

機関番号： 32652
 研究種目： 若手研究(B)
 研究期間： 2007～2010
 課題番号： 19700013
 研究課題名(和文) 大規模連立一次方程式に対する高速かつ高品質な精度保証法に関する研究
 研究課題名(英文) Research on fast and accurate verified numerical computations for large-scale systems of linear equations
 研究代表者
 荻田 武史 (OGITA TAKESHI)
 東京女子大学・現代教養学部・准教授
 研究者番号： 00339615

研究成果の概要(和文)：連立一次方程式を計算機で解くことは科学技術計算の基礎である。計算機における計算は丸め誤差を伴うため、得られるのは近似解であり、その近似解がどれくらい正しいかを評価することは重要である。本研究では、大規模な連立一次方程式について、高速かつ高精度にベクトルの内積を計算するアルゴリズム等を導入することにより、係数行列が悪条件な場合であっても近似解の正しさを高速かつ高精度に評価する方法を開発した。

研究成果の概要(英文)：Solving systems of linear equations on computers is ubiquitous in scientific computing. Since numerical computations involve rounding errors, approximate solutions of the systems are obtained. Therefore, it is important to evaluate how accurate the approximate solutions are. In this research, methods of evaluating the accuracy of approximate solutions of large-scale systems of linear equations have been developed with introducing fast and accurate algorithms for calculating dot products, even if the solving problems are ill-conditioned.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2007年度	900,000	0	900,000
2008年度	700,000	210,000	910,000
2009年度	700,000	210,000	910,000
2010年度	700,000	210,000	910,000
年度			
総計	3,000,000	630,000	3,630,000

研究分野：数値解析学

科研費の分科・細目：情報学・情報学基礎

キーワード：情報数理, 数値線形代数, 数値計算, 精度保証, 高精度計算

1. 研究開始当初の背景

科学技術計算では、線形方程式が基本となるが、それは、解析的に解けないような様々な微分方程式や積分方程式を数値的に解くとき、多くの場合は線形方程式を解く問題に帰着されるからである。

研究開始当初では、線形方程式の係数行列が密行列の場合は高速な精度保証付き数値計算法が既に開発されていた。しかしながら、係数行列が大規模かつ悪条件の場合の取り

扱いは、高精度演算が必要であることから計算量の点で困難であった。

また、科学技術計算で実際に現れるのは大規模疎行列であることが多いが、その場合は計算量・メモリ量の両面から精度保証が非常に困難であることが知られていた。実際これは、A. Neumaierによって提示された Grand Challenge と呼ばれる6つの未解決問題のうちの1つであり、一般の大規模疎行列に対して研究開始当初には有効な手法は知られて

いなかった。

さらに、たとえ精度保証が可能であったとしても、その品質の良し悪しはこれまで議論されてこなかった。

2. 研究の目的

本研究では、大規模連立一次方程式に対する実用的かつ高品質な精度保証付き数値計算法の開発を目的としている。すなわち、連立一次方程式が与えられたとき、係数行列の正則性を保証し、計算機上で解いて得られた数値解の厳密解に対する絶対誤差ベクトル・誤差ノルムあるいはその相対評価の上限を、高速かつ高品質に計算する精度保証付き数値計算法の理論とアルゴリズムを開発する。

本研究の特色は、数値解を得るために必要な計算量と同等かそれ以下の計算量で、さらに必要なメモリ量の増加を低減しながら精度保証を行う点にある。従来の精度保証法は、係数行列の（近似）逆行列を計算する方法が基本であったが、係数行列が疎行列であっても、その逆行列は一般に密行列となってしまう。したがって、係数行列が大規模疎行列の場合、係数行列を格納するのに比べて、その逆行列を格納するためには莫大なメモリ量が必要になり、それに伴って計算量も膨大なものとなる。そこで本研究では、係数行列が疎行列の場合に逆行列を求める必要のない新しい精度保証法を提案する。

