戦略的創造研究推進事業 CREST
研究領域「現代の数理科学と連携するモデリング手法の構築」
研究課題「モデリングのための精度保証付き数値計算論の展開」

研究終了報告書

研究期間 2014年10月～2022年3月

研究代表者:大石進一
（早稲田大学理工学術院 教授）

§1 研究実施の概要

（1）実施概要

本研究で得られた成果が、精度保証付き数値計算基盤の構築によってモデリングを困難にしている根源問題の解決に大きく寄与したことを概観する。

以下、具体的に成果の概要を述べる。

i. 「不確定要素問題」へのチャレンジ　モデリングにおける困難として、モデルに入るパラメータが不確定性をもつことが挙げられる。この不確定性によって解析結果が大きなブレを生じ結果的に優位な解析が得られず、対象に関する知見が得られないことがある。これに対して、本研究では不確定性を単なるパラメータ値が区間となるという従来の区間演算の考え方を改め、不確定性間の相関を解析するアファイン演算の考え方に基づき不確定性間の影響を大幅に打ち消すことのできる局面においては非常にシャープな解析ができることを多方面に渡って示すことができた。その結果は総合的な解説として

S. M. Rump and M. Kashiwagi, Implementation and Improvement of Affine Arithmetic, Nonlinear Theory and its Applications, IEICE, Vol.6 No.3 (2015), pp.341-359

にまとめ、広く理論が基礎から応用まで理解普及できるように配慮した。この成果は主に大石グループの柏木が、ハンブルク工科大学の Rump 教授の研究グループと共同して得た。

ii. 「悪条件性問題」へのチャレンジ　モデリングによって支配方程式が決定できたとしても、その方程式の構造から解析段階における数値計算誤差などの小さな誤差が、結果の大きな変動を生む場合があることが知られている。これは悪条件性問題と呼ばれる。特に現代コンピュータアーキテクチャでは浮動小数点演算が科学技術計算で主として用いられる。悪条件性問題に対処するために、より高精度な数値計算を行うと、急激に計算速度が落ち、実質的に解析が困難になる問題があった。この問題を解決するために、浮動小数点演算の誤差も浮動小数点演算自身によって計算するエラーフリー変換法を本研究者らが提案したが、それを基礎に、数値解析の基礎である数値線形代数の基本問題の高速かつ必要な精度を確保する精度適応型高速数値線形代数解析アルゴリズムを統括的に展開し、スーパーコンピュータからパソコン計算(GPU 計算を含む)までスケーラブルに実装した。この成果は荻田グループ及び尾崎グループが主に担当して得られた。この成果は、直ちに関数方程式解析グループに提供され、複雑な解（乱流なども現れる）をもつ非線形偏微分方程式や非線形遅延微分方程式の解析などに利用され、高速可変精度計算なしには得られない力学系の理論的な観点からも重要な成果が得られた。すなわち、大石グループの大石・劉（ナビエ・ストークス方程式）・高安・関根、渡部グループ、山本グループなどの関数方程式の研究成果に結実した。

iii. 「大規模性問題」へのチャレンジ　荻田グループ及び尾崎グループは HPC に関わる様々な共同研究者を得て、高速可変精度計算により、スーパーコンピュータでの計算速度を律する行列積の精度を保証しつつ最高速に計算できるように改善する研究を進めた。また、理論的には大石は関数方程式の精度保証付き数値計算法に現れるガレルキン方程式の近似解のおけるヤコビ行列の最小特異値が近似精度を上げても一定に保たれることを多くの数値実験によって発見し、その数学的原理を漸近対角行列理論によって創始して、解明した。これによって、近似方程式を 5000 次元程度で解いた後には理論的に次元を無限大と極限を取れることが多くの場合に可能であることが示された。このような場合には精度保証に必要な定数の評価がオーダー評価だけで十分であることも示唆しており、関数方程式の解析における大規模性問題（100 万から 1000 万を超える次元の近似方程式を扱わなければ精度保証ができない問題）を根源的に解決できる方向性を示している。

iv. 「構造問題」へのチャレンジ　関数方程式には可積分なクラスが存在し、このクラスにおいては、数値計算誤差が自然と打ち消し合い、解析的には広義の特殊関数が解として現れる。このような高い次元の解析原理をどのように発見し、解析するかは精度保証付き数値計算の問題としても最重要な問題の一つである。大石グループの田中は物理的には正負が相転移状態を表す方程式の符号判定の問題をある境界値問題の固有値問題に帰着して精度保証付き数値計算によって解決できることを示した。また、柏木・高橋・丸野は、アファイン演算による計算誤差打ち消し具合の評価によって可積分性の判定の指標が得られることを示した。高橋が進めてきた超離散化の理論を非可積分系にも発展させ、可積分系と精度保証計算の主な対象となる非可積分系をつなぐ道の探求を進めた。まだ、完全なる道の構築はできていないが、非可積分系の研究においても、そこに潜む数学的構造を計算機援用証明によって明らかにする研究の方向性が示されたことは大きな進展である。

