

特異値分解法の可積分アルゴリズム INT-SVD

京都大学・情報学研究科 中村 佳正 (Yoshimasa Nakamura)

Graduate School of Informatics, Kyoto University

1 はじめに

行列の特異値分解は画像処理, 多変量解析法, データ検索などで用いられる重要な線形数値演算である. また, 特異値により線形計算の安定性の尺度となる条件数が定義される. 汎用パッケージライブラリの LAPACK では Golub-Kahan 法 (1965)[2] の改良型が採用されているが, 大規模問題では QR 法の平方根演算に起因して計算量が多い欠点がある. 収束加速のため減次過程や原点シフトを導入すれば精度が悪化しがちである.

最近, 岩崎・中村・辻本 [3, 4, 7] は, 可積分な力学系である Lotka-Volterra 系の離散化により得られた漸化式を用いて, 平方根演算と減算なしに加算と乗除算だけで特異値を計算するアルゴリズム (Integrable Singular Value Decomposition, INT-SVD) を定式化した. 予備的な実験では, ある 1000×1000 行列に対して, 同一精度で比較して, Golub-Kahan 法の改良型である Demmel-Kahan 法 (1990)[1] より約 60% 少ない計算量で特異値が得られている. Demmel-Kahan 法を組み込んだ LAPACK ライブラリで用いられている様々な計算量低減のテクニックに加えて, ソート機能に基づく減次, 差分ステップサイズの調整や INT-SVD 独自の原点シフトの導入で一層の加速も可能である. メモリやプログラムの条件判定が少ないなどの利点もある. 本稿では, 特異値計算・特異値分解の可積分アルゴリズム (INT-SVD) の成り立ちとその基本的性質について解説する.

2 特異値分解の Golub-Kahan 法

実対称行列 A は適当な直交行列 U により対角化されて $U^T A U = D$ と書かれる. ここに, D は A の固有値からなる対角行列, U^T は U の転置を表す. 対角化を $A = U D U^T$ と書いて A の固有値分解と呼ぶことにする. 行列の特異値分解は固有値分解を一般の長方形行列 A に拡張したものである. 任意の $l \times m$ 行列 A に対して以下のような l 次直交行列 U , m 次直交行列 V が存在する (特異値分解定理 [2]). 簡単のため $l \geq m$ とすれば,

$$U^T A V = \begin{pmatrix} \Sigma \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \Sigma = \text{diag}(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_m).$$

ここに, $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_m \geq 0$. Σ の対角成分 σ_k が A の特異値, 直交行列 U, V の各ベクトルを特異ベクトルという.

与えられた行列 A に対していかに特異値と特異ベクトルを計算するかが問題である. $A^T A = V \Sigma^2 V^T$ であるから, 非負定値対称行列 $A^T A$ の固有値分解により Σ と V が得られ, U は A, Σ, V から定まる. しかし, これを単に実行しただけでは計算量が大きく数値的な精度も悪い. そこで, 前処理として, 例えば, Householder 変換により $m \times m$ 行列 $A^T A$ を同じ固有値をもつ非負定値 3 重対角対称行列 $B^T B$ に変換した上で固有値計算する. ここで, B は

$$B = \begin{pmatrix} \beta_1 & \beta_2 & & & \\ & \beta_3 & \cdots & & \\ & & & \beta_{2m-2} & \\ & & & & \beta_{2m-1} \end{pmatrix}$$

なる上 2 重対角行列に表せることに注意する. Householder 変換とは $A^T A$ に対して高々 $m-2$ 個の直交行列を左右からかけることで 3 重対角化する手法で, 計算量は乗除算 $2m^3/3$ 回程度である. Golub-Kahan 法ではこの 3 重対角行列の固有値計算に中程度の規模の行列に対する “champion algorithm” として知られる QR 法を適用する. この結果, $B^T B$ は

$$(QQ'Q'' \dots)^T B^T B QQ'Q'' \dots = \Sigma^2$$

なる相似変形を通じて対角行列 Σ^2 に近づいていく. ここに, Q, Q', \dots は正則行列の QR 分解をくり返すことで得られる直交行列の系列. より高速性が必要な場合は, 原点シフトつき QR 法によって $B^T B$ を対角行列に近づける.

直交行列を生成することは数値安定である反面, すべてのベクトルの正規直交化を必要とし, 大量の平方根計算が不可避となる. 並列計算も困難である. Golub-Kahan 法は

- 1) 平方根計算が多く大規模行列向きではない.
- 2) 近接特異値やゼロ特異値がある場合は特に収束が遅い.
- 3) 減次過程や原点シフトの導入で精度が悪化しやすい.

などの問題点をもつが, 他に適当な方法がないためか, Golub-Reinsch(1970), Demmel-Kahan(1990) による改良を経て, 汎用パッケージ LAPACK やライブラリ SALS[5] を通じて, 特異値計算に広く使われてきた. しかし, 近年のデータ検索問題の大規模化, 医用工学における高精度画像処理などの中で新しい特異値分解法の必要性が高まってきている.

