

任意精度演算を用いた数値計算手法とその応用

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

力学的運動から社会的・経済的現象に至るまで、様々な現象の予測や制御・最適化を行うに、計算機（コンピュータ）を用いた数値計算は欠かせない技術である。線形計算とは、行列に関する数値計算であり、連立一次方程式と固有値問題に大別され、科学技術計算の基礎を担う有用な技術である。

計算機（コンピュータ）では、浮動小数点数を用いて有限桁で演算を行う。浮動小数点数の計算で最も広く採用されている標準規格がIEEE 754 (IEEE Standard for Floating-Point Arithmetic) である。IEEE754標準では二進形式の**単精度 (single)**・**倍精度 (double)**と呼ばれる形式がある。一般的には、IEEE754倍精度が用いられ、実数を2進数64ビットで表現する。10進数でいうと16桁で表現される。理論的には小数点が無限に続く値でも、そのうちの有限個の桁数でその値を表すしかない。例えば0.1を2進数の小数で表すと、

$$0.1_{(10)} = 0.000110011001100110011..._{(2)}$$

と無限に続くが、コンピュータの内部では有限桁（IEEE754倍精度の場合は64桁、単精度の場合は32桁）で丸められている。このような場合には、真の値ではなく、近似値で表すことしかできない。このような計算結果を有限桁に丸めた際に生じる誤差を丸め誤差と言う。計算機を用いた数値計算は大変便利であるが、誤差の取り扱いに気をつけなければ、真の答えと全く違う結果を得てしまう場合もある。与えられた行列の解き難さを測る指標として条件数(condition number)がある。例えば、IEEE754倍精度で計算する場合、その行列の条件数が 10^{16} 以上であれば、数値計算で得られた解は1桁も正しい情報がない可能性がある。これを悪条件問題と言い、自然界においてもしばしば現れる。我々は悪条件行列を係数行列に持つ線形方程式の解を高い信頼性を持つ結果を高速に得る方法 [1, 2]を開発した。

近年、気候や気象のモデリングや機械学習において、倍精度の代わりに単精度や半精度などのより低い精度を使用することへの関心が非常に高まっている [3]。計算精度を低くすれば、計算環境によってはパフォーマンスの大幅な向上やエネルギー消費を抑えることが期待できるためである。しかしながら、計算精度を低くすれば扱える問題が限られてくるのは明らかである。実際、気象のモデリングで現れる問題は計算精度に対して悪条件になる場合があり、そのような問題に対して低精度で計算しても意味のある結果を得ることができない。我々は、低精度を活用した非対称行列に対する固有値問題のアルゴリズムの開発を行う。一般的な非対称固有値問題の解法は、LAPACKのルーチンに採用されているQR法があるが、計算量 $O(n^3)$ の反復が必要である。非対称固有値問題に対する計算時間の削減は世界中の研究者によって取り組まれている課題である。我々は、Ehrlich-Aberth iterationという別のアプローチから、従来より圧倒的に高速な実行時間で結果が得られるだけでなく、高い信頼性を持つ結果を得ることを目指す。

- [1] Y. Yanagisawa, T. Ogita, S. Oishi: Convergence analysis of an algorithm for accurate inverse Cholesky factorization, Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics, vol.31 (2014), pp.461-482.
- [2] Y. Yanagisawa, T. Ogita, S. Oishi: A modified algorithm for accurate inverse Cholesky factorization, Nonlinear Theory and Its Applications, vol.5, no.1 (2014), pp.35-46.
- [3] Carson. E., Higham, N.J., Accelerating the Solution of Linear Systems by Iterative Refinement in Three Precisions, SIAM Journal on Scientific Computing, 40[2] (2018), A817-A847.

2. 主な研究成果

2.1 任意精度演算を用いた非対称行列に対する固有値問題の解法

非対称な $n \times n$ 行列 A に対して, $Ax = \lambda x$ を非対称行列に対する固有値問題と言う. 固有値 λ は複素数で全ての固有値を求めることを考える. 一般的には, ヘッセンベルグ行列を経由して QR 法で計算するが, 前述の通り計算量が大きい. 我々は $O(n^2)$ の計算量である Ehrlich-Aberth iteration [4] に着目した. Ehrlich-Aberth iteration は, 非対称の三重対角行列に対する方法であり, Robustness なアルゴリズムとして知られている. 我々が開発するアルゴリズムの方針は次の通りである.

