じた情報処理が可能となる．また，行列のタイプごとの誤差評価などの理論研究の発展と，既存の方法と組み合わせた算法の開発を推進することで，さらなる高精度特異ベクトル計算法の発展につながると期待される．

特異ベクトル計算法	対象行列	実行速度	ベクトルの直交性		並列性
			良条件	悪条件	
dLV ツイスト分解	大規模 ２重対角	高速	良好	再直交化 が必要	高
非線形 Newton 反復	中小規模 正方行列	低速	良好	良好	低

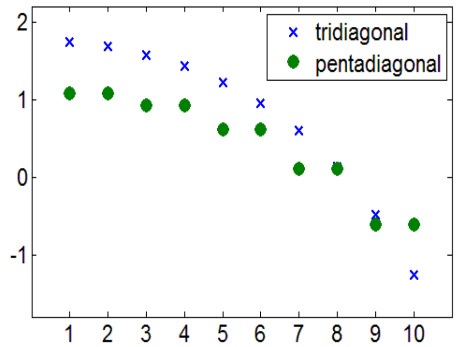
[7] 3 **重対角対称行列の条件数低減法の開発**

(1)実施の内容

　dLV 型ツイスト分解による高速特異ベクトル計算では，3 重対角対称行列に対する 2 種類のコレスキー分解を行うが，ツイスト分解の前進と後退代入において，誤差の蓄積が増大することが特異ベクトルの精度悪化の原因となっている．また，このような行列の条件数が大きいときコレスキー分解は数値的に不安定となることが知られている．そこで，3 重対角行列を係数とする連立 1 次方程式の直接解法である Cyclic Reduction(CR)法に注目し，5 重対角行列への変形（CR 変形）とその逆変形を用いて，条件数が大きい係数行列を複数の条件数の小さな行列に分解した上で dLV 型ツイスト分解を適用することが考えられる．

　これまでの研究において，ある一般的な条件のもとで，3 重対角対称な係数行列の条件数が確実に低減することを理論的に証明した．具体的には，与えられた 3 重対角行列 A から 5 重対角行列 C への CR 変形において，A における副対角成分の符号を反転させた行列 A^* を用いると，$C^{-1}=(A^{-1}+(A^*)^{-1})/2$ が成り立つことが示される．したがって，係数行列 A が正定値ならば，C の条件数は A の条件数より小さいことが証明される．また，C の最大固有値は A の対角成分の最大値以下となることもわかる．

　右の図では，例として対角成分が 3，副対角成分が $\sqrt{2}$ の Toeplitz 型 3 重対角行列に対して CR 変形を施したときの固有値の変化である．横軸は降順の固有値の番号で，縦軸は log(固有値)である．また，×と●はそれぞれ元の 3 重対角と変形された 5 重対角に対応する．これより，CR 変形によって係数行列の最大固有値は小さくなり，最小固有値は大きくなることが確認される．



(2)得られた研究成果の状況及び今後期待される効果

　CR 変形において，変形された 5 重対角行列を適当な行または列の並べ替え（逆変形）で，2 つの 3 重対角行列へ分割することができる．したがって，CR 変形と逆変形を繰り返して適用することにより，係数行列の条件数を低減させながら問題を小さく分割することが可能である．この性質を利用し，CR 変形は条件数が大きい大規模な 3 重対角行列の dLV 型ツイスト分解の前処理としての応用が期待される．CR 変形をツイスト分解の前処理に利用する研究は従来にないものである．

５．類似研究の国内外の研究動向・状況と本研究課題の位置づけ

研究実施の概要で述べたように，本研究には，１）理論研究・基礎研究，２）計算科学の先端研究，３）情報処理基盤の構築の側面がある．それぞれについて国内外の研究動向・状況に照らして本研究課題の位置づけと自己評価を行う．

　理論研究・基礎研究としては，従来にない数学的基盤に基づいて，相対精度の意味で高精度，高次収束の意味で高速，指数関数的収束の意味で高信頼な 2 重対角行列の特異値計算アルゴリズム mdLVs 法を新開発した点が最大の成果である．原点シフトのない簡単版 mdLVs である dLV 法は，年間数本のサーベイ論文からなるシリーズ Acta Numerica 2008 において詳しく紹介されている．また，mdLVs 法の原点シフト量の計算法についても出来合の公式は採用せず，一般化ニュートン下界の $O(N)$ 計算手法を新たに開発している．この結果，mdLVs 法の実装ルーチン DLVS は，4 種類のアルゴリズムを実装した米国の標準ライブラリの LAPACK のルーチンと比較して，相対精度では 2 分法(DSTEBZ)，実行時

