

## 研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名: 数値線形シミュレーションの精度保証に関する研究

2. 研究代表者名及び主たる研究参加者名(研究機関名・職名は研究参加期間終了時点):

研究代表者

大石 進一 (早稲田大学理工学術院基幹理工学部応用数学科 教授)

主たる共同研究者

萩田 武史 (東京女子大学現代教養学部数理科学科 専任講師)

3. 研究実施概要

本研究の目標は、従来精度保証がされていなかったシミュレーションツールに対して精度保証を付けるようにすることである。その実現のために、大きく次の2つを目標に研究を実施している。

- (1) 数値線形シミュレーションツールを精度保証付きシミュレータへと性能向上させる理論とアルゴリズムを確立して、主要なシミュレータに実装して有効性を示す。
- (2) 悪条件線形問題の解法アルゴリズムとポータブルかつ高速・高精度な精度保証アルゴリズムを開発し、既有力シミュレータに実装して有効性を確認する。

以上の研究が達成されることにより、従来取り扱えなかった悪条件な数値線形代数の問題もシミュレータで必要最小限に近い手間で解け(解の存在、一意性の検証を含む)、得られた数値解の精度もほぼ過大評価なしに評価できるようになる。

これらを達成するためには、以下の研究の推進が不可欠である。

- (a) 実問題に対して精度保証付きシミュレータを適用するために大規模な線形問題を高速に精度保証付きで解く方法の開発。
- (b) 悪条件な問題も取り扱えるようにするために高速・高精度な内積演算アルゴリズムの開発。
- (c) 上記で開発した手法にスケーラビリティ・ポータビリティを持たせるための枠組みの提案。

これらの課題に関する研究及びその応用についての研究を行い、主に次の成果を得た。

- (a-1) 連立一次方程式の解のシャープな精度保証法を開発した。これは、精度保証自身の品質を保証するものである。
- (a-2) 連立一次方程式に対する精度保証に必要なメモリ量を大幅に削減した方式を考案し、スパース行列に対する精度保証法を開発した。本方式は、分散型並列計算向きの手法で、直接解法及び反復解法に適用可能である。
- (a-3) 対称正定値行列を係数行列とする連立一次方程式に対する超高速精度保証法を開発した。これは、ダイレクトスパース解法にも適用可能で、理論的には精度保証の計算コストがほぼフリーである。
- (a-4) 悪条件な係数行列を持つ連立一次方程式に対する精度保証法を提案した。また、それに関して高精度な近似逆行列を求める **Rump** 法の収束証明をした。これまで 20 年以上未解決だった問題を、条件付きで解決した。
- (a-5) 対称行列の固有値問題に対する高速な精度保証法を考案した。これは、各固有値・固有ベクトルに対して精度保証を与えるため、よりシャープな精度保証が可能となった。
- (b-1) 任意に計算精度を向上させるベクトルの総和及び内積計算法を開発した。これにより、多倍長精度演算を使わずに、単精度演算や倍精度演算のみで高速かつ高精度な計算が可能となった。また、本研究でエラーフリー変換の概念を確立した。
- (b-2) 並列化された任意計算精度の内積計算法を開発した。これは、データの依存性によって並列化が困難

であった(b-1)の並列化版である。

- (b-3) 任意の結果精度を持つベクトルの総和及び内積計算法を開発した。一般的に、結果精度を保証するアルゴリズムの開発は困難であるが、本方式では、問題の難しさに応じて自動的に計算精度を増加させる適応的な方法となっているため、必要最小限に近い計算量で所望の精度を持つ結果を得ることが可能となった。
- (c-1) ポータビリティを損なわない連立一次方程式の精度保証法を提案した。これにより、計算機環境に依存しない精度保証法の実現が可能となった。
- (c-2) 連立一次方程式に対する精度保証法の自動選択アルゴリズムを提案した。係数行列が密で、それほど悪条件でなければ、最も効率のよい精度保証を選択可能となった。
- (c-3) 高速な行列計算ライブラリを用いた行列積に関する高精度計算を開発した。これは、特にMATLAB等のインタプリタ向きの方法で、ポータビリティの高い方式である。
- (c-4) 計算幾何学の基礎判定問題の精度保証付きアルゴリズムを考案した。入力が浮動小数点数の場合は必ず正しい判定を返す方式であり、MATLAB等にも実装可能である。
- (c-5) 大規模スパース系に対する高速かつ高精度な行列ベクトル積アルゴリズムを開発した。本研究で開発してきた高精度な内積計算アルゴリズムを、共役勾配法系統の反復解法に適用し、通常の倍精度計算では収束しないような例に対して、収束が改善されることを確認した。

以上の成果により、本研究の目標は達成された。

#### 4. 事後評価結果

##### 4-1. 研究の達成状況及び得られた研究成果(論文・口頭発表等の外部発表、特許の取得状況等を含む)

数値線形シミュレーションツールを精度保証付きシミュレータへと向上させるためのアルゴリズムを確立し、多くの悪条件な数値計算問題の解決を与えるなど、数値計算アルゴリズムの今後の方向に重要な貢献をした。

