

令和 5 年 6 月 26 日現在

機関番号：34526

研究種目：若手研究

研究期間：2019～2022

課題番号：19K20281

研究課題名（和文）悪条件連立一次方程式における前処理行列による条件数の低減に関する研究

研究課題名（英文）Research on Preconditioners for Ill-Conditioned Linear Systems

研究代表者

南畑 淳史（Atsushi, Minamihata）

関西国際大学・社会学部・講師

研究者番号：70754787

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,100,000円

研究成果の概要（和文）：本研究期間では、悪条件の最小二乗問題の前処理行列を提案した。提案した前処理行列は最小二乗問題の正規方程式の係数行列のQR分解を用いた前処理行列である。この前処理行列は、丸め誤差がなければ機能はしない。しかし、悪条件の際は丸め誤差により前処理行列となることを数値的に示した。関連する研究として、疎な連立一次方程式の精度保証付き数値計算を開発した。その講演に対して、日本応用数理学会 2019年度若手優秀講演賞を受賞した。また、疎な最小二乗問題の精度保証付き数値計算法の提案を行った。この発表に対して、JSST 2019 Outstanding Presentation Awardを受賞した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

疎な連立一次方程式の精度保証付き数値計算は精度保証付き数値計算における重要な課題として認識されている。LU分解を用いた疎な連立一次方程式の精度保証付き数値計算は多くの問題に適用ができる可能性があり、精度保証付き数値計算の実応用貢献したと考えられる。また、前処理行列に関しては丸め誤差を行列近似として捉えることにより、新しい前処理行列を構成できることを示した。ただし、行列が悪条件であることが必要となる。そのため、すべての問題に適用できるわけではないので、社会的な意義は大きくない。しかし、悪条件を考える際に新しい方向性を示した、という意味では学術的な価値があると考えられる。

研究成果の概要（英文）：In this research period, a preconditioner for ill-conditioned least squares problem was proposed. The proposed preconditioner uses the QR decomposition of the coefficient matrix of the normal equation of the least squares problem. This preconditioner does not work without rounding errors. However, it is shown numerically that it becomes a preconditioner due to rounding errors.

In a related work, verification methods for sparse non-symmetric linear systems have been proposed. The presentation received the JSIAM 2019 Young Scientist Outstanding Presentation Award was received. A verification method for sparse least squares problems was proposed and received the JSST 2019 Outstanding Presentation Award.

研究分野：精度保証付き数値計算

キーワード：数値線形代数 前処理行列 悪条件行列 連立一次方程式 精度保証付き数値計算

1. 研究開始当初の背景

本研究では悪条件の連立一次方程式を対象とし、その前処理行列がどのような性質を持つならば条件数を下げる効果があるのかを議論する。悪条件問題は数値計算として非常に厄介であり、忌避されてきた。また、GPU と呼ばれる安価で高速なプロセッサが身近に使用できる環境が普及してきており、GPU は単精度浮動小数点数演算および半精度浮動小数点数演算が非常に高速であり、これらの演算を使用した数値計算技術の発展が今後、予想されていた。更に単精度や半精度では、悪条件と呼ばれていなかった行列が悪条件行列となってしまう。本研究ではこの問題に対し、どのような性質を持つならば条件数を下げる効果があるのかを議論する。

2. 研究の目的

本研究課題では、悪条件の連立一次方程式に対して、前処理行列の条件数を下げる効果について理論的に解析する方法を開発する。特に前処理行列がどのような条件を満たしていれば条件数を下げる効果を持つのかに焦点を当てて研究を行う。この条件をもとに前処理行列や数値線形代数のアルゴリズムの構成方法に関する研究を推進する。

3. 研究の方法

研究計画調書に記載したように研究期間内に以下の内容を明らかにするように研究を実施してきた。

- a) 悪条件問題に対して、前処理行列がどのような性質を持てば条件数を下げる効果を持つのかの理論的な解析
- b) 理論的な解析結果に基づいた前処理行列の構築方法および修正方法の提案
- c) 破綻した Cholesky 分解および破綻した不完全 Cholesky 分解の修正方法の提案