3 可積分系と数値計算アルゴリズム

1990 年代から可積分な力学系と優れた数値計算アルゴリズムの間の密接な関係が組織的に研究されるようになった. 表にすると Table 1 のようになる [6]. まず, 戸田方程式と

QR法の関係を皮切りに可積分系とアルゴリズムの関わりが次々と発見され、その後は、離散時間可積分系を用いた新しいアルゴリズムの開発に研究の力点が移っている。Table 1の●印がそのようにして開発されたアルゴリズムである。可積分な特異値分解アルゴリズム (INT-SVD) もそのひとつである。

Table 1.

	アルゴリズム	可積分系
タイプ1： 可積分系の	QR法 (固有値計算法)	戸田方程式
連続時間軌道上のアルゴ	Jacobi法 (固有値計算法)	2重括弧のLax型可積分系
リズム	Laplace変換の連分数展開●	半無限戸田方程式, Painlevé系
タイプ2： 可積分系の	べき乗法 (固有値計算法)	Rayleigh商の勾配系
線形レベルでの離散化	Karmarkar法 (最適化法)	Karmarkarの力学系
タイプ3： 可積分系の	qdアルゴリズム	離散時間戸田方程式
行列式解レベルでの離散	ε -アルゴリズム (加速法)	離散 potential KdV方程式
化	ρ -アルゴリズム (加速法)	離散円筒型 KdV方程式
	BCH-Goppa符号復号法●	有限体上の離散戸田方程式
	離散 Schur アルゴリズム●	離散 Schur flow
	T-連分数展開アルゴリズム●	離散相対論戸田方程式
	特異値分解アルゴリズム●	離散 Lotka-Volterra 系
タイプ4： 加法定理	算術幾何平均のアルゴリズム	楕円関数解をもつ可積分系
型アルゴリズム	算術調和平均のアルゴリズム●	双曲線関数解をもつ可積分系
	Newton-Halley-Nourein法	行列式解をもつ可積分系

INT-SVDの基礎には以下の著しい性質がある。

- 数理生態学に現れる Lotka-Volterra の微分方程式系の上 2 重対角行列 B の成分 β_k を初期値とする解は時間無限大で B の特異値に収束する。
- この Lotka-Volterra 系は力学系としては可積分系に属し、その時間変数の離散化によって特異値に収束する数列を生成する漸化式が見い出される。
- 漸化式は加法と乗除法からなるシンプルな構造をもち、任意の大きさの差分ステップサイズについて数列は特異値に収束する。

Runge-Kutta 法のような汎用的な差分法で Lotka-Volterra 系を離散化して漸化式を構成しても、差分ステップサイズを大きくとれないため収束が遅く、既存のアルゴリズムには太刀打ちはできない。なお、連続時間戸田方程式と QR 法の関係は 1982 年に W.W. Symes(U.S.A.) によって発見されたが、可積分系の構造を保つ離散化手法 (広田差分法) が日本以外では未発達のため、これまで可積分系によるアルゴリズム開発が諸外国で試みられることはなく、日本人研究者の独壇場となっている。

4 Lotka-Volterra系と特異値計算

本節では、上2重対角行列 $X(0) \equiv B$ を初期値とし、特異値に収束する解をもつ力学系 (Lotka-Volterra系) を導入する。行列の指数関数のQR分解

$$\exp(tB^\top B) = Q(t)R(t), \quad Q: \text{直交}, \quad R: \text{上3角}, \quad Q(0) = I = R(0), \quad (t \in \mathbf{R})$$

によって $X(0)$ の1パラメータ変形 $X(t) \equiv BQ(t)$ を定める。 $X^\top(t)X(t) = Q^\top(t)B^\top BQ(t) = R(t)B^\top BR^{-1}(t)$ だから、 $X^\top(t)X(t)$ と $B^\top B$ の固有値は一致し、 $X(t)$ と B の特異値は一致する。また、 $X^\top(t)X(t)$ はLax型可積分系

$$\frac{d(X^\top X)}{dt} = [X^\top X, \Pi(X^\top X)], \quad \Pi(X^\top X) \equiv (X^\top X)_+^\top - (X^\top X)_+$$

を満たす。ここに、 $[A, B] \equiv AB - BA$ 。このとき、もし B の特異値が単純 ($\sigma_1 > \sigma_2 > \dots > \sigma_m > 0$) であれば、正定値な3重対角対称行列 $X^\top(t)X(t)$ は極限 $t \rightarrow \infty$ で Σ に収束し、 $X(t)$ は B の特異値からなる対角行列 $\sqrt{\Sigma} = \text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_m)$ に収束する (M. Chu, 1986)。なお、Lax表示をもつことは力学系が可積分となるための十分条件と考えられ、具体的に書き下せる解や十分な数の保存量の存在とともに、可積分性を特徴づける性質とされている。