間では dqds 法(DLASQ)に次ぐ性能をもち，いずれの点でも QR 法(DBDSQR)，分割統治法(DBDSDC)を上回る．この結果，mdLVs 法は国際水準にある速度と精度のバランスのとれた信頼性の高いアルゴリズムということができる．

計算科学の先端研究の成果としては，並列性の優れた高速特異ベクトル計算法の dLV 型ツイスト分解法の開発があげられる．基本的な発想はもともと 3 重対角行列を係数にする連立一次方程式の直接解法にあり，特異ベクトル計算への応用も既に qd 型ツイスト分解法としてあったものであるが， dLV 型ツイスト分解法はより高精度で，パラメータチューニングによる発展性がある． LAPACK ではツイスト分解型の特異ベクトル計算ルーチンはまだ公開されておらず，ツイスト分解法としては、現時点では dLV 型ツイスト分解を実装した逐次特異値問題の DBDSLV ルーチン，並列特異値分解の Parallel dDC が最も進んでいるといえる．

本研究が最終目標とした情報処理基盤の構築においては, 基本的なアイデアを国内, PCT, 国外特許出願し，ライセンス契約企業等を増やすことができる態勢を整えている．また，DLVS, DBDSLV, Parallel dDC の 3 種類の特異値計算，特異値分解ルーチンをほぼ完成させ，一部をバイナリコードとして学術目的に限って公開している．また，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前処理・逆変換の高速化研究と接続することで，実問題への応用も可能な段階に達している．実際，あるベンチャー企業において，ライセンシング契約の許で，既に医療画像処理やデータ検索への応用研究が開始されている．

６．研究実施体制

氏　名	所　属	役　職 （平成20年度）	研究項目	参加時期
中村佳正	京都大学 情報学研究科	教授 個人研究者	グループリーダー 研究の統括・対外交渉	平成 18 年 4 月～ 平成 21 年 3 月
小田久美子	京都大学 情報学研究科	研究補助員	全研究項目の研究事務補助	平成 18 年 4 月～ 平成 20 年 5 月
辻本　諭	京都大学 情報学研究科	講師（研究協力者）	可積分アルゴリズムの基礎研究	平成 19 年 8 月～ 平成 21 年 3 月
誉田太朗	京都大学 情報学研究科	博士 3 年生 研究補助員	ダブル分割統治法の並列化と並列特異値分解ルーチンの開発	平成 18 年 4 月～ 平成 21 年 2 月
山下　巧	京都大学 情報学研究科	博士 2 年生 研究補助員	mdLVs 法の原点シフトの改良の研究	平成 19 年 8 月～ 平成 21 年 3 月
坪井洋明	京都大学 情報学研究科	修士課程修了後，企業に就職	ダブル分割統治法による固有値分解とその並列化	平成 18 年 4 月～ 平成 20 年 2 月
片山幹基	京都大学 情報学研究科	修士 2 年生 研究補助員	左特異ベクトルの直接計算	平成 19 年 4 月～ 平成 21 年 2 月
王　担	京都大学 情報学研究科	修士 2 年生 研究補助員	ツイスト分解による固有ベクトルの直交性の改善	平成 18 年 4 月～ 平成 18 年 8 月 平成 20 年 4 月～ 平成 21 年 2 月
矢谷健一	京都大学 情報学研究科	修士 1 年生 研究補助員	多倍長演算による固有ベクトルの直交性の改善	平成 19 年 9 月～ 平成 21 年 3 月
豊川博己	京都大学	修士 1 年生	マルチコア環境におけ	平成 19 年 9 月～

	情報学研究科	研究補助員	る特異値分解の並列化	平成 21 年 3 月
鰺坂　明	京都大学工学部	情報学科４年生（受託研究費謝金学生）	マルチコア環境における特異値分解の並列化	平成 20 年 9 月～平成 21 年 3 月
岩崎雅史	京都府立大学人間環境学部環境情報学科	准教授（研究協力者）	dLV 法の漸近安定性，画像圧縮への応用，特許出願	平成 18 年 4 月～平成 21 年 3 月
木村欣司	新潟大学自然科学研究科	助教（研究協力者）	mdLVs 法の原点シフトの改良と DBDSLV ルーチンの開発	平成 19 年 4 月～平成 20 年 3 月
近藤弘一	同志社大学理工学部	准教授（研究協力者）	近接特異値に対する特異ベクトルの直交性の改善	平成 18 年 10 月～平成 21 年 3 月
高田雅美	奈良女子大学人間文化研究科	助教（研究協力者）	DBDSLV ルーチンの開発，特に，特異ベクトルの直交性の改善	平成 18 年 4 月～平成 21 年 3 月