以上は主に要素的なモデリングを困難にしている課題に対する成果について記述であるが、これを横断的に見る視点から捉え直すと次のように研究成果をまとめることができる。

v. 「精度保証基盤技術の高度な展開」　荻田グループ及び尾崎グループのエラーフリー変換法などの高速可変精度計算技術の展開に基づき、数値線形代数の問題の精度保証技術はスーパーコンピュータからパソコンまでスケーラブルに発展し充実した精度保証付き数値計算環境が構築できる状態になった。これに、山中グループや柏木などの関数の精度保証付き計算法、積分や常微分方程式の初期値問題の高速高精度な計算法、大石、高安、関根、渡部、山本らの関数方程式の精度保証理論とそのアルゴリズなどを総合的にまとめて精度保証付き数値計算ライブラリを供給できる状態になった。柏木は C++上に精度保証付き数値計算ライブラリ kv を構築し、10 年にわたって公開し、非常に使いやすく高性能な精度保証付き計算環境を提供した。関根は kv に Policy-based Design を加えることで HPC 技術を導入し、融通無碍に高速で使い勝手のよい精度保証付き計算環境を実現した。これらの計算機環境は大石進一編著「精度保証付き数値計算の基礎」(コロナ社, 2018 年)の出版とあわせ、計算機環境と理論が精度保証付き数値計算によって問題を解決したいと考える研究者がすぐにそれを利用して研究成果を得られる環境が実現された。

vi. 「精度保証に必要なキー定数の具体的算出」　関数方程式の精度保証付き数値計算においては近似の評価をオーダーだけでなく事後的に具体的に計算できるようにすることが必要となることがある。この定数については、大石グループの関根・水口・田中・劉、小林グループ、渡部グループ、山本グループが非常によい成果を挙げ、様々なキー定数が体系的に計算できる環境が実現された。

vii. 「精度保証フロンティアの開拓」　上記発展の基盤上にナビエ・ストークス問題のミレニアム問題へのアプローチや、2 次元多様体のポアンカレ予想や幾何学化問題へのアプローチ、解の性質の精度保証、漸近優対角行列理論の創始、非周期解の存在検証。可積分系理論との橋渡しなど様々な研究のフロンティアを開拓する成果が得られた。これらは主に研究分担者間の共同研究とそれより広い範囲の問題意識を持った研究者との共同研究の成果として得られた。

viii. 「可積分系研究の展開」　超離散化という高橋が追い求めてきた数理構造が可積分系の理論からそれ以外の系の構造の発見へと深化し、まだ、体系化まではできていないが、非常に面白い例題が次々と発見された。

(2)顕著な成果

＜優れた基礎研究としての成果＞

1. 精度保証ライブラリの基盤構築とスタンダードの公開
概要:　精度保証付き数値計算を行うオープンソースのライブラリとして kv と VCP を開発した。

精度保証を行う研究者の必須のツールとなっており、また精度保証の研究者以外にも広がりつつある。また、精度保証の最先端のスタンダードを記述した書籍「精度保証付き数値計算の基礎」を出版した。浮動小数点数・線形計算・数値積分・初等関数・微分方程式・最適化・幾何学など多岐にわたり網羅された渾身の1冊である。

2. 数値線形代数の基盤計算とHPC への展開

概要： 行列の固有値問題・特異値分解は重要な基盤計算として知られている。それらの問題の近似解の精度を高速に改善する斬新なアルゴリズムを開発し、その 2 次収束性を数学的に証明した。アルゴリズムは行列積を中心とした設計になっており、この行列積の高精度計算法も独自に開発した。また、このアルゴリズムを大規模分散並列計算環境（スーパーコンピュータ）に展開し、有効性を確認した。

3. 非線形偏微分方程式や非線形遅延微分方程式などに対する計算機援用証明法の進展

概要： 非線形偏微分方程式や非線形遅延微分方程式などには極めて多様な解が現れる。乱流、カオス、概周期解、分数調波解、非対称解などである。また、コンピュータで解くときの近似解には真の解に収束しない解（幻影解）も現れる。そこで、幻影解を排除し、極めて複雑にかつ多重に現れる解の存在を精度保証付き数値計算に基づき計算機援用証明できる数学的方法論を成果 1 で述べた精度保証基盤の上に確立した。