上2重対角行列 $X(t)$ についてLax型可積分系をみると

$$\frac{dX}{dt} = [X, \Pi(X^\top X)], \quad X(t) = \begin{pmatrix} x_1 & x_2 & & & \\ & x_3 & \ddots & & \\ & & \ddots & x_{2m-2} & \\ 0 & & & & x_{2m-1} \end{pmatrix} (t)$$

であるから、成分について書き下すと

$$\begin{aligned} \frac{dx_k}{dt} &= x_k (x_{k+1}^2 - x_{k-1}^2), \quad x_0(t) \equiv 0, \quad x_{2m}(t) \equiv 0, \\ \lim_{t \rightarrow \infty} x_{2k-1}(t) &= \sigma_k, \quad \lim_{t \rightarrow \infty} x_{2k}(t) = 0 \end{aligned}$$

となる。変数を $2t = t$, $x_k^2 = u_k$ とかけば (有限非周期) Lotka-Volterra系

$$\frac{du_k}{dt} = u_k (u_{k+1} - u_{k-1}), \quad (k = 1, 2, \dots, 2m-1)$$

を得る。まとめると、初期条件 $u_k(0) = \beta_k^2$, 境界条件 $u_0(t) = 0$, $u_{2m}(t) = 0$ のもとで、解は

$$\lim_{t \rightarrow \infty} u_{2k-1}(t) = \sigma_k^2, \quad \lim_{t \rightarrow \infty} u_{2k}(t) = 0$$

なる漸近的挙動をすることとなる。従って、このLotka-Volterra系は与えられた上2重対角行列 B の特異値を「学習」する能力があるといえる。

5 Lotka-Volterra 系の行列式解と離散化

簡単な微分方程式 $dh/dt = h$ は $h(t + \delta) - h(t) = \delta h(t)$ なる漸化式の $\delta \rightarrow 0$ の極限と考えられるが、逆に、微分方程式の時間変数を $t = 0, \delta, 2\delta, \dots$ と離散化し、微分を差分近似することでこの漸化式が得られたとみることもできる。一般に差分ステップサイズ δ が小さい範囲でないと離散方程式の解の挙動はもとの微分方程式の解を正確に表現しない。ここでは、特異値に収束する解をもつ Lotka-Volterra 系の離散化により、特異値計算に有用な漸化式を導出したい。特異値への収束性は離散化を経ても保たれねばならないが、そのような離散化を行うためには、Lotka-Volterra 系が可積分系、すなわち、解を具体的に書き下すことの可能な力学系であることがポイントとなる。以下では、まず、考えている Lotka-Volterra 系が行列式解をもつことを直交多項式の理論を用いて明らかにする。

測度関数 $\mu(\lambda)$, ($\lambda \in \mathbf{R}$), の定めるモーメント列 $s_k \equiv \int_F \lambda^k d\mu(\lambda)$, ($F \subset \mathbf{R}$), と正值な $k + 1$ 次 Hankel 行列式

$$D_k \equiv \begin{vmatrix} s_0 & \cdots & s_k \\ \vdots & & \vdots \\ s_k & \cdots & s_{2k} \end{vmatrix} > 0$$

を準備する。さらに、 k 次多項式 $p_k(z)$, $k = 0, 1, \dots$, を

$$p_0(z) = 1, \quad p_k(z) = \frac{1}{\sqrt{D_{k-1}D_k}} \begin{vmatrix} s_0 & \cdots & s_{k-1} & s_k \\ \vdots & & \vdots & \vdots \\ s_{k-1} & \cdots & s_{2k-2} & s_{2k-1} \\ 1 & \cdots & z^{k-1} & z^k \end{vmatrix}$$

により導入すれば、 $\mu(\lambda)$ に関する直交関係 $\int_F p_k(\lambda)p_l(\lambda)d\mu(\lambda) = \delta_{kl}$ が成り立ち、 $p_k(z)$ は (古典) 直交多項式と呼ばれる。Hankel 行列式の正值性は、逆に、モーメント列から測度関数が定まるための Toeplitz 条件として知られているもので、直交多項式については常に成立している。また、直交多項式は 3 項間漸化式

$$zp_k(z) = b_k p_{k+1}(z) + a_k p_k(z) + b_{k-1} p_{k-1}(z), \quad p_{-1} \equiv 0, \quad p_0 \equiv 1, \quad b_{-1} \equiv -1,$$

$$a_k = \frac{\hat{D}_k}{D_k} - \frac{\hat{D}_{k-1}}{D_{k-1}}, \quad b_k = \frac{\sqrt{D_{k-1}D_{k+1}}}{D_k} > 0, \quad \hat{D}_k \equiv \begin{vmatrix} s_0 & \cdots & s_{k-1} & s_{k+1} \\ \vdots & & \vdots & \vdots \\ s_k & \cdots & s_{2k-1} & s_{2k+1} \end{vmatrix}$$