７．研究期間中の主な活動

(1)ワークショップ・シンポジウム等

年月日	名称	場所	参加人数	概要
平成 18 年 4 月から 21 年 3 月	I-SVD プロジェクト定例チームミーティング	京都大学	10 名前後	メンバー各自担当する研究項目の現状報告，今後の研究活動の予定や方針などについての協議
平成 18 年 4 月 21-22 日	信号分離への応用に関するミーティング	NiCT	15 名	カオス符号，独立成分分析，高速特異値分解による信号分離方式の共同研究
平成 18 年 5 月 29 日	専用ボード上での行列乗算に関するミーティング	理化学研究所	15 名	FPGA および ClearSpeed ボード上での行列乗算に関する実験とミーティング
平成 18 年 12 月 19-20 日	第 4 回計算数学研究会	京都大学芝蘭会館，コープイン京都	約 50 名	高性能計算と行列固有値・特異値分解アルゴリズムに関する先端研究を議論する非公開の研究会
平成 19 年 3 月 12 日	信号分離と固定小数点演算に関するミーティング	京都大学	15 名	固定小数点演算のもとでの特異値分解についての共同研究
平成 19 年 3 月 13-14 日	CELL プログラミングセミナー	京都大学	約 50 名	CELL 上で行列演算を高速に実行するためのプログラミング講習会
平成 19 年 10 月 9-11 日	「数値線形代数における高精度計算」ワークショップ	京都大学	25 名	大石進一氏/荻田武史氏/Siegfried M. Rump 氏/中村佳正の講演からなる標記内容のワークショップ
平成 19 年 10 月 22 日	ドネツク物理工科研究所 Alexei Zhedanov，講演会	京都大学	20 名	Nevanlinna-Pick interpolation problem and biorthogonal rational

				functions
平成 19 年 10 月 27-29 日	第 5 回計算数学研究会	新潟市クロスパルにいがた	50 名	計算数学とその応用に関する最新の話題を集めた小研究会
平成 19 年 11 月 13 日	東京理科大学成島康史，講演会	京都大学	25 名	大規模な無制約最適化問題に対する非線形共役勾配法とその周辺
平成 20 年 1 月 15 日	North Carolina State University, Moody Chu，講演会	京都大学	20 名	Nonnegative Matrix Factorization に関する講演会
平成 20 年 2 月 15 日	Humboldt-Universit"at zu Berlin, C. Carstensen，講演会	京都大学	20 名	Convergence of Adaptive Finite Element Methods に関する講演会
平成 20 年 2 月 22 日	京都府立大学リントゥルオト正美，講演会	京都大学	20 名	量子化学計算を用いた機能性材料に関する研究
平成 20 年 2 月 22 日	京都大学多田野寛人，講演会	京都大学	20 名	周回積分による大規模一般化固有値問題の求解法とその応用
平成 20 年 6 月 6 日	東京理科大学福田亜希子，講演会	京都大学	20 名	離散ハングリーロトカ・ボルテラ系による固有多項式の数値的因数分解に関する最新成果の講演
平成 20 年 6 月 26 日	筑波大学朝倉順子，講演会	京都大学	20 名	周回積分を用いた非線形固有値問題の数値解法に関する最新成果の講演
平成 20 年 9 月 9-10 日	INTEL ソフトウェア開発セミナー	京都大学	約 40 名	ソフトウェア開発のための基礎事項から高度な知識(各種の開発ツール群の利用法)までを学ぶためのセミナー
平成 20 年 9 月 26-27 日	マルチコア／メニーコアと数値計算研究会	奈良県文化会館会議室	17 名	マルチコアプロセッサに対応した高速特異値分解に関する小研究会
平成 20 年 10 月 17 日	国立情報学研究所速水謙，連続講義	京都大学	25 名	クリロフ部分空間法による最小二乗問題の解法に関する連続講義
平成 20 年 11 月 21 日，25 日	MATLAB セミナー	京都大学	約 50 名	数値解析ソフトウェア MATLAB と付随するモデリング，シミュレーション，解析のためのツール Simulink の利用法を学ぶためのセミナー
平成 21 年 3 月 16-18 日	第 6 回計算数学研究会	ウェルハートピア熱海	33 名	計算数学とその応用に関する最新の話題を集めた小研究会
平成 21 年 3 月 25 日	Topics on Numerical Linear Algebra and High-Performance	京都大学 IEEE 関西支部との	約 30 名	Past, present and future of the LAPACK library に関す

