様　式　C－19、F－19－1、Z－19　（共通）

科研費
KAKENHI

科学研究費助成事業　　研究成果報告書

令和　　元 年　　6 月 21 日現在

機関番号：３２６５２
研究種目：基盤研究(B)（一般）
研究期間：2016～2018
課題番号：１６H０３９１７

研究課題名（和文）数値線形代数における高精度計算アルゴリズムの開発

研究課題名（英文）Development of accurate algorithms for numerical linear algebra

研究代表者

荻田　武史（Ogita, Takeshi）

東京女子大学・現代教養学部・教授

研究者番号：００３３９６１５

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費）　　14,510,000円

研究成果の概要（和文）：連立一次方程式に対して、係数行列の条件数に関わらず常に最良の近似解を得ることが可能な数値計算アルゴリズムについて研究を実施した。
対称系の固有値問題に対して、2次収束性を持つ固有ベクトルの反復改良アルゴリズムを開発した。これによって、常に最良の近似解を得ることが可能な数値計算アルゴリズムの開発も可能となった。また、非対称行列の特異値問題に対して常に最良の近似解を得ることが可能な数値計算アルゴリズムを開発した。
上記の提案アルゴリズムの効率を高めるため、高精度な行列積計算アルゴリズムの開発を行った。また、数値線形代数におけるテスト問題として、厳密解がわかる問題の生成法を開発した。

研究成果の学術的意義や社会的意義
科学技術計算では、理工学の様々な分野において多くの問題を数値線形代数の問題に帰着する。本研究では、そのような問題において、常に最良の近似解を得ることが可能な数値計算アルゴリズムについて研究を実施した。これは、数値線形代数をはじめとして数値計算の新たな方向性を開拓するものであり、本研究の遂行が計算科学の分野に与える学術的な意義は極めて大きい。そして、すべての科学技術計算における品質及び信頼性の向上に貢献する研究であるため、実用上も非常に有用である。

研究成果の概要（英文）：For linear systems, we conducted on numerical algorithms that can always obtain the best approximate solution regardless of the condition number of the coefficient matrix.
We developed an iterative improvement algorithm for eigenvectors with quadratic convergence for symmetric eigenvalue problems. This enables us to develop a numerical algorithm that can always obtain the best approximate solution. We also developed a numerical algorithm that can always obtain the best approximate solution of singular value problems for nonsymmetric matrices.
In order to improve the efficiency of the above proposed algorithms, we developed accurate matrix multiplication algorithms. In addition, as test problems in numerical linear algebra, we developed methods for generating problems with exact solutions.

研究分野：精度保証付き数値計算

キーワード：高精度数値線形代数

１．研究開始当初の背景

計算科学の基礎である数値計算は、近年の計算機の著しい発展に伴い、益々その重要性を増している。特に、数値線形代数は線形問題（連立一次方程式、固有値問題、特異値問題等）の数値解法に関する研究分野であり、計算科学において基本かつ重要な役割を担っている。この分野における研究成果は、J. Dongarra らによって 1979 年に公開されたライブラリ及びそのインターフェイスである基本線形計算用の BLAS (Basic Linear Algebra Subprograms)や、それをベースとした数値線形代数用の LAPACK (Linear Algebra PACKage)として結実し、現在もこれらのライブラリ実装は更新され続けており、デファクトスタンダードとして計算科学に関する様々な分野において世界中で利用されている。

一方、計算機における浮動小数点演算は有限桁計算であることから非常に高速である反面、計算結果には丸め誤差が含まれる。これは BLAS や LAPACK を用いたとしても例外ではない。したがって、数学的に正しいことでも計算機上では必ずしも正しい結果を得られないことがあり、結果の良し悪しは経験に頼るところが大きかった。このような問題の解きづらさを表す指標として条件数がある。条件数は、計算途中で生じる丸め誤差が最終的にどれだけ結果の精度を悪化させるかを表す。現在では、条件数が比較的小さい場合については、高精度な近似解を高速に得られる数値計算アルゴリズムが確立されているが、条件数が大きい場合については、近似解がどれくらい正しいのかは不明である。

このような背景から、数値線形代数において、条件数の大きさに関わらず常に最良の近似解を高効率に得ることが可能なアルゴリズムを開発することが、信頼性の高い計算科学の基盤を構築する上で重要であることがわかる。これまで本研究者らは浮動小数点演算におけるエラーフリー変換法の理論を提唱し、数値線形代数の基礎となる高精度内積計算アルゴリズム[1-3]及び研究分担者の尾崎氏と共同で高精度行列乗算アルゴリズム[4]を開発した。さらにそれらをベースとした革新的な高精度行列分解アルゴリズム（逆 LU 分解、逆 QR 分解）も提案してきた[5]。