を満たす。漸化式の係数 a_k, b_k もまたモーメント列のなす行列式を用いて表される。特に、 $p_{-1} \equiv 0, p_0 \equiv 1$ なる (初期) 条件を満たす $p_k(z)$ を第 1 種直交多項式、 $p_{-1} \equiv 1, p_0 \equiv 0$ なる $k - 1$ 次多項式 $p_k(z)$ を第 2 種直交多項式という。

さて、第 1 種直交多項式、第 2 種直交多項式をそれぞれモニック (最高次の係数が 1) 化して

$$P_k(z) \equiv b_0 b_1 \cdots b_{k-1} p_k(z), \quad Q_k(z) \equiv b_0 b_1 \cdots b_{k-1} p_k(z), \quad P_0 = 1, \quad Q_0 = 0$$

と書く。3 項間漸化式はそれぞれ

$$P_{k+1}(z) = (z - a_k)P_k(z) - b_{k-1}^2 P_{k-1}(z), \quad Q_{k+1}(z) = (z - a_k)Q_k(z) - b_{k-1}^2 Q_{k-1}(z)$$

となる. k 次有理関数 $Q_k(z)/P_k(z)$ について 3 項間漸化式を用いると Chebyshev 連分数

$$\frac{Q_k(z)}{P_k(z)} = \frac{s_0}{z - a_0 - \frac{b_0^2}{z - a_1 - \frac{\ddots}{z - a_{k-1}}}}$$

を得る. 一方, 有理関数 $Q_k(z)/P_k(z)$ は $z \rightarrow \infty$ で

$$\frac{Q_k(z)}{P_k(z)} = \frac{s_0}{z} + \frac{s_1}{z^2} + \cdots + \frac{s_{2k-1}}{z^{2k}} + O\left(\frac{1}{z^{2k+1}}\right)$$

と展開される. このことから, Stieltjes 積分の Chebyshev 連分数表示

$$\int_F \frac{d\mu(\lambda)}{z - \lambda} = \frac{s_0}{z - a_0 - \frac{b_0^2}{z - a_1 - \ddots}}$$

を得る. 直交多項式のなす有理関数 $Q_k(z)/P_k(z)$ はこの積分の $O(1/z^{2k})$ までの近似 (Padé 近似) を与えている. 行列式 D_j, \hat{D}_j の直接的な計算なしに $Q_k(z)/P_k(z)$ から $Q_{k+1}(z)/P_{k+1}(z)$ を計算することができれば Padé 近似の計算法として有用であるが, qd アルゴリズムや ε -アルゴリズムはまさにそのような機能をもつアルゴリズムである. なお, qd アルゴリズムによる特異値分解法が 1990 年代に Parlett 等によって精力的に研究されている.

qd アルゴリズムは (半無限) 戸田方程式として知られる可積分系の離散時間版と等価である. 戸田方程式も Lotka-Volterra 系と同様に Lax 型可積分系である. 直交多項式の観点から戸田方程式を導入しよう. 測度関数の 1 パラメータ変形

$$\mu(\lambda; t) \equiv e^{\lambda t} \mu(\lambda), \quad (t \in \mathbf{R})$$

によってモーメントの変形 $ds_k/dt = s_{k+1}$ を誘導する. 直交多項式の 3 項間漸化式を Jacobi 行列

$$J \equiv \begin{pmatrix} a_0 & b_0 & & \\ b_0 & a_1 & b_1 & \\ & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix}$$

を用いて $J\mathbf{p} = z\mathbf{p}$, $\mathbf{p} \equiv (p_0, p_1, \dots)^T$ と書く. 行列式 D_k, \hat{D}_k の 1 パラメータ変形を通じて Jacobi 行列の変形方程式

$$\frac{dJ}{dt} = [J, \Pi(J)], \quad \Pi(J) \equiv J_+^T - J_+$$

を得るが、これは戸田方程式の Lax 表示に他ならない。なお、戸田方程式が記述する直交多項式の 1 パラメータ変形は $d\mathbf{p}/dt = -\Pi(J)\mathbf{p}$ と書かれる。

一方、Lotka-Volterra 系は、対称な測度の場合に限定した直交多項式の 1 パラメータ変形方程式とみなせる。このクラスの直交多項式の例に Hermite 多項式 $s_k = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \lambda^k e^{-\lambda^2} d\lambda$, Legendre 多項式 $s_k = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \lambda^k d\lambda$ がある。対称な測度の場合、モーメントについて $s_{2k-1} = 0$ が成り立つ。この結果、Chebyshev 連分数の係数のうち a_k はすべてゼロとなる。奇数次のモーメントを $h_k \equiv s_{2k}$ とおけば、 $D_{2k} = H_{k+1,0}H_{k,1}$, $D_{2k+1} = H_{k+1,0}H_{k+1,1}$, ただし、

$$H_{k,j} \equiv \begin{vmatrix} h_j & h_{j+1} & \cdots & h_{j+k-1} \\ h_{j+1} & h_{j+2} & \cdots & h_{j+k} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ h_{j+k-1} & h_{j+k} & \cdots & h_{j+2k-2} \end{vmatrix}, \quad (j = 0, 1)$$

