様 式 C－１９、F－１９、Z－１９ （共通）

科研費
KAKENHI

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 ２７ 年 ６ 月 １８ 日現在

機関番号：３２６５２
研究種目：若手研究(B)
研究期間：2011～2014
課題番号：２３７０００２３

研究課題名（和文）ロバストで高効率な数値線形代数アルゴリズムの開発

研究課題名（英文）Development of robust and efficient algorithms in 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・准教授

研究者番号：００３３９６１５

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,200,000円

研究成果の概要（和文）：本研究の目的は、数値線形代数におけるロバストな行列分解アルゴリズムの体系を構築することである。数値線形代数は科学技術計算の基礎であり、そのための高い安定性を持つアルゴリズムを開発することは、非常に重要である。これを達成するためには、様々な行列分解に対して、個々のアルゴリズムの詳細よりもメタなレベルにおいて共通の枠組みを創造しなければならなかった。そこで、理工学の多くの分野に応用がある実対称正定値行列に対して、高い安定性を持った行列分解アルゴリズムの開発に成功した。さらに、多くの応用がある固有値問題や特異値問題に対しても、高い安定性を持った数値計算法を提案した。

研究成果の概要（英文）：The purpose of this research is to create a framework of robust matrix factorization algorithms in numerical linear algebra. Since scientific computing is based on numerical linear algebra, development of such algorithms is very important. For this purpose, it was necessary to create a common framework for algorithms rather than considering details of individual algorithms. We succeeded in developing a robust factorization algorithm for real symmetric matrices. Moreover, we proposed robust numerical methods for eigenvalue problems and singular value problems.

研究分野： 数値解析学

キーワード： 数値線形代数 行列分解 高精度計算 悪条件問題

１．研究開始当初の背景

(1) 現在の計算機における浮動小数点演算は有限桁計算を基本としているため、一般的に計算結果には丸め誤差が生じる。その影響から、数学的に正しいことでも計算機上では成り立たないことが多い。従来、計算結果の良し悪しは、研究者自身の経験に頼るところが大きかったが、近年、科学技術計算の品質管理や信頼性向上のためには理論的に計算機上での計算誤差の厳密な見積もりを行うべきである、という動きが活発になってきている。このような思想に基づく数値計算法を精度保証付き数値計算法と呼ぶ。

(2) 科学技術計算では線形問題（連立一次方程式、固有値問題、特異値問題等）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、多くの場合は線形問題を解く問題に帰着する必要があるからである。このような線形問題の解きづらさを表す指標に条件数がある。条件数とは、係数行列が実対称系であれば、絶対値最大固有値と絶対値最小固有値の比で定まる値である（非対称系であれば、最大特異値と最小特異値の比）。

(3) 研究開始当初の段階で、線形方程式の係数行列の条件数が比較的小さい場合については、非常に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、係数行列の条件数が比較的大きい場合については、近似解の持つ精度そのものが非常に低くなり、結果として精度保証が困難となったり無意味なものとなったりする場合があった。すなわち、従来の精度保証法は「精度の良い近似解を得られるような、ある程度簡単な問題」に対してのみ機能するものであった。

(4) 以上のような背景において、「普通では解けない難しい問題」に対しても高品質な精度保証結果を得られるアルゴリズムの体系を構築することが、今後の精度保証付き数値計算の目指すべき方向性と考えた。そのために、研究代表者はその基盤となる高精度内積計算アルゴリズムを既に開発しており、さらにそれを用いて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）を開発していた。これらの研究成果を新たな出発点として考え、本研究の着想に至った。

２．研究の目的

(1) 科学技術計算の基礎を成す数値線形代数に現れる問題（連立一次方程式、固有値問題、特異値問題等）では、問題の難しさの指標となる条件数が大きくなると、計算機で実行される有限桁計算（浮動小数点演算）による誤差が拡大しやすくなり、得られた近似解の持つ精度が著しく低くなる場合がある。

(2) 本研究の目的は、条件数の大きさに関わらず、問題を高精度かつ高効率に解くことができる数値計算アルゴリズムの体系を構築することである。具体的には、数値線形代数におけるロバストな行列分解アルゴリズムの開発を目的としている。ここで、ロバストとは「アルゴリズムが途中で破綻しないこと」及び「意味のある結果が得られる」という両方の意味を持つ。