＜引用文献＞

[1] T. Ogita, S. M. Rump, S. Oishi: Accurate sum and dot product, SIAM J. Sci. Comput., 26 (2005), 1955-1988.
[2] S. M. Rump, T. Ogita, S. Oishi: Accurate floating-point summation part I: Faithful rounding, SIAM J. Sci. Comput., 31 (2008), 189-224
[3] S. M. Rump, T. Ogita, S. Oishi: Accurate floating-point summation part II: Sign, K-fold faithful and rounding to nearest, SIAM J. Sci. Comput., 31 (2008), 1269-1302.
[4] K. Ozaki, T. Ogita, S. Oishi: Tight and efficient enclosure of matrix multiplication by using optimized BLAS, Numerical Linear Algebra Appl., 18 (2011), 237-248.
[5] T. Ogita: Accurate matrix factorization: Inverse LU and inverse QR factorizations, SIAM J. Matrix Anal. Appl., 31 (2010), 2477-2497.

２．研究の目的

数値線形代数の代表的な問題である連立一次方程式や固有値問題等に対して、条件数の大きさに関わらず常に最良の近似解を得ることを可能とする数値解法の理論を構築する。また、数値線形代数の基本計算（浮動小数点数の総和、ベクトルの内積計算、行列計算等）における高精度計算技術の高度化に関する研究も推進する。すなわち、本研究者らがこれまでに提唱してきた浮動小数点演算のエラーフリー変換法をさらに発展させることにより、高精度な基本線形計算アルゴリズムの高速化を目指す。これらは、前述の BLAS 及び LAPACK に精度保証と高精度計算の技術を新しく導入し、結果の信頼性の意味で高度に進化させることに相当するものである。本研究の概念図を図１に示す。

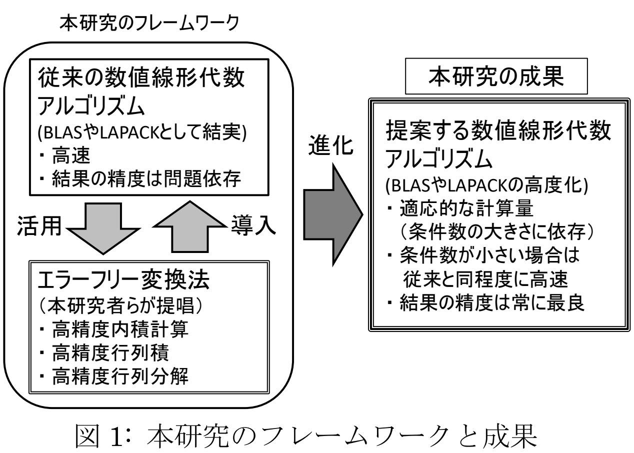

図 1: 本研究のフレームワークと成果

さらに、数値線形代数における「計算量」の再定義を行う。すなわち、従来の計算量とは、単純に「近似解を得るためのアルゴリズムにおける浮動小数点演算の回数」によって定まるものであったが、本研究では、計算量を「正しい解を得るために必要な浮動小数点演算の回数」と定める。これは、問題の正しい解を得るためには、条件数が小さい場合は計算量が少なく、条件数が大きい場合は計算量も多くなるからである。このような概念を導入することによって、これまで無関係に考えられていた条件数と計算量を結びつけ、計算科学における数値計算アルゴリズムの新しい評価基準を確立する。そして、従来、計算機の性能については、精度の保証がされていない数値計算アルゴリズムを実装し、その計算速度のみによって評価されていたところに精度の軸を新たに導入することになり、本来的な意味での計算機の性能評価が可能となる。

以上のようなアルゴリズムの設計思想に基づき、この新しい意味での計算量において最適、すなわち、問題の条件数に応じて計算量が適応的に変化するアダプティブな数値線形代数アルゴリズムの体系を確立する。

３．研究の方法

本研究は、数値線形代数に現れる問題に対して、条件数の大きさに関わらず常に最良の近似解を高効率に得ることが可能な数値計算アルゴリズムを開発することを最終目的としている。これを重層的に推進することを念頭に置いて計画する。その基本は

