

難しい問題の取り扱いも含めた精度保証付き数値計算法の確立

理工学研究所 柳澤優香
(理工学研究所 次席研究員)

1. 研究課題

精度保証付き数値計算とは、数値計算（解析的に解くことが難しい問題に対して、計算機で計算する方法）を行った際に生じる丸め誤差などのすべての誤差を厳密に評価し、数値計算によって数学的に正しい結果を高速かつ実用的に得る方法を言う。従来、数値計算は、計算過程中にエラーが生じずに完了すれば「正しい結果」という理論であったが、実際には有限桁計算を用いるため、丸め誤差を考慮する必要がある。特に、条件数の高い、難しい問題の場合、微小な誤差に対し得られる解の相対変化が大きくなってしまい、意味のある結果を得られにくい。意味のある結果を得ようとする多倍長計算が必要になり、実用的な実行時間で計算することは難しい。従って、

「難しい問題の取り扱いも含めた、精度保証付き数値計算理論」

を確立する。この研究によって、

- 高い信頼性を持つ結果を
- 実用的な計算時間で計算できるようになり、

理工学、産業の様々な分野へ応用することが可能であり、非線形問題に対する精度保証法の発展に大きく貢献することができる。

数値計算の基礎は、線形代数の問題（連立一次方程式の解法、固有値問題の解法）

である。これらの問題に対して、難しい問題の取り扱いも含めた精度保証付き数値計算理論の確立を研究目標とする。

1. 精度保証の計算量と精度を含めた、最適な連立一次方程式の解法の構築

従来、LU 分解を用いることを推奨されているが、

$$\text{最適な数値計算法} = \text{近似解の計算量} + \text{精度保証の計算量}$$

と考えたとき、数値安定性に優れたQR分解に基づく方法が最適な方法と言える。今回、難しい問題の取り扱いも含め、新しい線形連立一次方程式の解に対する精度保証付き数値計算法の確立を目指す。

2. 難しい問題の取り扱いも含めた、精度保証付き固有値計算理論の構築

学位論文「高精度逆コレスキー分解の収束解析」で用いた計算技術

- 前処理：行列を変形させ、良条件に改良。「無誤差変換」を利用。
- 反復改良：信頼性の高い結果が得られるまで繰り返す。

を応用し、高信頼・高速・頑健・高移植性なアルゴリズムの構築を目指す。

2. 主な研究成果

2.1 ハウスホルダーQR 分解を用いた連立一次方程式の数値解に対する精度保証法の確立

連立一次方程式の近似解を計算する手法は多数存在するが、部分ピボット選択付き LU 分解を用いた方法が一般的である。一方、ハウスホルダーQR 分解は数値安定性に優れた方法であるが、近似解を計算するには LU 分解の 2 倍の計算量を必要とするため、計算量の観点においては LU 分解の方にアドバンテージがある。しかしながら、精度保証の手間を合わせると、QR 分解を用いた精度保証法は、LU 分解を用いた方法と同程度の計算量で、かつ、精度が良いことを発見した。このアイデアに基づき、QR 分解に基づく連立一次方程式の精度保証付き数値計算法を提案し、アルゴリズムの誤差解析、及び、難しい問題(悪条件性問題)も含めて数値実験を行った結果を示しその考察を行った。当研究成果を[1-3]にて発表した。現在、論文を執筆中である。

[1] 柳澤優香, 大石進一, 野田ふみ: ハウスホルダーQR 分解を用いた連立一次方程式の数値解に対する精度保証法, 日本応用数理学会 2016 年度 年会, 北九州国際会議場, 2016 年 9 月.

[2] Yuka Yanagisawa, Shin'ichi Oishi, Fumi Noda: Verification method for linear systems via QR factorization, the 17th International Symposium on Scientific Computing, Computer Arithmetics and Verified Numerics, Sweden, Sep. 2016.

[3] Yuka Yanagisawa, Shin'ichi Oishi, Fast verification method for solving matrix equations by QR factorization, ANZIAM2017, South Australia, Feb. 2017.