具体的には、正方行列 A が与えられたとき、その逆行列 A^{-1} に対して $A^{-1} = XY$ あるいは $A^{-1} = XYZ$ のような形式の分解を考える（ただし、X, Y, Z は A と同じサイズの行列）。このような分解を、「逆行列分解」と呼ぶことにする。通常の行列分解ではなく逆行列分解を考えるのは、通常の行列分解から得られる情報だけでは、得られた結果の精度が良いか悪いか判定できないからである。

(3) このような問題を克服するため、逆行列分解として、研究代表者は既に逆 LU 分解 $A^{-1} = LU$（L は下三角行列、U は上三角行列）及び逆 QR 分解 $A^{-1} = RQ$（R は上三角行列、Q は直交行列）を得ることができるアルゴリズムを開発していた。

(4) 本研究では、これを対称正定値系の行列に対する Cholesky 分解や、一般行列に対する特異値分解、対称行列系に対する固有値分解などにも拡張し、これらを統合する新しいアルゴリズムの体系を構築する。

３．研究の方法

(1) 本研究は、ロバスト行列分解アルゴリズムの設計法を確立することを最終目的としているが、重層的に研究を推進することを念頭に置いて計画した。

その基本は

- 具体的なロバスト行列分解アルゴリズムの開発
- アルゴリズム体系の構築
- 高精度演算が必要な部分（内積･行列乗算）の高速化

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、適応的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配慮した。

(2) 例えば、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。そのために、国内外の優れた研究者の方々とも積極的に議論を交わしていくこととした。

４．研究成果

(1) 平成 23 年度については、ロバスト行列分解アルゴリズムを設計する際の突破口と成り得る具体的な問題を取り上げて、それらの問題に対する数値計算アルゴリズムを構

築することが目的であった。具体的には、対称正定値行列に対するロバスト逆 Cholesky 分解のアルゴリズムの開発を目指した。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可能な限り有効活用し、必要となる高精度演算については、これまでに開発してきたアルゴリズムをベースとして、内積計算や行列乗算に限定した効率の良い方式を考案することであった。これは、開発するアルゴリズムの汎用性の点においても重要である。また、ロバスト逆 Cholesky 分解を利用した対称行列の正定値性の保証法も提案した。これらの成果をまとめ、論文発表も行った。
(2) 平成 24 年度については、固有値分解、特異値分解に関するロバストな逆行列分解アルゴリズムを開発することが目的であった。対称系の固有値分解や特異値分解は、直交行列（ユニタリ行列）による変換に基づくため、これを前処理として適応的に行列の条件数を下げることはできない。その点において従来の逆 LU 分解・逆 QR 分解などとは異なる解析が必要である。この点を明確にするため、まず、前年度に開発したロバスト逆 Cholesky 分解アルゴリズムの収束解析を行った。これによって、反復毎に入力された行列の条件数を低減させることができることを示した。次に、特異値分解に関するロバスト計算アルゴリズムを提案し、その解析に着手した。また、上記と並行して、提案アルゴリズムの効率化を高めるために、行列乗算の高精度演算に関する研究も継続して推進し、論文発表等を行った。
(3) 平成 25 年度については、前年度までの結果をもとに、それらを統合する行列分解アルゴリズムの体系を構築することが目的であった。これを達成するために新しい高精度な行列分解のためのアプローチを導入し、実際に対称系の固有値問題に対する高精度な反復計算アルゴリズムを提案した。これは、これまでに開発してきたロバストな行列分解アルゴリズムとは異なり、ニュートン法と同様に、反復毎に結果の精度を２乗のオーダーで改善することができる画期的な方法である。そして、この方法と、これまでに開発してきた行列分解アルゴリズムを統合することにより、ロバストかつ非常に高精度な行列分解が可能となる。また、これまでに開発した対称正定値行列に対するロバスト逆 Cholesky 分解のアルゴリズムの改良を行い、理論的な解析及び数値実験によって、そのアルゴリズムの有効性を確認した。