	Computing	共催		る Julie Langou, Julien Langou 等講演からなる標記内容のワークショップ

(2)招聘した研究者等

氏　名（所属，役職）	招聘の目的	滞在先	滞在期間
R. Varga (Kent State Univ., Professor)	数値線形代数の歩みについての招待講演とともに，本プロジェクトの成果について議論する．	京都大学（経費の出所：京都大学）	平成 18 年 11 月 30 日- 12 月 1 日
後藤 和茂 (University of Texas at Austin, Research Associate)	GOTO BLAS を利用した高速線形計算について講義を受ける．	京都大学（経費の出所：京都大学）	平成 18 年 12 月 18-19 日
Moody T. Chu (North Carolina State Univ., Professor)	Acta Numerica 2008 のサーベイ論文執筆のための取材に応じ，本プロジェクトの成果の公開を進める．	京都大学（経費の出所：京都大学）	平成 19 年 3 月 5-10 日
Siegfried M. Rump (Hamburg University of Technology, Professor)	精度保証数値計算法の現状について解説を受ける．	京都大学（経費の出所：京都大学）	平成 19 年 10 月 9-11 日
C. Carstensen (Humboldt-Universit"at zu Berlin, Professor)	偏微分方程式の有限要素法の進展についての解説を受ける．	京都大学（経費の出所：京都大学）	平成 20 年 2 月 15-16 日
Julie Langou (University of Tennessee, Research Associate)	米国の標準ライブラリ LAPACK の現状について解説を受ける	京都大学（経費の出所：京都大学）	平成 21 年 3 月 25-26 日

8．発展研究による主な研究成果

(1)論文発表（英文論文　19 件　　邦文論文　12 件）

[1] 誉田太朗，高田雅美，岩崎雅史，中村佳正，分割統治法とツイスト分解法による新しい特異値分解アルゴリズム，情報処理学会論文誌，Vol. 47，No. SIG 7(ACS 14)，(2006)，81--90.

○[2] 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，Vol. 47, No.SIG 7(ACS 14), (2006), 91--104.

○[3] M. Iwasaki and Y. Nakamura, Accurate computation of singular values in terms of shifted integrable schemes, Japan J. Indust. Appl. Math., Vol. 23, (2006), 239--259.

[4] T. Konda, M. Takata, M. Iwasaki and Y. Nakamura, A new singular value decomposition algorithm suited to parallelization and preliminary, Proceedings of IASTED International Conference on Advances in Computer Science and Technology (ACST2006), 2006, pp. 79--85.

[5] M. Takata, K. Kimura, M. Iwasaki and Y. Nakamura, Performance of a new scheme for bidiagonal singular value decomposition of large scale, Proceedings of IASTED International Conference on Parallel and Distributed Computing and