と書けることから、Chebyshev 連分数のもうひとつの係数 b_k^2 は Hankel 行列式の比

$$b_{2k}^2 = \frac{H_{k+1,1}H_{k,0}}{H_{k+1,0}H_{k,1}}, \quad b_{2k-1}^2 = \frac{H_{k+1,0}H_{k-1,1}}{H_{k,0}H_{k,1}}$$

となる。

続いて Lotka-Volterra 系の時間変数 t を測度関数の

$$\mu(\lambda; t) \equiv e^{\lambda^2 t} \mu(\lambda), \quad (t \in \mathbf{R})$$

なる変形によって導入する。モーメントの変形は $h_k(t) = \int_F \lambda^{2k} d\mu(\lambda; t) = \int_F \lambda^{2k} e^{\lambda^2 t} d\mu(\lambda; t)$ を通じて

$$\frac{dh_k}{dt} = h_{k+1}, \quad (k = 0, 1, 2, \dots)$$

と書ける。これにより連分数の係数の 1 パラメータ変形

$$b_{2k-2}^2(t) = \frac{H_{k,1}(t)H_{k-1,0}(t)}{H_{k,0}(t)H_{k-1,1}(t)} > 0, \quad b_{2k-1}^2(t) = \frac{H_{k+1,0}(t)H_{k-1,1}(t)}{H_{k,0}(t)H_{k,1}(t)} > 0$$

が引き起こされる。最後に $u_{2k-1}(t) \equiv b_{2k-2}^2(t)$, $u_{2k}(t) \equiv b_{2k-1}^2(t)$ と書けば、Chebyshev 連分数の係数の変形方程式として (半無限) Lotka-Volterra 系

$$\frac{du_k}{dt} = u_k(u_{k+1} - u_{k-1}), \quad (k = 1, 2, \dots), \quad u_0(t) \equiv 0$$

を得る。証明には $\hat{H}_{k,0} \equiv dH_{k,0}/dt$ とおくとき、

$$H_{k+1,0}H_{k-1,1} + \hat{H}_{k,0}H_{k,1} - \hat{H}_{k,1}H_{k,0} = 0, \quad (\text{Jacobi の行列式恒等式})$$

$$H_{k+1,0}H_{k-1,1} - H_{k,0}\hat{H}_{k,1} + H_{k,1}\hat{H}_{k,0} = 0, \quad (\text{Plücker 関係式})$$

が成り立つことを利用する。以上で Lotka-Volterra 系の $u_0(t) \equiv 0$ なる境界条件を満たす行列式解が求められた。関数 h_0 の選び方によっては境界条件 $u_{2m}(t) = 0$ を満たす行列式解を構成することもできる。

つぎに, Lotka-Volterra 系の可積分な離散化について述べる. 直交多項式の変換による離散化は Spiridnov-Zhedanov(1997) に依る. 対称な測度の定める直交多項式の 3 項間漸化式を二つ並べて

$$P_{k+1}(z) = zP_k(z) - u_k P_{k-1}(z), \quad (z \in \mathbf{C}), \quad P_{k+1}(\kappa) = \kappa P_k(\kappa) - u_k P_{k-1}(\kappa), \quad (\kappa < 0).$$

前後する k について計算して

$$P_{k+2}(z) = (z^2 - u_{k+1})P_k(z) - zu_k P_{k-1}(z), \quad P_{k+2}(\kappa) = (\kappa^2 - u_{k+1})P_k(\kappa) - \kappa u_k P_{k-1}(\kappa)$$

となるから, これらをまとめて Christoffel-Darboux 恒等式

$$P_k(z) = \frac{P_{k+2}(z) - \frac{P_{k+2}(\kappa)}{P_k(\kappa)} P_k(z)}{z^2 - \kappa^2}$$

を得る. この式を k 次多項式 $P_k(z)$ から核多項式とよばれる別の k 次多項式 $P_k(z)$ を定めるとみなし, 直交多項式の離散時間発展 ($n \rightarrow n+1$) を導入して

$$P_k(z; n+1) = \frac{P_{k+2}(z; n) - \frac{P_{k+2}(\kappa; n)}{P_k(\kappa; n)} P_k(z; n)}{z^2 - \kappa^2}$$

と書くことにする. 核多項式は $(\lambda^2 - \kappa^2)\mu(\lambda)$ なる測度に対応する直交多項式でもある. 一方, 3 項間漸化式 $P_{k+1}(\kappa; n) = \kappa P_k(\kappa; n) - u_k^{(n)} P_{k-1}(\kappa; n)$ から連分数の係数の時間発展

$$u_k^{(n+1)} = u_k^{(n)} \frac{P_{k-1}(\kappa; n) P_{k+2}(\kappa; n)}{P_k(\kappa; n) P_{k+1}(\kappa; n)}$$

