

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

研究代表者 柳澤 優香
(理工学術院総合研究所 次席研究員)

1 研究課題

線形計算とは、行列に関する数値計算のことであり、連立一次方程式と固有値の問題の二つに大別され、科学技術計算の基礎を担う有用な技術である。近年の科学技術計算は、計算機の演算能力やメモリが増大するにつれ、ますます大規模な問題を高速に解く方向へ発展しているが、四則演算などの基本演算を計算機上で実行すると、それぞれの演算は丸め誤差を伴った浮動小数点演算によって近似されるため、計算の際にどのくらいの丸め誤差が発生し累積し伝播するかを考慮する必要がある。例えば、密行列で100万元を超えるような大規模な行列を扱う場合、理論的には倍精度では計算精度が不足し、十分な有効桁数が得られなくなる可能性がある。また、特異に近い(悪条件)行列の場合、ごく小さな誤差による摂動に対して解の相対変化が大きくなり不安定である可能性が高い。何らかの方法で得られた数値計算の結果が一体どの程度の許容誤差の範囲内で正しいかということを示すことは計算自体と同様に重要であるのだが、例えば、演算桁数を多くして再度試すことで、丸め誤差の見当を大雑把につけることはできるかもしれないが、計算時間とメモリの両面でコストが大きい。それが大規模な問題に対してであれば莫大な計算時間がかかると予想できる。

「精度保証付き数値計算」とは、得られた近似解の周りに真の解が存在すること、及びその誤差範囲を保証する数値計算手法を言う。具体的には、通常の数値計算によって近似解を得た後に、区間演算によってその近似解の精度を保証する。これまで「計算複雑度(計算量)」、「計算精度」などの観点で改良が重ねられてきた。特に近年、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。従って、一般化固有値問題の数値解に対する高品質な評価を実用的な計算時間で安定的に得られる方法の開発が急務である。

本研究の目的は、次の行列の一般化固有値問題

$$Ax = \lambda Bx \quad (A: n \times n \text{ の実対称行列}, B: n \times n \text{ の実対称正定値行列}) \quad (1)$$

の特定の固有値 λ_i 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。計算機による一般化固有値問題の近似解法は既に複数存在している。例として、全ての近似固有値を得るコレスキーQR法や、特定の近似固有値を得る二分法や、大規模実対称疎行列向けのランチョス法がある。これらの方法は実用的であるが、得られる結果は丸め誤差と反復による切り捨て誤差があるので、計算結果は厳密には正しいとは言えない。

そこで、ある近似の固有対が与えられたとき、演算の結果を包含する区間演算を用いて、固有値の存在範囲を精度保証付き数値計算によって厳密に確定する方法を紹介する。例えば、大石らの方

法[2]はゲルシュゴリンの定理を利用して全ての固有値を精度保証することを目的としており、問題が小規模、かつ、(1)式のBが悪条件でない疎行列であれば、十分実用的である。

しかしながら、実際の応用上、例えば、有限要素法を利用して非線形微分方程式の解を検証するとき、メッシュ分割が細くなるほど 数万次元など大規模な行列が現れる場合が多く、大石らの方法のように全ての固有値の厳密な評価を行うには莫大な計算コストが必要である。実際の問題では特定の固有値のみ評価すれば十分であり、現れる問題のほとんどは疎行列(成分のほとんどが零である行列)であるが、大石らの方法は逆行列を経由するため疎行列には適用できない。また、修正コレスキー分解の事前誤差評価に基づいた方法[2]は高精度な結果を得ようとすると2分法のようにシフト量を何度も変更し試す必要があるのと、修正コレスキー分解は数値的に非常に不安定である手法と言う問題がある。また、Behneの方法[3]はLehmann-Goerischの定理を基本としたものだが、それらの定理を用いる上での前情報(ある固有値 λ_{i+1} の下限)をどのように得るかなど手法が明確でないと言う問題があった。本研究では、従来法の欠点である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。

[1] K. Maruyama, T. Ogita, Y. Nakaya, and S. Oishi: Numerical inclusion method for all eigenvalues of real symmetric definite generalized eigenvalue problem, IEICE Trans., J87-A (2004), pp. 1111-1119, (in Japanese).

[2] N. Yamamoto: A simple method for error bounds of eigenvalues of symmetric matrices, Linear Algebra Appl., 324 (2001), pp. 227-234.

[3] H. Behnke: The calculation of guaranteed bounds for eigenvalues using complementary variational principles, Computing, 47 (1991), pp. 11-27.