Networks (PDCN2006), 2006, pp. 304--309.
[6] H. Tsuboi, T. Konda, M. Takata, M. Iwasaki and Y. Nakamura, Evaluation of a new eigendecomposition algorithm for symmetric tridiagonal matrices, Proceedings of The 2006 International Conference on Parallel and Distributed Processing Techniques and Applications (PDPTA2006), Vol. II, pp. 832--838.
[7] M. Takata, K. Kimura and Y. Nakamura, Verification of dLVv transformation for singular vector computation with high accuracy, Proceedings of The 2006 International Conference on Parallel and Distributed Processing Techniques and Applications (PDPTA2006), Vol. II, pp. 881--887.
[8] T. Konda, H. Tsuboi, M. Takata, M. Iwasaki and Y. Nakamura, Preliminary result of parallel double divide and conquer, Proceedings of The 2006 International Conference on Parallel and Distributed Processing Techniques and Applications (PDPTA2006), Vol. II, pp. 888--894.
[9] 近藤弘一，笹田昇平，小幡雅彦，岩崎雅史，中村佳正，Kakarala-Ogunbona の画像分解における特異値の近接度を低減するアルゴリズム, 情報処理学会論文誌, Vol. 48, No. SIG(ACS 15), (2007), 216--225.
[10] M. Iwasaki and Y. Nakamura, Positivity and stability of the dLV algorithm for computing matrix singular values, Proceedings of International Conference on Informatics Research for Development of Knowledge Society Infrastructure ICKS 2007, IEEE Computer Society Press, 2007, pp. 103--110.
[11] T. Konda, H. Tsuboi, M. Takata, M. Iwasaki, and Y. Nakamura, Parallelism of double divide and conquer algorithm for singular value decomposition, Proceedings of The IASTED International Conference on Parallel and Distributed Computing and Networks (PDCN 2007), Innsbruck, Austria, pp.393--398.
[12] M. Takata, T. Konda, K. Kimura and Y. Nakamura, Development of orthogonality of singular vectors computed by I-SVD algorithm, Proceedings of The IADIS International Conference on Applied Computing 2007, Salamanca, Spain, pp.437--442.
[13] T. Konda and Y. Nakamura, Parallel double Divide and Conquer and its evaluation on a super computer, Proceedings of The IASTED International Conference on Parallel and Distributed Computing and Systems (PDCS2007), Boston, USA, pp. 231--236.
○[14] M. Iwasaki and Y. Nakamura, Center manifold approach to discrete integrable systems related to eigenvalues and singular values, Hokkaido Math. J., Vol. 36(2007), 759--775.
[15] 高田雅美，木村欣司，中村佳正, 2 重対角行列の特異値分解におけるツイスト分解を用いた特異ベクトル計算法の改良，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（HPCS2007), 2007, pp. 103--110.
[16] T. Konda, H. Tsuboi, M. Takata, M. Iwasaki, and Y. Nakamura, Parallelism of double divide and conquer algorithm for singular value decomposition, Proceedings of the 25th IASTED International Multi-Conference on Parallel and Distributed Computing and Networks (PDCN2007), Innsbruck, Austria, 2007, pp. 393--398.
[17] M. Takata, T. Konda, K. Kimura and Y. Nakamura, Development of orthogonality of singular vectors computed by I-SVD algorithm, Proceedings of the IADIS International Conference Applied Computing 2007 (AC2007), Salamanca, Spain, 2007, pp. 437--442.
[18] M. Takata, K. Kimura, M. Iwasaki and Y. Nakamura, Algorithms for generating bidiagonal test matrices, Proceedings of The 2007 International Conference on Parallel and Distributed Processing Techniques and Applications (PDPTA2007), Vol. II, 2007, pp. 732--738.
[19] 坪井洋明，誉田太朗，岩崎雅史，木村欣司，高田雅美，中村佳正，ダブル分割統治法による対称 3 重対角行列の固有値分解，情報処理学会先進的計算基礎システムシンポジウム(SACSIS2007), 2007, pp. 121--128.
[20] 片山幹基，木村欣司，坪井洋明，岩崎雅史，中村佳正，I-SVD 法における左特異