を得る. ここで, 新しい従属変数 $U_k(n)$ を

$$U_k^{(n)} \equiv u_k^{(n)} \frac{P_{k-1}(\kappa; n)}{P_k(\kappa; n)} \Leftrightarrow u_k^{(n)} = U_k^{(n)} (\kappa - U_{k-1}^{(n)})$$

により導入すれば, $u_k^{(n)}$, $P_k(\kappa; n)$ を消去して漸化式

$$U_k^{(n+1)} = \frac{1 + \delta U_{k+1}^{(n)}}{1 + \delta U_{k-1}^{(n+1)}} U_k^{(n)}, \quad (k = 1, 2, \dots), \quad U_0^{(n)} = 0, \quad (\delta \equiv -1/\kappa > 0),$$

あるいは,

$$U_k^{(n+1)} - U_k^{(n)} = \delta (U_k^{(n)} U_{k+1}^{(n)} - U_k^{(n+1)} U_{k-1}^{(n+1)})$$

が得られる. $t = n\delta$ と保って連続極限 $\delta \rightarrow 0$ をとれば漸化式は $U_k^{(n)} \rightarrow u_k(t)$ で Lotka-Volterra 系に戻ることは明らか. この漸化式を離散時間 Lotka-Volterra 系と呼ぶ.

離散時間 Lotka-Volterra 系は連続時間 Lotka-Volterra 系と同じ Hankel 行列式解をもつ. キーとなるのはモーメントの変形方程式 $dh_k/dt = h_{k+1}$ の離散化

$$h_k^{(n+1)} - h_k^{(n)} = \delta h_{k+1}^{(n)}, \quad (k = 0, 1, 2, \dots)$$

である。これにより行列式解

$$U_{2k-1}^{(n)} = \frac{H_{k,1}^{(n)} H_{k-1,0}^{(n+1)}}{H_{k,0}^{(n)} H_{k-1,1}^{(n+1)}}, \quad U_{2k}^{(n)} = \frac{H_{k+1,0}^{(n)} H_{k-1,1}^{(n+1)}}{H_{k,1}^{(n)} H_{k,0}^{(n+1)}}, \quad H_{k,j}^{(n)} \equiv \begin{vmatrix} h_j^{(n)} & h_j^{(n+1)} & \dots & h_j^{(n+k-1)} \\ h_j^{(n+1)} & h_j^{(n+2)} & \dots & h_j^{(n+k)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ h_j^{(n+k-1)} & h_j^{(n+k)} & \dots & h_j^{(n+2k-2)} \end{vmatrix}$$

を得る。証明は連続の場合と同様、

$$\delta H_{k+1,0}^{(n)} H_{k-1,1}^{(n+1)} = H_{k,0}^{(n)} H_{k,1}^{(n+1)} - H_{k,1}^{(n)} H_{k,0}^{(n+1)}, \quad (\text{Jacobi の行列式恒等式})$$

$$\delta H_{k,1}^{(n)} H_{k-1,0}^{(n+1)} = H_{k-1,1}^{(n)} H_{k,0}^{(n+1)} - H_{k,0}^{(n)} H_{k-1,1}^{(n+1)}, \quad (\text{Plücker 関係式})$$

を援用する。\$U_0^{(n)} = 0\$ は明らか。もうひとつの境界条件については、もし \$H_{m+1,j}^{(n)} = 0\$ ならば \$U_{2m}^{(n)} = 0\$ となることに注意する。

線形関係式 \$h_j^{(n+1)} - h_j^{(n)} = \delta h_{j+1}^{(n)}\$ を利用した Hankel 行列式 \$H_{k,j}^{(n)}\$ の \$n \to \infty\$ での漸近的挙動の解析に基づいて、つぎの定理が証明されている。

定理 (解の収束定理 [3])

初期値を

$$U_{2k-1}^{(0)} = \frac{\beta_{2k-1}^2}{1 + \delta U_{2k-2}^{(0)}}, \quad U_{2k}^{(0)} = \frac{\beta_{2k}^2}{1 + \delta U_{2k-1}^{(0)}}$$

境界条件を \$U_0^{(n)} = 0, U_{2m}^{(n)} = 0\$ とする離散 Lotka-Volterra 系の解は、\$\delta\$ に依らず、\$n \to \infty\$ で

$$\lim_{n \rightarrow \infty} U_{2k-1}^{(n)} = \sigma_k^2, \quad \lim_{n \rightarrow \infty} U_{2k}^{(n)} = 0$$

なる漸近的挙動をもつ。ここに、\$\sigma_k\$ は \$\beta_k\$ のなす上 2 重対角行列 \$B\$ の特異値である。◇

\$\delta\$ に依存して初期値を設定する点の特徴である。ここでみたように、アルゴリズム開発には、行列式解という可積分系の構造を保つ離散化手法が重要である。汎用スキームでなくとも、また、計算スキームとしては 1 次の精度しかなくとも、漸化式の定める数列が大きな差分ステップサイズで連続系の解と同じ極限に収束することが要請されるからである。通常の力学系の数値積分法とは著しく異なる問題設定である。