＜科学技術イノベーションに大きく寄与する成果＞

1. 精度保証付き数値計算ライブラリの開発

概要： Policy-based Design に基づく精度保証付き数値計算ライブラリの構築及び整備を C++ 言語で行い公開（ https://verified.computation.jp ）した。公開したライブラリは kv ライブラリの機能を関数方程式の精度保証法まで生かせるような拡張を目標とした数値線形代数及び微分方程式の精度保証ライブラリである。ポリシーの切り替えによりユーザーが今必要としているアルゴリズムを型の宣言のみで切り替えの選択を可能としたことが特徴である。

2. スーパーコンピューティングへの貢献

概要： 日本の国産スーパーコンピュータは京・富岳を代表とするように性能は世界トップクラスである。この環境における高速な計算が議論の中心であったが、精度の軸も加えた高速・高信頼計算への展開に大きく貢献する数値線形代数のアルゴリズムを提案した。実際に京コンピュータで電子状態計算から現れる大規模問題の精度保証に成功した。近年では東京大学の Wisteria や名古屋大学の不老で大規模固有値問題を解き、高速に高精度な結果を得られることを確認した。

3. 非線形偏微分方程式や非線形遅延微分方程式など極めて解くことが難しい数学的問題の計算機援用証明法の基盤の構築

概要： 関数方程式の有限次元近似において、その近似解におけるヤコビ行列の最小特異値が一定になる経験則の発見と漸近優対角行列理論の創始による広い対象における数学的証明に成功した。また、フレッシェ微分の逆作用素の評価方法は中尾の方法、Plum の方法、大石の方法に大別される。これに対し、新たに無限次元ガウスの消去法というアルゴリズムを考案することで、いずれの手法よりも精度が良くなる新しい精度保証付き数値計算法のアルゴリズムの開発に成功した。また、解の存在のみならず、正値性、符号反転、解の爆発などその特徴的な性質を精度保証付き数値計算により証明する手法の開発。これにより、現象が望まれる性質を持つかどうかを数学的に判定する計算機援用解析法を開発した。また、ガレルキン法による概周期解の計算法を開発した。また、精度保証法において必要となる数学的定数の効率的計算法を確立した。その結果、3 次元ナビエ・ストークス方程式の解の存在と一意性検証の計算機援用証明法の進展をもたらした。また、3 次元幾何学におけるポアンカレ予想に関わる 3 次元多様体の双曲性判定の計算機援用証明法の確立した(HIKMOT アルゴリズ

ムの提唱と数学者へのオープンソースプログラム提供)。

＜代表的な論文＞

1. 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
概要： 本論文は、実対称行列のすべての固有値及び固有ベクトルを高精度に求めるための数値計算アルゴリズムを提案している。具体的には、与えられた初期値に対して反復的に精度を改善し、真の固有値及び固有ベクトルに収束させるものである。提案アルゴリズムの主計算は行列積であるため、最適化された数値計算ライブラリによって計算機の性能を十分に引き出すことができる(2020 年度日本応用数理学会論文賞受賞)。

2. K. Sekine, M.T. Nakao, S. Oishi, A new formulation using the Schur complement for the numerical existence proof of solutions to elliptic problems: without direct estimation for an inverse of the linearized operator. Numerische Mathematik, Volume 146, 907-926, 2020. DOI: 10.1007/s00211-020-01155-7
概要： 関数方程式の解に対する精度保証付き数値計算法で重要となる線形化作用素の逆作用素の評価は、無限次元問題であるため従来はノルムによる過大評価しか行えなかった。これに対し、有限次元と無限次元の分離及びブロック作用素化することで、無限次元問題でもガウスの消去法を可能な状況にし、従来の方法に比べ非常に精度が良くなる新たな精度保証法を提案した。

3. K. Tanaka, Numerical verification method for positive solutions of elliptic problems, Journal of Computational and Applied Mathematics, Volume 370, 2020, 112647. DOI: 10.1016/j.cam.2019.112647
概要： 解の正値性を必要とする数理モデルには非常に多い。そこで、楕円型偏微分方程式の解の存在性を検証した後に、追加で正値性を検証する新しいアルゴリズムを提案した。従来のアルゴリズムでは、解の存在検証の他に得られにくい L^∞評価を必要としていたが、新しいアルゴリズムでは、解の存在性を検証する際に得られる H^1_0 評価のみを利用して正値性を検証することに成功した。

§2 研究実施体制

(1) 研究チームの体制について

(1)「大石」グループ

① 研究代表者：大石 進一 (早稲田大学理工学術院 教授)

② 研究項目

・モデリングのための精度保証付き数値計算法の開発

(2)「荻田」グループ

① 主たる共同研究者：荻田 武史 (東京女子大学現代教養学部 教授)

② 研究項目

・無誤差変換法を用いた高速・高精度な数値線形代数アルゴリズムの開発

(3)「山本」グループ

① 主たる共同研究者：山本 野人 (電気通信大学情報理工学部 教授)