研究計画当初は a)b)c) という順番で進めていけば順当に研究が進むだろうと予想していたが、実際には逆の順番となってしまった、具体的には c) の代わりに悪条件で密な縦長行列向けの前処理行列を提案し、数値実験を通じて b) の前処理行列の安定化方法を検討し、それらがどうして前処理行列として機能するのかを a) の理論的に検討するという手順で実施することになった。

4. 研究成果

1) 悪条件で密な縦長行列向けの前処理行列の開発

$m \gg n$ であるような悪条件で密な縦長行列 $A \in R^{m \times n}$ に対する前処理行列を開発した。提案手法は $fl(A^T A)$ の QR 分解の R を前処理行列として使用する。ただし、そのままでは性能が安定しないので、R の一部の値を変更することで安定化を図った。特異値分布 (mode=3,5) によっては密な縦長行列の代表的な前処理行列であるシフト付きコレスキー分解に劣る。また、良条件の際はすべての特異値分布で前処理行列として機能しない。しかし、特異値分布 (mode=1,2,4) の場合で悪条件の際にはシフト付きコレスキー分解よりも性能が高いことが分かった。

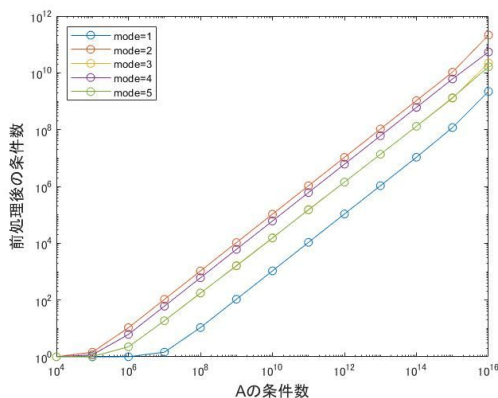


図 1. シフト付きコレスキー分解の前処理性能

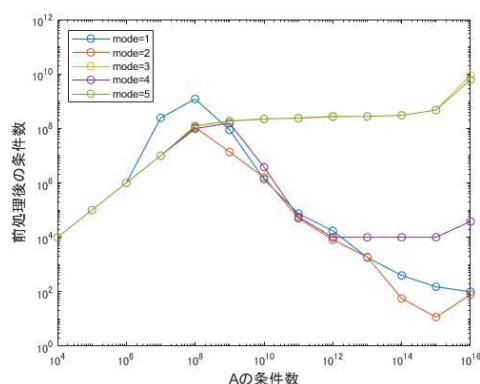


図 2. 安定化処理をした提案手法の前処理性能

また、この悪条件の際に前処理として機能をするという現象を説明するために、丸め誤差を行列の近似とモデル化し、ある閾値以下の特異値の小さい成分をカットした近似行列 A' を使って $A^T A'$ を考え、その閾値の二乗だけ固有値をシフトした行列のQR分解のRがどのような前処理性能を持つかを誤差のないシンボリック計算と理論の面から検討した。図2.と図3.から分かるように、数値実験とほぼ同様の前処理性能が得られた。

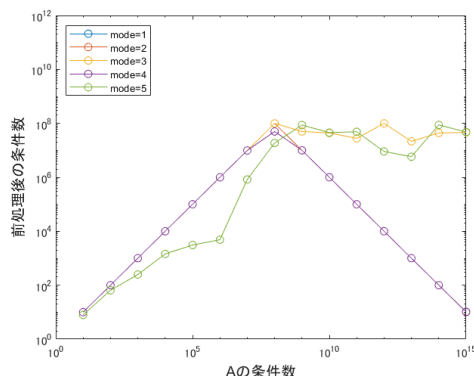


図3. 閾値を σ_n モデル化した行列を用いた前処理性能

2) 非対称疎行列を係数とする連立一次方程式に対する精度保証付き数値計算とその応用

連立一次方程式 $Ax = b$ の係数行列が非対称疎行列の場合についての精度保証付き数値計算について検討を行った。精度保証付き数値計算法において、密行列の場合は、近似逆行列を用いる方法が一般的であるが、図4.のように疎行列ではなくなり、実用的ではない。また、 $A^T Ax = A^T b$ と変形し、コレスキー分解を用いて精度保証付き数値計算を行う方法も考えられるが条件数が二乗になり適用できる問題が少なくなる。そこで疎行列向けのLU分解を用いて、三角行列の逆行列は多くの場合はまだ疎行列であるという実験的な事実を利用して、 A への前処理方法を提案し、その精度保証付き数値計算法を提案した。