(1) アダプティブな数値線形代数アルゴリズムの開発

(2) エラーフリー変換に基づく高精度な基本線形計算アルゴリズムの開発

(3) 数値線形代数における計算量の再定義

の３つの研究項目に分けて戦略を考えている点にある。すなわち、それぞれの研究項目において１つの戦略がうまく行かない場合や、より優れた戦略が見つかった場合に、柔軟に戦略を変更できるようにして、全体として効率の高いアルゴリズムを確立できるようにする。

研究期間の内、上記(1),(2)については、研究開始から研究終了まで研究分担者とそれぞれの得意分野を活かしながら分担して取り組み、かつ共同で実施する。また、(3)については、研究代表者が研究開始から２年間で完成させる。

また、当初の研究計画通りに研究が進まずに行き詰った場合などに、個人で発展させたり解決する努力を惜しまないことは当然であるが、その上でさらに広い見識を持った研究者と議論することによって、アイディアが大きく発展したり、適切なアドバイスを受けることができたり、あるいは考える必要のない事柄を削減することで効率的に研究を進められる。これまでの研究活動によって、研究代表者は、日本はもとよりドイツ、フランスを含めて国内外に、そのような議論が可能な多くの優れた研究者仲間がいるため、そのような研究者達と積極的に議論を交わしていく。

４．研究成果

(1) 連立一次方程式に対して、係数行列の条件数に関わらず常に最良の近似解を得ることが可能な数値計算アルゴリズムについて研究を実施した[雑誌論文 3,学会発表 16-18]。一般の実行列について、近似解を求めるための有力な数値計算アルゴリズム（LU 分解）と近似解の精度を高めるための反復改良法、及び近似解の高速な精度保証アルゴリズムが知られているため、それらをベースとした。条件数が大きい場合は、通常の数値計算アルゴリズムでは精度の高い近似解を得ることができないため、本研究者らが開発した高精度な行列分解アルゴリズムを導入した。これによって、条件数を低減させながら高精度な近似解を得ることが可能となった。実対称正定値行列については、ブロック計算を有効利用することにより、誤差限界の評価が改善されることを示すことができた。

(2) 対称系の固有値問題に対して、ニュートン法系統の 2 次収束性を持つ固有ベクトルの反復改良アルゴリズムを開発した[雑誌論文 1,2]。これによって、常に最良の近似解（固有値及び固有ベクトル）を得ることが可能な数値計算アルゴリズムの開発も可能となった。対称系の固有値分解については、現在、ハウスホルダー変換による三重対角化を用いる方式が主流であり、それに基づいて様々な数値計算アルゴリズムが提案されているが、本研究における基本方針として、特定のアルゴリズムに依存しない、一般的な高精度化の方式を考え、汎用性を確保した。すなわち、解の初期値を既存の方式で求め、反復改良によって解の精度を改善する方式を考案した。