また、上記と並行して、提案アルゴリズムの効率化を高めるために、行列乗算の高精度演算に関する研究も継続して推進した。さらに、対称不定値行列に対する代表的な行列分解法について、その行列分解の結果に対する後退誤差解析を行い、高速に行列分解の誤差限界を得るための方法を示した。さらに、特殊な構造を持つ行列を係数とする線形方程式に対して、近似解の持つ精度を高速に評価するアルゴリズムを提案し、論文発表を行った。本提案方式にもロバストな行列分解アルゴリズムを適用可能であり、一般の密行列系に対する線形方程式をロバストに解くことが可能となった。
(4) 平成 26 年度については、前年度までの結果をもとに、それらを統合する行列分解アルゴリズムの体系を構築することが目的であった。これを達成するために、新しい高精度な行列分解のアプローチを導入することを試みてきたが、前年度より開発してきた対称系の固有値問題に対する高精度な反復計算アルゴリズムについて改良することに成功した。これは、これまでに開発してきたロバストな行列分解アルゴリズムとは異なり、ニュートン法と同様に、反復毎に結果の精度を２乗のオーダーで改善することができる画期的な方法であったが、これに加えて重複固有値を持つような困難な場合でも対応可能であることを示した。この固有値問題に対するアルゴリズムを拡張し、一般の特異値問題に対してもロバストな特異値分解アルゴリズムを考案した。このアルゴリズムも、固有値分解アルゴリズムと同様に、重複特異値の場合について対応可能である。さらに、これまでに開発してきた行列分解アルゴリズムを統合することにより、ロバストかつ非常に高精度な行列分解が可能となる。

また、これまでに開発した対称正定値行列に対するロバスト逆 Cholesky 分解の反復改良アルゴリズムに対して、その収束に対する理論的な解析を行った。また、上記と並行して、提案アルゴリズムの効率化を高めるために、行列乗算の高精度演算に関する研究も継続して推進した。さらに、対称不定値行列に対する代表的な行列分解法について、その行列分解の中で核となる部分についての後退誤差解析を行い、従来の評価式を大きく改善することに成功した。さらに、一般化優対角性のような特殊な構造を持つ行列を係数とする線形方程式に対して、近似解の持つ精度を高速に評価するアルゴリズムを提案・改良した。本提案方式にもロバストな行列分解アルゴリズムを適用可能であり、一般の密行列系に対する線形方程式をロバストに解くことに応用することも可能である。

以上のように、当初の計画に沿って研究成果を出しており、本研究課題の目標は達成されたと言える。

５．主な発表論文等

〔雑誌論文〕（計 15 件）

① K. Ozaki, T. Ogita, S. M. Rump, S. Oishi: Fast algorithms for floating-point interval matrix multiplication, J. Comp. Appl. Math., 236:7 (2012), 1795-1814.（査読有）
DOI: 10.1016/j.cam.2011.10.011

② T. Ogita, S. Oishi：Accurate and robust inverse Cholesky factorization, Nonlinear Theory and Its Applications, IEICE, 3:1 (2012), 103-111. (査読有)
DOI: 10.1587/nolta.3.103
③ T. Ogita: Accurate and verified numerical computation of the matrix determinant, International Journal of Reliability and Safety, 6:1-3 (2012), 242-254. (査読有)
DOI: 10.1504/IJRS.2012.044287

〔学会発表〕(計 24 件)
① T. Ogita: Acceleration of Accurate Floating-Point Summation, The Fifth China-Japan-Korea Conference on Numerical Mathematics, Ningxia University, Yinchuan (中国), Aug. 27, 2014. (Invited talk)
② 荻田 武史: 精度保証付き数値計算と高精度計算, 2013 年度 応用数学合同研究集会, 龍谷大学 瀬田キャンパス (滋賀県・大津市) (2013/12/20). (招待講演)
③ T. Ogita: Verified Solutions of Sparse Linear Systems, The 15th GAMM-IMACS International Symposium on Scientific Computing, Computer Arithmetic and Verified Numerical Computations, Novosibirsk (ロシア), Sep. 26, 2012. (Plenary lecture)

〔その他〕
ホームページ等
http://www.math.twcu.ac.jp/~ogita/

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