また、係数行列が密行列の場合は、問題の悪条件性に応じた計算量で実行できる精度保証法の高速化を実現する。これにより、精度保証がより大規模かつ悪条件な問題にも適用可能となる。

また、得られる精度保証結果自体の品質の向上を図るのも、本研究独特のものである。従来の精度保証法は、計算結果が「少なくとも p 桁正しい」という情報を提供するものであったが、計算結果が「本来何桁正しいか」についての情報は得られていなかった。そこで、本研究では「高々 q 桁正しい」という情報も利用者に提供し、さらに p と q のギャップを縮める方法を提案する。これによって、得られた精度保証結果の品質を高めることができる。

これらを実現するためには、従来の数値計算アルゴリズムを有効に活用しながら実用に耐え得る新しいアルゴリズムを開発しなければならない。逆に、それが可能となれば、利用者は数値計算によって数値解を得ると同時にそれが持っている精度をほぼ正確に知ることが可能になる。これは、すべての数値計算ソフトウェアの品質及び信頼性の向上に繋がることであり、実用的にも極めて有用である。

また、本研究は、Grand Challenge と呼ば

れる精度保証付き数値計算の分野における 6 つの未解決問題のうちの 1 つに関するものであり、本研究の遂行が当該分野に与える学術的な意義は非常に大きい。

3. 研究の方法

研究の基本方針は、既存の高速かつ安定性のある数値計算ライブラリをそのまま活用できるような精度保証法を開発することである。これは、開発する精度保証法の汎用性を考えると重要である。

研究目的を実現するために、具体的に下記の研究を実施した。

- (1) 大規模連立一次方程式に対する精度保証法の開発
- (2) 高速かつ高精度なベクトルの総和・内積計算アルゴリズムの開発
- (3) 悪条件線形問題に対する精度保証法の開発
- (4) 連立一次方程式に対する精度保証法自体の品質を高めるための研究

(1)については、まず、疎行列の構造や性質（正定値性など）に応じた精度保証のアルゴリズムについて研究を行い、一般化を目指した。

(2)については、取り扱う行列が悪条件である場合や、高品質な精度保証を実現する場合に必須であるため、研究を推進した。その際、既存のハードウェアの特性を十分に活用することができるアルゴリズムの開発を目指した。

(3)については、与えられた問題の難しさに応じて、必要最小限に近い計算時間で意味のある近似解を精度保証付きで得るために、適応的なアルゴリズムの開発を目指した。

(4)については、精度保証の品質を保証するための枠組みを構築することを目指した。

4. 研究成果

(1) 大規模連立一次方程式に対する精度保証法の開発

まず、疎な正定値行列に対するメモリ量を低減した精度保証方式を開発した。本方式により、連立一次方程式の係数行列が 100 万次元程度の疎行列であっても、正定値行列であれば、その正定値性の保証も含めて数値解の精度保証が可能であることが示された。

また、優対角行列、正定値行列等の特殊な構造を持つ疎行列、さらにより一般的な行列に対する高速な精度保証法を開発した。

さらに、一般の非対称疎行列が与えられたとき、その転置行列との積の高精度な計算及びその結果に対して高精度な Cholesky 分解を実行するプログラムを

開発し、それを利用して、一般の非対称疎行列の最小特異値の下限を求める高速なアルゴリズムを提案した。従来は、単調行列や対称正定値行列等の特殊な性質を持つ行列に対してしか有効な精度保証法が存在しなかったが、これによって一般の疎行列に対しても精度保証が現実的に可能となり、一気に精度保証の適用範囲が拡張された。この方式では、与えられた行列の疎性や構造にもよるが、数十万次元の行列であれば、大型計算機を用いなくても実用的な計算時間で精度保証が可能であることを数値実験により示した。