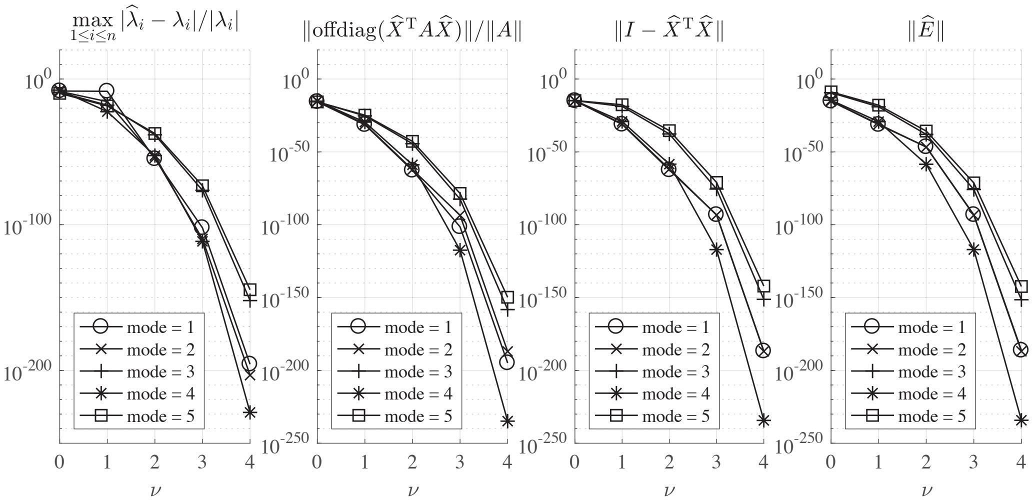

図 2: 固有値・固有ベクトルの誤差の収束履歴

(3) 非対称行列の特異値問題に対して常に最良の近似解（特異値及び特異ベクトル）を得ることが可能な数値計算アルゴリズムを開発した[学会発表 1,3]。開発したアルゴリズムは、(2)で開発した対称系の固有値問題と同様に、ニュートン法系統の高い収束性を持つアルゴリズムである。ここでは、対象を正方行列に限らず、矩形行列の場合にも適用可能なアルゴリズムを開発した。そのためには、対称系の固有値問題に対するアルゴリズムを単に拡張するだけでは不足しており、その対処方法及び妥当性について理論的な解析が必要であった。密行列に対する特異値分解では、現在、ハウスホルダー変換による二重対角化を経由する方式が主流である。それに対し、本研究の基本方針は、特定のアルゴリズムに依存しない、汎用的な高精度化のフレームワークを構築することである。そのため、解の初期値を任意の既存の方式で与えることを想定し、反復改良によって解の精度を改善する方式を考案した。数値実験において、様々な特異値の分布を持つ行列に対して開発したアルゴリズムを適用し、その有効性を確認した。

(4) 上記で開発した反復改良アルゴリズムを統合した数値線形代数におけるアルゴリズムの統一的な体系を構築し、その体系が、連立一次方程式、固有値問題、特異値問題等の様々な問題に適用可能であることを示した。そして、そのような新しい数値計算アルゴリズムをもとに、計算量の再定義を行った。

(5) 上記の提案アルゴリズムの効率を高めるため、高精度な行列積計算アルゴリズムの開発を行った[雑誌論文 5,学会発表 9,15]。特に、隣接浮動小数点丸めという性質（これは真値に対して、隣接する浮動小数点数のどちらか一方の数値結果）を満たす、非常に高信頼でかつ高速な行列積アルゴリズムを提案した。問題が良条件な場合、提案手法は近似計算の数倍程度の計算時間により結果を求められることを示した。また、提案アルゴリズムの精度保証付き数値計算への適用に向けて、丸めモードを固定した高速な区間演算方法を開発した[雑誌論文 6]。

(6) 数値線形代数におけるテスト問題として、厳密解がわかる問題の生成法を開発した[雑誌論文 4,学会発表 2,5,11-14,19]。これにより精度保証プログラムの正しさの検証が可能となった。連立一次方程式や固有値問題に関して、高精度計算アルゴリズムを提案した場合、その厳密な検証法が必要になる。真の解が事前にわかる連立一次方程式、真の固有値（特異値）が事前にわかる行列の生成法について研究した。提案手法は連立一次方程式においては行列・ベクトル積のみ、固有値問題については行列積１回またはそれ以下の計算コストで連立一次方程式や行列を生成可能である。

５．主な発表論文等

〔雑誌論文〕（計６件）

[1] T. Ogita, K. Aishima: Iterative refinement for symmetric eigenvalue decomposition II: clustered eigenvalues, Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics, published Online, Feb 22, 2019. [DOI: 10.1007/s13160-019-00348-4]（査読付）
[2] T. Ogita, K. Aishima: Iterative refinement for symmetric eigenvalue decomposition, Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics, Vol. 35, Issue 3 (2018), pp.1007-1035. [DOI: 10.1007/s13160-018-0310-3]（査読付）
[3] Y. Kobayashi, T. Ogita, K. Ozaki: Acceleration of a preconditioning method for ill-conditioned dense linear systems by use of a BLAS-based method, Reliable Computing, Vol. 25 (2017), pp.15-23. [DOI: 10.1587/nolta.7.374]（査読付）
[4] K. Ozaki, T. Ogita: Generation of linear systems with specified solutions for numerical experiments, Reliable Computing, Vol. 25 (2017), pp.148-167.（査読付）
[5] K. Ozaki, T. Ogita, S. Oishi: Error-free transformation of matrix multiplication with a posteriori validation, Numerical Linear Algebra with Applications, Vol. 23, Issue 5 (2016), pp.931-946. [DOI: 10.1002/nla.2061]（査読付）
[6] S. M. Rump, T. Ogita, Y. Morikura, S. Oishi: Interval arithmetic with fixed rounding mode, Nonlinear Theory and Its Applications, IEICE, Vol. 7, No. 3 (2016), 362-373. [DOI: 10.1587/nolta.7.362]（査読付）

〔学会発表〕（計 19 件）

[1] T. Ogita: Iterative Refinement for Singular Value Decomposition, SIAM Conference on Computational Science and Engineering (CSE19), Spokane Convention Center, Spokane, Washington, USA, 2019.
[2] K. Ozaki, T. Ogita: Test matrices with specified solutions for numerical linear algebra, 2019 Conference on Advanced Topics and Auto Tuning in High-Performance Scientific Computing, National Sun Yat-sen University, Kaohsiung, Taiwan, 2019.
[3] T. Ogita, K. Aishima: Iterative Refinement for Singular Value Decomposition, The 18th International Symposium on Scientific Computing, Computer Arithmetic, and Verified Numerical Computations (SCAN 2018), Waseda University, Tokyo, 2018.