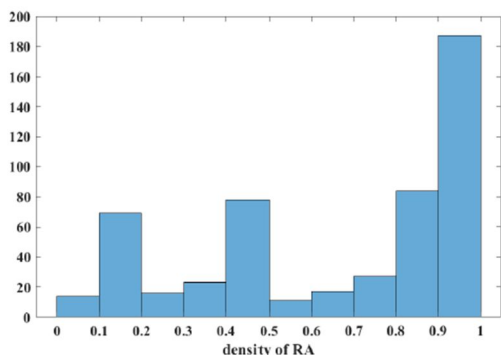


図4. RA の density

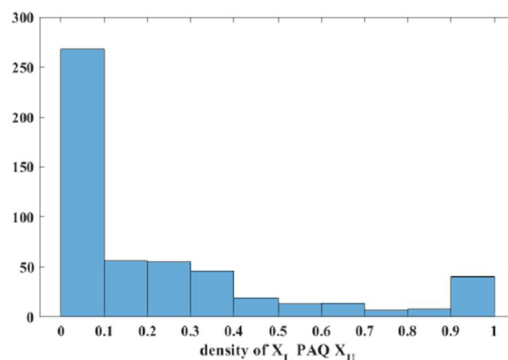


図5. $X_L PAQ X_U$ の density

この方法により問題によっては大規模な問題も解けるようになった。また、この方法の応用として、疎な最小二乗問題の精度保証付き数値計算法を提案した。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計1件（うち査読付論文 0件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 南畑 淳史	4. 巻 14
2. 論文標題 疎で悪条件な非対称行列のコレクションサイト	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 教育総合研究叢書	6. 最初と最後の頁 143-152頁
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計9件（うち招待講演 1件 / うち国際学会 3件）

1. 発表者名 南畑 淳史, 尾崎 克久, 荻田 武史, 大石 進一
2. 発表標題 悪条件で密な縦長行列向けの前処理行列の数値的比較について
3. 学会等名 2021年並列 / 分散 / 協調処理に関するサマー・ワークショップ (SWoPP2021)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 安部 博枝, Luis Diago, 南畑 淳史, 萩原 一郎
2. 発表標題 拡張ラプラス変換型機械学習による自動運転車とドライバーの協調制御に関する一考察
3. 学会等名 日本機械学会 第34回計算力学講演会 (CMD2021)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Atsushi Minamihata, Katsuhisa Ozaki, Takeshi Ogita and Shin'ichi Oishi
2. 発表標題 Preconditioner for Ill-conditioned Tall and Skinny Matrices
3. 学会等名 The 40th JSST Annual International Conference on Simulation Technology (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 南畑 淳史, 荻田 武史, 大石 進一
2. 発表標題 疎な係数行列を持つ最小二乗問題の精度保証付き数値計算法とその応用
3. 学会等名 日本応用数理学会 2020年度 年会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 南畑 淳史
2. 発表標題 LU分解を用いた疎行列向けの精度保証付き数値計算法とその応用
3. 学会等名 第4回 精度保証付き数値計算の実問題への応用研究集会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 南畑淳史
2. 発表標題 非対称疎行列を係数とする連立一次方程式に対する精度保証付き数値計算法とその応用
3. 学会等名 第10回計算力学シンポジウム (招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Atsushi Minamihata, Takeshi Ogita and Shin'ichi Oishi
2. 発表標題 A note on verification methods for sparse non-symmetric linear systems
3. 学会等名 International Conference on Matrix Analysis and its Applications(MAT TRIAD 2019) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Atsushi Minamihata
2. 発表標題 Verification method for sparse least squares problems
3. 学会等名 The 38th JSST Annual International Conference on Simulation Technology(JSST 2019) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 南畑 淳史, 荻田 武史, 大石 進一
2. 発表標題 非対称疎行列を係数とする連立一次方程式に対する精度保証付き数値計算の数値的比較
3. 学会等名 日本応用数理学会 2019年度 年会
4. 発表年 2019年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関