ベクトル計算法の改善，情報処理学会先進的計算基礎システムシンポジウム (SACSIS2007), 2007, pp.148--149.
[21] Y. Yamamoto, T. Fukaya, T. Uneyama, M. Takata, K. Kimura, M. Iwasaki and Y. Nakamura, Accelerating the singular value decomposition of rectangular matrices with the CSX600 and the Integrable SVD, Parallel Computing Technologies (PACT 2007), V. Malyshkin ed., Lecture Notes in Computer Science 4671, Springer-Verlag, 2007, pp. 340--345.
[22] Y. Yamamoto, T. Miyata and Y. Nakamura, Accelerating the complex Hessenberg QR algorithm with the CSX600 floating-point coprocessor, Proceedings of Parallel and Distributed Computing and Systems (PDCS2007), 2007, pp. 204--211.
[23] T. Konda and Y. Nakamura, Parallel double divide and conquer and its evaluation on a super computer, Proceedings of Parallel and Distributed Computing and Systems (PDCS2007), 2007, pp. 231--236.
[24] 片山幹基，木村欣司，高田雅美，坪井洋明，岩崎雅史，中村佳正，悪条件 2 重対角行列のための特異値分解 I-SVD 法の改良，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(HPCS2008), 2008, pp. 9--16.
○[25] 片山幹基，木村欣司，高田雅美，坪井洋明，岩崎雅史，中村佳正，特異値分解法 I-SVD における左特異ベクトル計算部の改善，日本応用数理学会論文誌, 18, No.3, (2008), 389--407.
[26] 坪井洋明，誉田太朗，岩崎雅史，木村欣司，高田雅美，中村佳正, 固有値分解を目的としたツイスト分解法による分割統治法の改善,日本応用数理学会論文誌，18, No.4, (2008), 611--630.
[27] T. Konda, H. Toyokawa and Y. Nakamura, Parallel double divide and conquer and its evaluation on a multi-core computer, Proceedings of the IADIS International Conference Applied Computing 2008(AC2008), Algarve, Portugal, 2008, pp. 227--233.
[28] T. Konda, H. Toyokawa and Y. Nakamura, Evaluations of parallel double divide and conquer on a 16.core computer, Proceedings of The 2008 International Conference on Parallel and Distributed Processing Techniques and Applications (PDPTA2008), Vol. II, 2008, pp.790--796.
[29] 深谷猛，山本有作，畝山多加志，中村佳正，正方行列向け特異値分解の CUDA による高速化，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(HPCS2009), pp.107--114, 2009.
○ [30] T. Konda and Y. Nakamura, A new algorithm for singular value decomposition and its parallelization, Parallel Computing, Vol. 35(2009), 331--344.
[31] 矢谷健一，木村欣司，中村佳正，多倍長環境における最適 PWM 問題の数値解法, 日本応用数理学会論文誌, 19, No.1, (2009), 105--120.
[32] 近藤弘一，杉本昌平，岩崎雅史，非線形方程式の解法による行列の特異値分解アルゴリズム，応用数理学会論文誌, 19, No.1, (2009), 81--103.

(2)口頭発表
①学会
国内　34 件,　　海外　16 件
②その他
国内　18 件,　　海外　1 件

(3)特許出願（SORST 研究の成果に関わる特許（出願人が JST 以外のものを含む)）

	件数
国内出願	2
PCT 出願	3

海外出願	4
計	9

(4)その他特記事項

[1] 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(HPCS2006)，最優秀論文賞，誉田太朗，高田雅美，岩崎雅史，中村佳正， 分割統治法とツイスト分解法による新しい特異値分解アルゴリズム， 東京大学弥生講堂，平成 18 年 1 月 20 日

[2] 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(HPCS2009)，最優秀論文賞，深谷猛，山本有作，畝山多加志，中村佳正， 正方行列向け特異値分解の CUDA による高速化， 東京大学武田ホール，平成 21 年 1 月 23 日

[3] 研究補助者誉田太朗は，経済産業省最低資本金特例制度の認定を受け学生ベンチャー誉田商事（株）を設立し，京都府研究開発補助制度京都ウエルネス産業コンソーシアムウエルネスベンチャー事業化支援事業等の採択を受けて，本プロジェクトの成果の事業化を目指している（関連記事，日本経済新聞，平成 18 年 3 月 21 日）

[4] 研究補助者誉田太朗が進めている，高い並列性をもつ特異値分解アルゴリズムの PET 医療画像解析への応用研究は，京都大学 グローバル COE プログラム「知識循環社会のための情報学教育研究拠点」の若手リーダーシップ養成プログラムへの応募 25 件中の主席研究テーマと評価された.

[5] 専門書出版「可積分系の機能数理」，共立出版，現代数学の潮流シリーズ，中村佳正著，2006, pp. 1--208.

[6] 特許登録．発明者：中村佳正，岩崎雅史，阪野真也，発明の名称：行列の高速高精度特異値分解法，プログラムおよび装置，出願人：科学技術振興機構，出願日：特願 2005-514122 号（平成 17 年 6 月 1 日）持ち分：科学技術振興機構 100%，寄与率：中村佳正 33.4%，岩崎雅史 33.3%，阪野真也 33.3%，登録番号：特許第 4325877 号（平成 21 年 6 月 19 日）