2.2 超並列システム「京」向けの QR 分解アルゴリズムの提案

近年、スーパーコンピュータ向けのアルゴリズムは、通信回避型が主流である。コレスキーQR 分解はその点に優れた QR 分解があるが、数値的に不安定のため長らく実用化されてこなかった。我々は、高精度コレスキー分解での技術を応用し、コレスキーQR 分解の数値安定性を確保することに成功した。現在、京コンピュータ上において世界最速の高精度な QR 分解である。すでに当研究について英文論文誌を 2 件発行済みである。しかしながら、当手法は問題が難しい、つまり条件数が大きい問題の場合は適用できないというデメリットがあった。前述した「前処理」と「反復改良」技術を用いて、難しい問題の場合でも適用できるようにアルゴリズムの改良を行った。反復改良を行ったことで、より高精度な結果が得られるようにはなったが、反復回数が増えたことで計算時間がどれだけ増えるかを超並列システム確認する必要がある。実際に、8 コアのワークステーション上で実行した結果、他の QR 分解アルゴリズムと比較して最速であることを確認したが、今後、超並列システム「京」上でアルゴリズムを実行し、他のスーパーコンピュータ向けの QR 分解アルゴリズムと比較して最速であることを確認する予定である。現時点の研究成果を、[3]にて発表した。

[3] Yuka Yanagisawa, Takeshi Fukaya, RAMASESHAN Ramaseshan Kannan, Y. Nakatsukasa, Y. Yamamoto, S. Oishi, Shifted CholeskyQR for Computing the factorization of ill-conditioned matrices, The International Workshop on Numerical Verification and its Applications 2017, Miyako-jima, Mar. 2017.

3. 共同研究者

大石 進一 (早稲田大学 理工学術院 教授)
劉 雪峰 (新潟大学 准教授)
山本 有作 (電気通信大学 教授)
深谷 猛 (北海道大学 助教)
中務 佑治 (オックスフォード大学 助教)

4. 研究業績

4.1 学術論文

Yuka Yanagisawa, Takeshi Ogita, Sin'ichi Oishi: A modified algorithm for accurate inverse Cholesky factrization, 応用数理と計算科学における理論と応用の融合 RIMS 研究集会報告集 (2016).

4.2 総説・著書 特になし

4.3 招待講演 特になし

4.4 受賞・表彰 特になし

4.5 学会および社会的活動

[1] 2016 年日本応用数理学会年会 実行委員

[2] INVA2017 (The International Workshop on Numerical Verification and its Applications) 実行委員

[3] ICIAM (The International Council for Industrial and Applied Mathematics) 招致委員

[4] 小田原白梅ライオンズクラブ 科学コンテスト 2016, 審査員

<http://w3.waseda.jp/prj-owcontest/>

[5] 平成 28 年度「女子中高生夏の学校 2016～科学・技術・人との出会い～」,
サイエンスアドベンチャー I (実験・実習体験)「暗くなると LED が点灯する回路を作ろう！」
担当講師 (<https://www.nwec.jp/event/training/2016page03.html>)

5. 研究活動の課題と展望

高速かつ高精度な一般化固有値問題に対する精度保証付き数値計算法の確立

近年, 非線形偏微分方程式をはじめとする関数方程式の解に対する数値的検証法の過程で微分作用素の固有値問題が現れ, その離散化として行列の一般化固有値問題における固有値の厳密な評価が不可欠である. さらに固有値の存在と非存在の範囲を検討するとき, 固有値の順位を確定するのも重要である. 本研究の目的は, 行列の一般化固有値問題の特定の固有値 λ とその大きさの順位まで込めて, 厳密に評価する方法の構築である. 申請者は, Lehman-Goerisch の方法と修正コレスキー分解の事前誤差評価に基づき, 従来法の欠点である

- クラスタな固有値に対応できない,
- 数値安定性が確保されていない,
- 計算コストが大きい

などを克服することで, 大規模な疎行列に適用する高速かつ高精度な新しい解法を構築する予定である.