すべての問題を浮動小数点の和の問題へ変換するというエラーフリー変換手法を提案し情報ロスのない数値計算法を確立した。特にこの新しいアイデアは高速・高精度なベクトルの総和・内積計算に関して革新的な成果となった。この手法は世界最高速かつ最高精度で計算精度保証をおこない、また任意の計算精度での計算も可能であり応用範囲も広い。本手法により一般的な100万次元程度の疎行列の連立線形方程式が精度保証でき、また悪条件問題を扱う場合でも10万次元密行列を扱う計算ができる。その結果、広範囲の分野のいろいろな問題に対応でき多くの研究者が恩恵に与ることになるであろう。

本研究によって得られた成果を多くの論文で発表したが、いくつかの論文は国際的に大きな注目を浴びた。SIAM Journal on Scientific Computing に採録された論文は、月間でダウンロード件数が最も多かった上位20件の中にランキングされたり、被引用論文件数が100件を超えるなど注目を浴びている。また、口頭発表においては国内外を問わず、本研究の成果を積極的に公開して大きな反響が得られた。さらに日本応用数理学会の英文論文誌 JJIAM で特集号を組み、また一般向けには数学セミナー誌で特集を行った。以上のように成果の外部発表として極めて優れており学術の進展への貢献度は高い。

特許等の知的財産権については、JST の産学共同シーズイノベーション研究発表会に積極的に参加し企業等と共同研究を開始しており、今後必要に応じて特許の取得が期待できる。

研究チームの体制・遂行状況では国際的な共同研究を活発に推進し、若手研究者の育成に力をいれた。また海外の最高レベルの研究者との交流を頻繁に行っており、特にハンブルグ工科大学の Rump 氏との共同研究は有効であったと思われる。研究者育成では研究開始時に CREST 研究員であった研究者が大学の講師に採用されており、若手研究者のアイデアおよび発想力を有効に伸ばした結果であるといえる。

また研究チームの参加人数は最小限の規模で構成され、研究テーマも分かりやすく研究チームのまとまりが非常に良かった印象を受ける。

研究費の執行状況は、主に若手研究者育成のための人件費や、精度保証付きシミュレータを開発する上で必要な計算機等を購入するための物品費、研究調査及び成果発表のための旅費等に執行されておりすべて

妥当である。

CREST 研究期間の途中で東京女子大グループが CREST 研究に参加しているが、研究計画に支障がない範囲で予算調整を行ない研究の立ち上げがスムーズに行われた。

#### 4-2. 研究成果の科学技術や社会へのインパクト、戦略目標への貢献

シミュレーションの大規模化に伴い、シミュレーション精度の低下がその結果に影響を及ぼすことが生ずるが、本研究は計算効率をあまり落とさずに精度保証をするということを研究の目標とした。

本研究では、まず数値線形シミュレーションツールを精度保証付きシミュレータへの性能向上させる理論とアルゴリズムを確立した。ここでは実問題に対して精度保証付きシミュレータを適用するために大規模な線形問題を高速に精度保証付きで解く方法の開発を行い、「密行列の精度保証理論」、「疎行列の精度保証理論」をそれぞれ構築した。また、大規模問題を取り扱うため、「PC クラスタ上での精度保証」についても研究を推進した。その結果、従来精度保証がされていなかったシミュレーションツールに対して精度保証ができるようになった。本研究により、各種大規模問題に対して所望する精度まで高効率に数値計算の精度保証ができるようになったことの意義は大きい。特に精度保証付きシミュレータに適用する高精度内積演算、高精度行列演算に関して、この分野において世界最高レベルの成果を出している。これらはあらゆる科学技術計算の基本演算であり、その重要性は高く、本研究の成果がシミュレーション技術に与えるインパクトも大きい。

精度保証のアルゴリズムを確立したことは、今後の数値解析の方法における変革をもたらす新たな展開が期待される。この手法が適用可能な分野は多くあり、様々なシミュレーションでの展開が予想できる。さらに現在、精度保証の研究は線形計算の範囲であるが研究の範囲を非線形にまで拡張することも期待される。

本研究は本研究領域の戦略目標である革新的アルゴリズムの開発という点において優れた貢献である。特に特定の領域ではなく、多方面のシミュレーションに適用できる基盤技術としてのインパクトが大きい。

#### 4-3. 総合的評価

既存の数値計算シミュレーションツールを精度保証付きシミュレータへと向上させるための数値計算精度保証アルゴリズムを確立したことはまさに革新的なシミュレーション技術を切り開くものであり国際的にも極めて高く評価される。

本研究成果は、応用分野が極めて広範囲であるため科学的・技術的インパクトは非常に高く、今後の情報産業の重要な基盤技術となると大いに期待できる。