2 主な研究成果

2.1 実対称行列に対する最小固有値の下限の数値計算手法の確立

実対称行列に対する最小固有値の下限値を高速に保証することは、連立一次方程式の解の精度保証、一般化固有値問題の精度保証法(2.2を参照)などに応用できる。従来法として Rump の方法があり、INTLAB(MATLABの区間演算ライブラリー)に含まれていた。非常に実用的な方法であるが、高精度な値を得るにはCholesky分解のシフト量を何度も変更し試す必要があった。本研究ではCholesky分解の誤差解析を用いて適切なシフト量を導出し、コレスキー分解の事前誤差評価を用いて、1回の計算で実用的な結果を得る計算方法を開発した。本研究成果はスペインの学会でポスター発表を行い、一般化固有値問題の精度保証法(2.2を参照)に応用している。

[4]Y.Yanagisawa, X.LIU, S.Oishi, Accurate and Stability method for computing smallest eigenvalue of A with symmetric positive definite, International Workshop on Industrial Mathematics 2017, May.2017, Spain.

2.2 ある近似固有値に対する精度保証付き数値計算法の確立

本研究の方針としては、修正コレスキー分解に基づく方法[2]から Lehmann-Goerisch の定理に必要な固有値 λ_i の粗い評価を得る。計算を何度も試行せずに済む、非常に効率的な計算手法であり、ソースコードを開発した。具体的な計算手法は、次のような手順である。

- (1)式のBの最小固有値の下限を高速に算出(多少粗い評価でも問題ない)
- 数値的に安定したピボット付きブロック修正コレスキー分解を用いて、[2]に基づく方法から(1)式の近似固有値 λ_i の近傍にある真の固有値の粗い評価と大きさの順位を得る。この時、計算は

何度も試行せずに計算は一回のみで粗い評価を許容することとする.

3) 2 で得た前情報から Lehmann-Goerisch の定理を実行し, 真の固有値を含むシャープな区間を得る

これらの手法をテスト行列に適用した結果, 計算精度, 計算時間, 計算複雑度の観点から有用性を示すことができた.

3 共同研究者

大石進一 (早稲田大学 理工学術院 教授), Nicholas Higham (マンチェスター大学 教授)

劉雪峰 (新潟大学 准教授)

4 研究業績

4.1 学術論文

[1]柳澤優香, 任意精度演算を用いた反復改良による数値計算手法とその応用, 応用数理学会論文誌, to appear.

4.2 総説・著書 特になし

4.3 招待講演

[1]柳澤 優香, 劉 雪峰, 大石 進一, スパース行列に対する固有値の厳密計算手法の開発, 京都大学数理解析研究所・RIMS 共同研究 (公開型) 数値解析学の最前線 ---理論・方法・応用---, 京都大学数理解析研究所, 2017/11/9.

[2]Y. Yanagisawa, L. Xuefeng, S. Oishi, Robust guaranteed eigenvalue evaluation method, Dagstuhl seminar 17481, Germany, 2017/12/1.

[3] Y. Yanagisawa, T. Fukaya, R.Kannan, Y.Nakatsukasa, Y.Yamamoto, Shifted CholeskyQR for Computing the factorization of ill-conditioned matrices, SIAMPP 2018, Tokyo, Mar.2018.

4.4 受賞・表彰 特になし

4.5 学会および社会的活動

[1] SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing (PP18)実行委員

[2] The International Congress on Industrial and Applied Mathematics (ICIAM)2023 年大会組織委員. 日本で初めて招致に成功. 会場は早稲田大学早稲田キャンパスである.

[3] 東京都立戸塚高等学校で開催された The 4th Symposium for Women Researchers(2017/11/5)に参加し, ポスター発表を行った. 「コンピューターが計算間違い!? 信頼できる数値計算とは」

[4] 応用数理学会 代表会員

5 研究活動の課題と展望

主に以下の2点について研究を進める予定である.

1) 一般化固有値問題に対する精度保証付き数値計算法に関する応用

2 章の通り, 計算手法が確立したので, 実際に現れる問題に対して適用し, 有効性を検証する.

2) 任意精度演算を用いた計算手法の開発

半精度 (16 ビット), 倍精度 (64 ビット), 四倍精度 (ソフトウェアでのみ使用可能な 128 ビット) などの浮動小数点演算を組み合わせ, 計算時間を短縮し, エネルギー消費を最小限に抑え, 数値的に解き難い悪条件性の問題を精度良く解く数値計算法の開発を行う.

3) 重複した固有値に対する制度保証付き数値計算の検討

現在, 精度保証付き数値計算が「不可能」とされている, 縮退した固有値 (代数的重複度と幾何的重複度が異なる場合) を持つ固有値問題の精度保証法を研究する.