1P02

並列処理を意識した大規模行列のハウスホルダ型直交変換

○ 村上 弘

首都大学東京・数理情報科学専攻（〒 192-0397 八王子市南大沢 1-1）

要約: 行列数値計算に於いてハウスホルダ直交変換は非常に重要である．例えば，直交分解（ベクトルの組の正規直交化，行列の QR 分解），固有値解析（対称行列の三重対角化，非対称行列のヘッセンベルグ化），特異値解析（行列の上二重化），などに利用される．

今回は，行列のハウスホルダ QR 分解をとり，記憶参照の局所性や分散並列化適合性の向上を狙い，通常の QR 分解の操作の多段階化を行なう（以下は二段階の例であるが，再帰的に多段階化も可能）．

算法: いま行列 A を縦長で $m \times n$（$m \gg n$）とする．まず第一段回に於いて，A の縦方向を s 個に分割し，小行列を $A^{(1)}, A^{(2)}, \ldots, A^{(s)}$ とする．$A^{(i)}$ は $m_i \times n$ 行列で，$m = \sum_{i=1}^{s} m_i$，但し $m_i \geq n$ とする．$A^{(i)}$，$i = 1, 2, \ldots, s$ のそれぞれに対して独立に，左側から n 個の鏡映変換 $h_1^{(i)}, h_2^{(i)}, \ldots, h_n^{(i)}$ を順に適用して上三角化を行ない，得られる $m_i \times n$ 行列を $R^{(i)}$ とする（$H^{(i)} \equiv h_1^{(n)} \cdots h_2^{(i)} h_1^{(i)}$ と書けば，$H^{(i)} A^{(i)} = R^{(i)}$ である）．$R^{(i)}$ の行は先頭の n 個を除いて全て $\mathbf{0}$ である．

s 個の行列 $R^{(i)}$，$i{=}1, 2, \ldots, s$ の各先頭の n 個の行は，全部で sn 個ある．その sn 個の行を置換 σ で並べ換えて作った $(sn) \times n$ 行列を C とする．置換 σ の選択は任意で，恒等置換でも良いし，あるいは C の非零要素がなるべく右上に来るように選んでも良い．

第二段階目では，再び直交変換を用いて C を QR 分解して $C = VU$ とする．但し V は列直交な $(sn) \times n$ 行列で，U は $n \times n$ の上三角行列である．そのとき，行列 A の QR 分解が与える上三角行列も U であり，左側から作用して A を上三角化する直交変換は,（操作対象の行の添字を正しく考慮しながら）三種類の操作「直交変換 $H^{(i)}$，$i{=}1, 2, \ldots, s$」,「置換 σ」,「C の上三角化で用いた直交変換」をこの順で適用したものになる．

A の QR 分解 $A = QU$ の Q を求めるには次のようにする．V の sn 個の行を σ の逆置換 σ^{-1} で並べ換え，それらを順番に「連続する n 個ずつの行」の組 s 個に分ける．$i{=}1, 2, \ldots, s$ に対して第 i 番目の組を $m_i \times n$ 行列 $W^{(i)}$ の先頭の n 個の行として，残りの行には $\mathbf{0}$ を入れる．次に $H^{(i)}$ の逆変換を $W^{(i)}$ に作用させて，$m_i \times n$ 行列 $Q^{(i)} = H^{(i)T} W^{(i)}$ を作る（$A^{(i)}$ の三角化に用いた鏡映変換を保存しておき，$W^{(i)}$ の左側から $h_n^{(i)}, h_{n-1}^{(i)}, \ldots, h_1^{(i)}$ の順に作用させる）．求める Q は $Q^{(i)}$，$i{=}1, 2, \ldots, s$ を縦に並べた $m \times n$ 行列である．

A の QR 分解であることの証明： $A^{(i)}$ の直交変換 $H^{(i)}$ による上三角化が $R^{(i)}$ だから $A^{(i)} = H^{(i)T} R^{(i)}$．

定義から $C \equiv \sigma\pi \begin{bmatrix} R^{(1)} \\ R^{(2)} \\ \vdots \\ R^{(s)} \end{bmatrix}$，$C \equiv VU$，$\pi^T \sigma^{-1} V \equiv \begin{bmatrix} W^{(1)} \\ W^{(2)} \\ \vdots \\ W^{(s)} \end{bmatrix}$．ここで，$\sigma$ は sn 個の行の置換で，σ^{-1} はその逆置換．π は行列 $R^{(i)}$ の各々から先頭の n 個の行を抜き出して合計 sn 個の行を集める（一種の射影）操作で，π^T は sn 個の行を連続する n 個の行の s 組に分けて，それらを s 個の行列のそれぞれの先頭の n 個の行に格納し，他の行を $\mathbf{0}$ とする操作を表すもので，射影 π の引き戻し操作になり，容易に分かるように $\pi\pi^T = id$ が成立する．