[7] ソフトウェア公開

(1)公開日	2009 年 3 月
(2)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
(3)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
(4)URL	http://www-is.amp.i.kyoto-u.ac.jp/svd/index.html
(5)説明	・特異値分解は，情報検索，画像処理，最小 2 乗問題等に広く用いられている基本的かつ重要な行列演算です．DLVS コードは，本チームが開発した $O(N^2)$の計算量の高速性，高い相対精度，高い信頼性をもつ新しい特異値計算アルゴリズム mdLVs (modified dLV with shift) 法の実装コードです．原点シフト量の設定には，これも独自開発の一般化ニュートンシフトを採用しています．ランダムに生成した大規模行列についての数値実験では，DLVS は LAPACK の DSTEBZ に次ぐ高い相対精度，DLASQ に次ぐ高速性をもち，精度，速度，信頼性のすべてにバランスのとれた上 2 重対角行列特異値計算コードといえます． ・本チームは，さらに，新構想の特異値分解法 I-SVD (Integrable-Singular Value Decomposition)を開発しています．I-SVD 法では，行列の特異値分解を特異値計算部と特異ベクトル計算部に分け，それぞれ，mdLVs 法と dLV 型ツイスト分解法により計算します．DBDLSV コードは，特異値計算部に DLVS を組み込み，dLV 型ツイスト分解法による特異ベクトル計算部を付加した I-SVD 法の実装コードです．特異ベクトル計算部では，$O(N^2)$の計算量で高速に特異ベクトルを求めます．この結果，DBDSLV は全体を通じて $O(N^2)$の計算量で高速に上 2 重対角行列の特異値分解を実行

	します. ・DLVS コード, DBDLSV コードの利用については URL から「I-SVD ライブラリ利用規約」をダウンロードしてご参照下さい.
(6) 利用規約（部分）	・利用者は、本ソフトウェアを学術・研究・実験などのために使用することで得られた結果（データ・図表などを含む）を用いて、著書、論文、テクニカルレポート等の刊行物を制作する場合や、ウェブページ等に掲載する場合は、本ソフトウェアのプログラムを使用したことを明記しなければなりません。 ・本ソフトウェア・本ドキュメントの全部または一部を商業利用することは禁止されています。

９．結び

米国の標準ライブラリ LINPACK, LAPACK より優れたコードを我が国が独自に開発しようという動きは途絶えていた. MATLAB, Mathematica など世界中で使われている汎用ソフトウェアは LAPACK に準拠することをセールスポイントとしている. 無料で公開されている LAPACK の存在は, 結果として, 情報通信分野における米国の独占化を支えるものとなっている. 行列の特異値計算や特異値分解に限れば, 本研究の成果ルーチン DLVS, DBDSLV, Parallel dDC は米国の LAPACK, ScaLAPACK の対応するルーチンを上回る高速性や（ベクトルの直交性を除く）高精度性をもっている. 特異値分解は最小 2 乗法が現れる幅広い分野に応用を持ち, 成果ルーチンは大規模情報処理を可能にするものとして, 我が国の技術開発力・国際競争力の強化に貢献することができよう.

少し見方を変えると, 本研究は, 確率解析の金融工学への応用, 整数論の暗号への応用などに続く, 数学という基礎科学からの情報科学・計算科学への新しいブリッジを架けた研究ということができる. 従来の応用数学では基礎研究から実用化までを 1 つの研究計画にまとめても一度で高い評価を獲得することは困難で, 科学研究費を何度か獲得しながら時間をかけて研究を拡大させる他はなかった. しかし, 本研究では, さきがけ研究において, ポスドク研究員の雇用や PC クラスタの購入, 発展研究移行後も三谷総括のご支援のもとアクセラレータボード, マルチコアプロセッサ等を購入して検証実験を行った結果, 最新の計算機環境における特異値分解の高速化研究を, スピード感をもって推進することができた.

また, 戦略的創造研究推進事業「シミュレーション技術の革新と実用化基盤の構築」の領域会議における緊張する中での適切なアドバイスと励ましには大きく助けられた. 目標とした研究成果に到達することができたのも, 物心両面での暖かいご支援の賜である. 深く感謝したい.

最後に, さきがけ研究と発展研究の 6 年間で通算 6 回を開催した計算数学研究会（湯布院, 奥琵琶湖, 淡路島, 京都, 新潟, 熱海）の集合写真の一部を掲載させていただく. この研究会は, 本研究の現状について数値解析やハイパフォーマンスコンピューティングの専門家に対して時間をかけて解説し, 徹底した討論を通じて, 新たな展開のアイデア源としたものである. 参加者には毎回「シミュレーション」領域の CREST 研究者とその研究員, 研究補助者が多く含まれており, 相互の発展に資するものであった.


つづらお荘