6 可積分特異値分解アルゴリズム (INT-SVD) の特徴と数値計算例

前節の定理に基づいて可積分な特異値計算アルゴリズム (INT-SVD) が定式化される。INT-SVD による特異値計算は以下の表により分かりやすく説明される。境界条件を \$U_0^{(n)} = 0, U_{2m}^{(n)} = 0\$ とし、初期値を \$U_{2k-1}^{(0)} = \beta_{2k-1}^2 / (1 + \delta U_{2k-2}^{(0)})\$、\$U_{2k}^{(0)} = \beta_{2k}^2 / (1 + \delta U_{2k-1}^{(0)})\$ によって定め、計算を左上から右下の方向に隣接 4 項間の加法、乗除法によって実行する。

- INT-SVD Table -

	β_1	\cdots	β_{2k-2}	β_{2k-1}	β_{2k}	\cdots	β_{2m-1}	
$U_0^{(0)}$	$U_1^{(0)}$	\cdots	$U_{2k-2}^{(0)}$	$U_{2k-1}^{(0)}$	$U_{2k}^{(0)}$	\cdots	$U_{2m-1}^{(0)}$	$U_{2m}^{(0)}$
$U_0^{(1)}$	$U_1^{(1)}$	\cdots	$U_{2k-2}^{(1)}$	$U_{2k-1}^{(1)}$	$U_{2k}^{(1)}$	\cdots	$U_{2m-1}^{(1)}$	$U_{2m}^{(1)}$
$U_0^{(2)}$	$U_1^{(2)}$	\cdots	$U_{2k-2}^{(2)}$	$U_{2k-1}^{(2)}$	$U_{2k}^{(2)}$	\cdots	$U_{2m-1}^{(2)}$	$U_{2m}^{(2)}$
\vdots	\vdots		\vdots	\vdots	\vdots		\vdots	\vdots
0	σ_1^2	\cdots	0	σ_k^2	0	\cdots	σ_m^2	0

また, INT-SVD は以下の特徴をもつ.

- (1) 与えられた初期値 β_k から加法, 乗除法のみで行列 B の特異値計算が可能. 平方根計算は最後の $\sqrt{\sigma_k^2} = \sigma_k$ の計算のみである.
- (2) プログラミングにおいて, 条件判定文や if 文が少ない.
- (3) 変数の正值性, $U_{2k-1}^{(0)} > 0$ ならば $U_{2k-1}^{(n)} > 0$, が成り立ち, 丸め誤差が発生しても拡大伝播しない.
- (4) 漸近的挙動 $\lim_{n \rightarrow \infty} U_{2k}^{(n)} = 0$ は停止条件に利用可能.
- (5) 十分大きな n について特異値の近似値が大小順に並ぶというソート機能をもつ [3], すなわち,

$$\sqrt{U_1^{(n)}} > \cdots > \sqrt{U_{2k-1}^{(n)}} > \cdots > \sqrt{U_{2m-1}^{(n)}}.$$

- (6) 特異値分解 [4], 精度保証つき特異値計算 [4], 粒度の細かい並列化も容易である.
- (7) 差分ステップサイズ δ を大きくすれば収束は加速される [3].
- (8) 正值性を壊さずソート機能を失わない原点シフトが常に可能. 近接特異値やゼロ特異値があっても特異値計算が可能で, 大きく精度が悪化することはない.

最後に INT-SVD の数値計算例を与える.

数値計算例 1.

Fig. 1a は INT-SVD の特異値への収束の様子をプロットしたものである. 奇数番目の変数 $\sqrt{U_{2k-1}^{(n)}}$ が行列 B_1 の特異値に, 偶数番目 $\sqrt{U_{2k}^{(n)}}$ は 0 に収束する様子だけでなく, 特異値が $2k-1$ の逆順に並ぶソート機能も確認される. ソート機能は特異値を大きい順に必要な個数だけ計算したり, 小さな特異値に収束した変数を分割することで計算量の通減をする減次過程の導入に有効である. また, Fig. 1b では差分ステップサイズを $\delta = 1.0$

から $\delta = 10$ に大きくすることで収束が加速されている。理論上は δ が大きくなるに従って収束の速さは最近接特異値の平方に比によって定まるある値に近づく [4] が、この方法での高速化は精度とトレードオフの関係にある。

$$B_1 = \begin{pmatrix} 0.5 & 0.3 & 0 \\ 0 & 0.7 & 0.1 \\ 0 & 0 & 0.9 \end{pmatrix}$$