- 粗い精度の初期値を**低精度（単精度）**で計算
 - 初期値を基に, **倍精度**で Ehrlich-Aberth iteration を計算. 収束したら反復を停止する.
- 本方針を基に Matlab でアルゴリズムのプロトタイプを開発した結果, 低精度を用いても, 倍精度で固有値を計算した場合と同等の精度が得られた. また, 「京」上での性能評価は来年度以降を予定しているが, パフォーマンスの向上が期待できる. 以下は Matlab で行った数値実験結果である.
- <比較した方法の説明>

- ・QR method (D): 倍精度で QR 法を計算
- ・QR method (S) + Aberth(D): 初期値 を単精度で QR 法を計算し, 倍精度で Aberth を計算.
- ・Newton (S) + Aberth(D): 初期値を単精度で Newton 法[4]を計算し, 倍精度で Aberth を計算.

Table 1: Largest relative error for the eigenvalues of the test matrices.

Test matrices	methods	$n = 50$	$n = 100$	$n = 500$	$n = 1000$
Random	QR method(D)	$3.48 \cdot 10^{-16}$	$5.57 \cdot 10^{-16}$	$8.27 \cdot 10^{-15}$	$9.87 \cdot 10^{-15}$
	QR method(S)+Aberth(D)	$4.36 \cdot 10^{-16}$	$4.77 \cdot 10^{-16}$	$6.45 \cdot 10^{-15}$	$1.30 \cdot 10^{-15}$
	Newton(S)+Aberth(D)	$2.65 \cdot 10^{-16}$	$4.43 \cdot 10^{-16}$	$5.39 \cdot 10^{-15}$	$5.72 \cdot 10^{-15}$

Table 2: Average number of iterations per eigenvalue of the Ehrlich-Aberth iteration.

Test matrices	methods	$n = 50$	$n = 100$	$n = 500$	$n = 1000$
Random	QR method(D)	-	-	-	-
	QR method(S)+Aberth(D)	3	3	4	5
	Newton(S)+Aberth(D)	2	2	3	3.5

[4] D. A. Bini, et al., The Ehrlich-Aberth Method for the Nonsymmetric Tridiagonal Eigenvalue Problem, 2005.

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)
山本 有作 (電気通信大学 教授)
中務 佑治 (国立情報学研究所 准教授)
深谷 猛 (北海道大学 情報基盤センター 助教)

4. 研究業績

4.1 学術論文

[1] T. Fukaya, R. Kannan, Y. Nakatsukasa, Y. Yamamoto, Y. Yanagisawa, Shifted CholeskyQR for Computing the factorization of ill-conditioned matrices, to appear.

4.2 総説・著書

[2] 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.

4.3 招待講演

[3] Yuka. Yanagisawa, Sin' ichi. Oishi, Robust guaranteed eigenvalue evaluation method, ICIAM Workshop on Applied and Industrial Mathematics, May. 2018.

[4] Yuka Yanagisawa, Robust numerical inclusion method for eigenvalues of generalized eigenvalue problem, Numerical analysis and scientific computing seminars, Manchester University, Nov. 2018.

4.4 受賞・表彰

日本応用数理学会 2018 年度 年会 優秀ポスター賞

「シフト付き Cholesky QR 法を用いた一般内積空間における QR 分解の計算」

深谷 猛 (北海道大学), 中務 佑治 (国立情報学研究所), Kannan Ramaseshan (Arup, UK),

山本 有作 (電気通信大学), 柳澤 優香 (早稲田大学 理工学術院総合研究所)

4.5 学会および社会的活動

[1] 日本応用数理学会 代表会員

[2] The 18th International Symposium on Scientific Computing, Computer Arithmetic, and Verified Numerical Computations 組織委員

[3] 東京都立戸塚高等学校で開催された The 5th Symposium for Women Researchers (2017/11/5) に参加し, 次の題目でポスター発表を行った.

「近年の線形計算アルゴリズムの課題と研究動向」

5. 研究活動の課題と展望

我々は, 任意精度を用いた非対称行列に対する固有値問題の解法低精度演算を検討し, 低精度を用いても, 倍精度で計算した場合と同等の結果精度を得ることに成功した. 今後, 詳細な誤差解析やスーパーコンピュータ「京」上で, 性能評価を実施を予定している. 大幅なパフォーマンスの向上が期待できる. また, 本アルゴリズムを応用して, 任意精度を用いた特異値問題の解法を検討する予定である. 本研究は, Manchester 大学の Prof. Nick. Higham, Dr. Pierre Blanchard との共同研究である.