(2) 高速かつ高精度なベクトルの総和・内積計算アルゴリズムの開発

研究代表者らが開発した高速高精度な内積計算アルゴリズムの並列化を行い、共有メモリ型計算機上で有効性を確認した。

また、計算結果の精度を保証するという条件の下で、世界最高速のアルゴリズムを開発した。このアルゴリズムを用いると、問題の難しさに対して適応的に計算精度を上げて必ず要求された精度まで正しい結果を得ることができる。

本研究は、あらゆる科学技術計算の基礎となるため、応用範囲が極めて広い。直接的には、線形方程式の直接解法・反復解法、固有値分解、特異値分解等の数値線形代数への応用が挙げられる。

(3) 悪条件線形問題に対する精度保証法の開発

極めて悪条件な線形問題に対する精度保証方式である Rump 法の収束性に関する論文を発表した。この Rump 法は、Rump によって開発されてから、20 年以上その解析がなされていなかったが、本研究によって Rump 法の部分的な解析に成功した。

また、条件数の大きさに応じて反復的に計算精度を増加させて高精度な解を得る適応的な行列分解法を開発し、それらが LU 分解や Cholesky 分解などの多くの重要な行列分解に適用可能であることを示した。

さらに、その手法を用いて、連立一次方程式の解や行列式の値を精度保証付きで高精度に求める方法を開発した。

(4) 連立一次方程式に対する精度保証法自体の品質を高めるための研究

連立一次方程式の近似解について、過大評価・過小評価の少ない誤差評価方法を提案した。これは、線形方程式に対す

る精度保証理論と残差反復法の高精度計算を利用して、誤差の下限と上限を同時に効率良く計算することにより実現している。そのために、(2)で開発したアルゴリズムを利用している。これにより、誤差評価自体の質が判定可能となった。

また、既存の高速かつ安定性のある数値計算ライブラリをそのまま活用できるような精度保証法に、高精度演算を用いた高品質な精度保証法を融合させる方式を提案した。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 12 件)

① T. Ogita: Accurate Matrix Factorization: Inverse LU and Inverse QR Factorizations, SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications, 31 (2010), 2477-2497. (査読有)

② T. Ogita, S. Oishi: Fast Verified Solutions of Linear Systems, Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics, 26 (2009), 169-190. (査読有)

③ T. Ogita, S. Oishi: Tight Enclosures of Solutions of Linear Systems, International Series of Numerical Mathematics, 157 (2009), 167-178. (査読有)

④ S. M. Rump, T. Ogita, S. Oishi: Accurate Floating-Point Summation Part II: Sign, K-fold Faithful and Rounding to Nearest, SIAM Journal on Scientific Computing, 31 (2008), 1269-1302. (査読有)

⑤ S. M. Rump, T. Ogita, S. Oishi: Accurate Floating-Point Summation Part I: Faithful Rounding, SIAM Journal on Scientific Computing, 31 (2008), 189-224. (査読有)

[学会発表] (計 37 件)

① 荻田 武史: (特別講演) エラーフリー変換とロバストな行列分解, 日本数学会年会, 応用数学分科会, 慶応義塾大学 (2010/3/25)

② T. Ogita: (Invited Seminar) Robust and Accurate Matrix Factorizations, Dagstuhl Seminar 09471: Computer-assisted Proofs - Tools, Methods and Applications, Dagstuhl, Germany (2009/11/15-20)

③ 荻田 武史: (招待講演) ロバストな行列

分解アルゴリズムとその応用, 2009 年並
列／分散／協調処理に関する「仙台」サマ
ー・ワークショップ (SWoPP 仙台 2009),
仙台 (2009/8/6)

[その他]

ホームページ

[http://www.twcu.ac.jp/dept_grad/teacher
list/takeshi-ogita.html](http://www.twcu.ac.jp/dept_grad/teacher
list/takeshi-ogita.html)

6. 研究組織

(1) 研究代表者

荻田 武史 (OGITA TAKESHI)

東京女子大学・現代教養学部・准教授

研究者番号： 00339615