[4] T. Terao, K. Ozaki, T. Ogita: Rounding Error Analysis of QR Decomposition Using LU Factors Based on CholeskyQR Algorithm, IX Pan-American Workshop Applied Mathematics & Computational Science, Melia Varadero Hotel, Varadero, Cuba, 2018.
[5] K. Ozaki, T. Ogita: Test Matrices for Symmetric Eigenvalue Problems Using Weighing Matrices, IX Pan-American Workshop Applied Mathematics & Computational Science, Melia Varadero Hotel, Varadero, Cuba, 2018.
[6] T. Ogita: Development of Verified Numerical Computations in High-Performance Computing Environments, 2018 Conference on Advanced Topics and Auto Tuning in High-Performance Scientific Computing (ATAT in HPSC 2018), National Cheng Kung University, Tainan, Taiwan, 2018.
[7] T. Ogita: Accurate and Verified Numerical Computations with HPC, SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing 2018 (SIAM PP18), Waseda University, Tokyo, Japan, 2018.
[8] 坂本 篤志, 尾崎 克久: 丸め誤差を利用した計算順序を特定する例題について, 日本応用数理学会部会連合発表会, 大阪大学吹田キャンパス, 2018.
[9] 尾崎 克久: 行列積に対する隣接浮動小数点丸めの結果を返すアルゴリズム, 日本応用数理学会部会連合発表会, 大阪大学吹田キャンパス, 2018.
[10] A. Sakamoto, K. Ozaki: Verification of Computational Order of Dot Product from the Behavior of Rounding Errors, The 10th International Conference on Computational Intelligence and Software Engineering (CiSE 2018), Bangkok, Thailand, 2018.
[11] K. Ozaki: Test Matrices with the Specified Solution for Numerical Linear Algebra, The 10th Int'l Conference on Computational Intelligence and Software Engineering (CiSE 2018), Bangkok, Thailand, 2018.
[12] K. Ozaki, T. Ogita: Generation of Test Matrices with Exact Singular Values for Numerical Computations, The 2017 International Conference on Computational and Mathematical Methods in Science and Engineering (CMMSE2017), Rota, Spain, 2017.
[13] K. Ozaki, T. Ogita: Generation of Test matrices with Specified Eigenvalues, 10th Summer Workshop on Interval Methods, and 3rd International Symposium on Set Membership - Applications, Reliability and Theory (SWIM-SMART 2017), Manchester University, Manchester, U.K., 2017.
[14] 尾崎 克久, 荻田 武史: 真の特異値や固有値がわかるテスト行列の生成法, 日本応用数理学会年会, 武蔵野大学, 2017.
[15] K. Ozaki, T. Ogita: Faithful Rounding for Matrix Multiplication, SIAM Conference on Computational Science and Engineering (CSE17), Atlanta Hilton Hotel, 2017.
[16] 落合 涼太, 寺尾 剛史, 尾崎 克久: 連立一次方程式の数値解の下端・上端型区間による最適な包み込み, 日本応用数理学会研究部会連合発表会, 電気通信大学, 2017.
[17] 寺尾 剛史, 尾崎 克久: ブロックコレスキー分解を用いた連立一次方程式の数値解の精度保証法, 日本応用数理学会研究部会連合発表会, 電気通信大学, 2017.
[18] K. Ozaki, T. Ogita: Linear Systems with the Exact Solution for Numerical Tests, 17th International Symposium on Scientific Computing, Computer Arithmetics and Verified Numerics (SCAN2016), Norrlands nation, Uppsala, Sweden, 2016.
[19] 尾崎 克久, 荻田 武史: 連立一次方程式の数値解のためのテスト問題の生成法, 日本応用数理学会年会, 北九州国際会議場, 北九州市, 2016.

６．研究組織

(1)研究分担者

研究分担者氏名：尾崎 克久

ローマ字氏名：Ozaki, Katsuhisa

所属研究機関名：芝浦工業大学

部局名：システム理工学部

職名：准教授

研究者番号（8 桁）：90434282