② 研究項目

・微分方程式に対する精度保証の開発

(4)「高橋」グループ
① 主たる共同研究者：高橋 大輔 （早稲田大学理工学術院 教授）
② 研究項目
・可積分系研究の厳密解析の展開

(5)「渡部」グループ
① 主たる共同研究者：渡部 善隆 （九州大学情報基盤研究開発センター 准教授）
② 研究項目
・非線形偏微分方程式に対する計算機援用証明

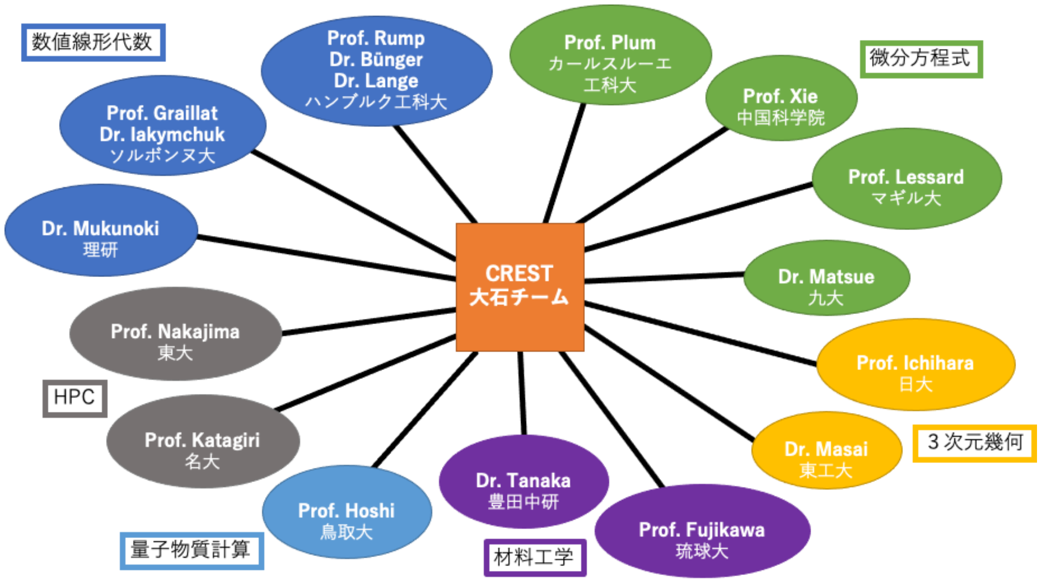
(6)「小林」グループ
① 主たる共同研究者：小林 健太 （一橋大学大学院経営管理研究科 教授）
② 研究項目
・有限要素法の誤差評価と精度保証付き数値計算への応用

(7)「尾崎」グループ
① 主たる共同研究者：尾崎 克久 （芝浦工業大学システム理工学部 教授）
② 研究項目
・線形計算に対する高精度かつ高速なアルゴリズムの開発とその応用

(8)「山中」グループ
① 主たる共同研究者：山中 脩也 （明星大学情報学部 准教授）
② 研究項目
・精度保証理論に基づく計算基盤技術の高性能化

(2)国内外の研究者や産業界等との連携によるネットワーク形成の状況について

数値線形代数分野では、Siegfried M. Rump 氏・Florian Bünger 氏・Marko Lange 氏（ハンブルク工科大学）とそれぞれ共同研究を実施した。偏微分方程式分野では、Michael Plum 氏（カールスルーエ工科大学）、Xie 氏（中国科学院）と、常微分方程式分野では、Jean-Philippe Lessard 氏（マギル大学）、松江要氏（九州大学）とそれぞれ共同研究を実施した。他分野への展開としては、数学（3次元幾何）の市原一裕氏（日本大学）、正井秀俊氏（東京工業大学）、HPC 分野の中島研吾氏（東京大学）、片桐孝洋氏（名古屋大学）、計算物理学（量子物質計算）の星健夫（鳥取大学）、材料工学の田中真人氏（豊田中央研究所）、藤川正毅氏（琉球大学）とそれぞれ共同研究を実施した。


数値線形代数
Prof. Rump
Dr. Bünger
Dr. Lange
ハンブルク工科大
Prof. Plum
カールスルーエ
工科大
微分方程式
Prof. Xie
中国科学院
Prof. Graillat
Dr. Iakymchuk
ソルボンヌ大
Prof. Lessard
マギル大
Dr. Mukunoki
理研
CREST
大石チーム
Dr. Matsue
九大
Prof. Nakajima
東大
Prof. Ichihara
日大
HPC
Prof. Katagiri
名大
Dr. Masai
東工大
3次元幾何
Dr. Tanaka
豊田中研
Prof. Hoshi
鳥取大
Prof. Fujikawa
琉球大
量子物質計算
材料工学