すると，$\pi \begin{bmatrix} R^{(1)} \\ R^{(2)} \\ \vdots \\ R^{(s)} \end{bmatrix} = \sigma^{-1}C = \sigma^{-1}VU = \pi \begin{bmatrix} W^{(1)} \\ W^{(2)} \\ \vdots \\ W^{(s)} \end{bmatrix} U$．いま，$R^{(i)}$ と $W^{(i)}$ はどれも先頭の n 個の行以外は $\mathbf{0}$ なので，π を省いた関係 $R^{(i)} = W^{(i)}U$ が成り立つ．$Q^{(i)}$ の定義より $H^{(i)T}W^{(i)} \equiv Q^{(i)}$.
以上を総合すると $A^{(i)} = H^{(i)T}R^{(i)} = H^{(i)T}(W^{(i)}U) = (H^{(i)T}W^{(i)})U = Q^{(i)}U$.

よって，$\begin{bmatrix} A^{(1)} \\ A^{(2)} \\ \vdots \\ A^{(s)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Q^{(1)} \\ Q^{(2)} \\ \vdots \\ Q^{(s)} \end{bmatrix} U$，つまり $A = QU$ である（証明終り）．

上記の算法は，第一段階で小行列 $A^{(i)}$ を n 回の鏡映変換で完全に QR 分解して上三角化したものを集めて $sn \times n$ 行列 C を作り，第二段階で再び QR 分解することで，最終的な三角化を実現する．実用の価値があるのは，元の行列 A の行の個数 m に比べて途中の C の行数 sn を相当に縮小できる場合であるが，そうでない場合にも，多少複雑になるが，より一般性をもつ以下の方法を適用できる．小行列 $A^{(i)}$ を n 回の鏡映で完全に上三角化するのではなくて，n よりも小さい n' を選び（$n' = 1$ も可能），$A^{(i)}$ を n' 回の鏡映により先頭の n' 行目までを上三角化し，s 個の小行列から先頭の n' 行を（射影と置換で）集めて $sn' \times n$ 行列 C' を作り，C' に直交変換による QR 分解を適用して得られる $sn' \times n$ の上三角行列の sn' 個の行を（逆置換と逆射影で）s 個の各小行列の先頭の n' 行に戻せば，元の行列 A に対して途中 n' 行目までを上三角化した A' が得られる．次に，A' から先頭の n' 行を省いたものを考えて…，以下同様に適用すると，最終的に A の上三角化を得ることができる．小行列に n' 回の鏡映変換を作用させている際中には，他の小行列に対する計算領域との間の情報交換は発生しない．A を直交化したベクトルの組を構成するには，$m \times n$ の拡張単位行列から始めて，三角化の際に用いた鏡映変換の作用を全て逆順に行なえば良い．

複数の鏡映変換を貯めておいて各列にまとめて施したり，鏡映変換をブロック化して演算密度を高めるなどの列方向のブロック化の各種技法を，上記の方法に合わせて用いることも可能である．

数値実験例なども含めて，詳しいことは当日の会場のポスターで解説する．

参 考 文 献

[1] Bischof C. and Van Loan C.: The WY representation for products of Householder matrices, SIAM J. Sci. Stat. Comput., **8**, No.1, (1987), 2–13.

[2] Dongarra J. J., Hammarling S. J. and Sorensen D. C., LAPACK Working Note #2; Block Reduction of Matrices to Condensed Forms for Eigenvalue Computations, ANL/MCS-TM-99, (September, 1987).

[3] Golub G. H. and Van Loan C. F., Matrix Computations, 3rd ed., The John Hopkins University Press, Baltimore London, 1996.

[4] 村田 健郎, 線形代数と線形計算法序説, サイエンス社, 東京, 1986.

[5] Schreiber R. and Van Loan C.: A storage efficient YW representation for products of Householder transformations, SIAM J. Sci. Stat. Comput., **10**, No.1, (1989) 53–57.

[6] Stathopoulos A., and Wu K., A block orthogonalization procedure with constant synchronization requirements, SIAM J. Sci. Comput., **23**, No.6 (2002), 2165–2182.

[7] Wilkinson J. H. and Reinsch C., Handbook for Automatic Computation, Vol.II, Linear Algebra, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg New York, 1971.