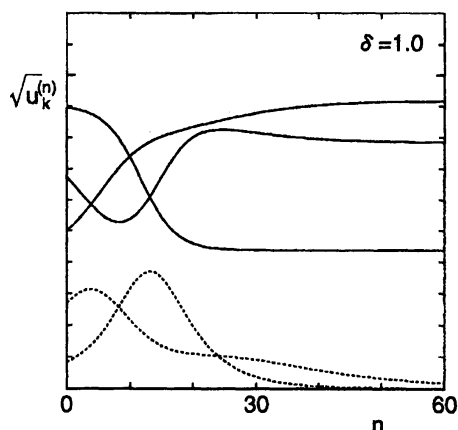


Figure 1a. $\delta = 1.0$

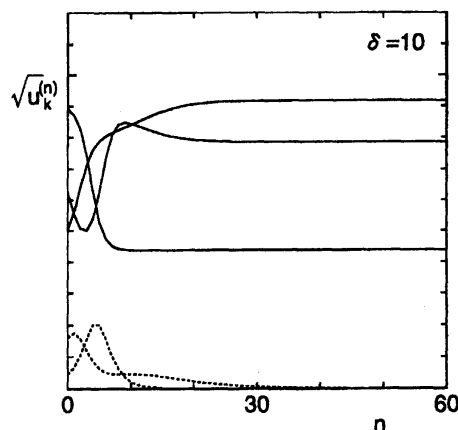


Figure 1b. $\delta = 10$

数値計算例 2.

高精度特異値計算法として知られる Demmel-Kahan(DK) 法 ([1], 1991 年 SIAM 賞) をとりあげ、同一精度で特異値に収束した場合に、可積分アルゴリズム (INT-SVD, $\delta = 1.0$) と計算量を比較する。計算環境は Intel Pentium 4, SSE2 浮動小数点命令, 倍精度計算で, $\max_k U_{2k}^{(N)} \leq 1.0 \times 10^{-6}$ で停止するものとする。計算の結果, 同一精度であれば約 60% 少ない計算量で 1000×1000 行列 B_2 の特異値が得られている (Table 2)。同一計算量で比較すれば, INT-SVD は Demmel-Kahan 法より高精度といえる。なお, 計算量は平方根計算のコストが除算と同程度とする最新のクロックサイクル数で換算している。

$$B_2 = \begin{pmatrix} 100 & 100 & & & \\ & 100 & \ddots & & \\ & & \ddots & 100 & \\ 0 & & & \ddots & 100 \\ & & & & 100 \end{pmatrix}$$

Table 2.

演算	クロック サイクル数	DK 法の演算回数	INT-SVD の演算回数
+	4	128,904,933	145,282,448
-	4	42,967,645	0
×	6	437,010,563	72,643,224
÷	35	128,902,935	72,641,224
$\sqrt{\quad}$	35	42,968,645	1000
	ウエイト合計	9,325,958,990	3,559,470,972
	計算量百分比	100.00	38.17

7 おわりに

本稿では、可積分特異値分解アルゴリズム (INT-SVD) のエンジンとなる漸化式、離散時間 Lotka-Volterra 系の導出について、可積分系、直交多項式、行列式解、離散化などの観点を交えながら解説した。連続時間および離散時間 Lotka-Volterra 系の解の特異値への収束性の証明、差分ステップサイズの大きさと収束速度の関係、ソート機能の証明、特異値分解法の定式化、精度保証付き特異値計算、変数の正值性を壊さない原点シフトの導入法、ライブラリレベルでの従来法との比較実験などについては別の機会に述べたい。

その後 champion algorithm と呼ばれるようになった QR 法 (Francis, Kublanovskaya 1961) が LR 法 (Rutishauser 1958) の数値安定な改良版であることはよく知られている。3重対角行列に対する LR 法は qd アルゴリズム (Rutishauser 1954) に同値であるが、qd アルゴリズムの漸化式は離散時間戸田方程式に他ならない。また、可積分特異値分解アルゴリズム (INT-SVD) と qd アルゴリズムの間には Miura 変換と呼ばれる変数変換が存在する [3, 7]。INT-SVD はこの変換を通じて変数の正值性を獲得し、qd アルゴリズムのもつ数値不安定性と決別することができた。INT-SVD はいわば新世代の qd アルゴリズムである。忘れ去られてきた Rutishauser の夢が INT-SVD の形で叶うことを願っている。

参考文献

- [1] J. Demmel and W. Kahan, Accurate singular values of bidiagonal matrices, *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, **11**(1990)873-912.
- [2] G. H. Golub and C. F. Van Loan, *Matrix Computations, Third Edition*, The Johns Hopkins Univ. Press, Baltimore, 1996.
- [3] M. Iwasaki and Y. Nakamura, On a convergence of solution of the discrete Lotka-Volterra system, *Inverse Problems*, **18**(2002)1569-1578.
- [4] M. Iwasaki and Y. Nakamura, Accurate singular value decomposition algorithm in terms of discrete Lotka-Volterra system, preprint, 2003.
- [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, 1982.
- [6] 中村佳正編著, 可積分系の応用数理, 裳華房, 2000 (第5章 可積分系とアルゴリズム).
- [7] S. Tsujimoto, Y. Nakamura and M. Iwasaki, The discrete Lotka-Volterra system computes singular values, *Inverse Problems* **17**(2001)53-58.