

「シミュレーション技術の革新と実用化基盤の構築」

平成 16 年度採択研究代表者

大石 進一

(早稲田大学理工学部コンピュータ・ネットワーク工学科 教授)

「数値線形シミュレーションの精度保証に関する研究」

## 1. 研究実施の概要

本研究では大きく次の2つを目標に研究を行っている:

- (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、既存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

本年度は、昨年度に引き続きこれらの課題に関する基礎的な部分の研究及びその応用についての研究を行い、それぞれについて次の成果を得た:

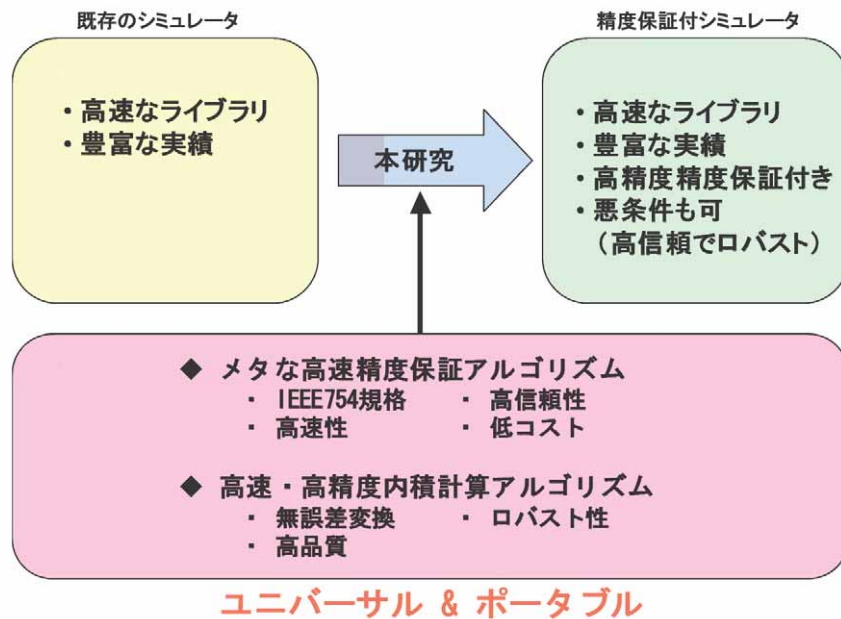
- (a) 大規模正定値疎行列を係数とする連立一次方程式の超高速精度保証アルゴリズムの開発(論文[1])。実対称行列の固有値・固有ベクトルに対する高速な精度保証付き数値計算法の提案(論文[3])。メモリ量を低減した精度保証法の開発(論文[6])。大規模疎行列を係数とする連立一次方程式の精度保証法の基礎的検討(学会発表)。
- (b) これまでに開発してきた高精度内積計算アルゴリズムを用いた高速かつ高精度な連立一次方程式の精度保証付き数値計算法の提案(論文[5])。シミュレーションに現れる計算幾何学の基礎的な問題である点と平面との位置関係を判定する高速かつロバストなアルゴリズムの開発(論文[4])。
- (c) Javaなどに適した有効丸めを用いないポータブルな連立一次方程式の数値解の精度保証法の提案(論文[2])。MatlabやScilabなどの主要シミュレータ向けの精度保証ツールボックス開

発の検討。

今後は、(a)及び(b)に関する基礎的な研究及び精度保証理論の確立と共に、(c)に関してそれらの主要シミュレータへの応用を推進することにより、上記の目標は十分に達成されるものと思われる。

## 2. 研究実施内容

本研究全体では、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することを目的としている。



そのために、(a)実問題に適用可能な精度保証付きシミュレータの開発、(b)悪条件な問題にも対応できるロバストな計算アルゴリズムの開発、(c)シミュレータ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、を具体的な目標とする。

これらの目標に対して、平成18年度の研究成果の概要は § 1の通りであるが、ここでは代表的な成果を以下で説明する。

(a) 1つは正定値行列に対する超高速精度保証アルゴリズムの開発(論文[1])である。本研究者は、これまでも線形問題に対する高速な精度保証アルゴリズムを提案してきた。ここで、「高速」というのは、数値解を得る手間とそれに対する精度保証の手間が同程度であることを意味する。すなわち、精度保証付きで数値解を計算した場合は、精度保証をしない場合と比べて、2倍から数倍程度の計算時間を必要とすることになる。これに対し、今回の研究成果では、係数行列が正定値であれば、精度保証の手間はほぼゼロで済むことを示した。すなわち、精度保証付きで数値解を計算しても、精度保証をしないで数値解を計算するのとはほとんど同じ計算時間で済む。これが「超高速」の意味である。今回開発した精度保証アルゴリズムでは、係数行列の正定値性も同時に証明している。本アルゴリズムでは、これまでに開発してきた高精度

内積計算アルゴリズムによる残差反復法も併用しており、高品質な精度保証結果が得られることも数値実験によって確認されている。本アルゴリズムは、疎行列に対するコレスキー分解法に基づいている。これは、反復解法よりは多くのメモリ量を必要とするが、係数行列の近似逆行列の計算は必要としない。したがって、直接解法を適用できる範囲の問題であれば、本アルゴリズムも適用可能である。そのため、疎行列のリオーダーリング手法を適用することにより、従来よりもさらに大規模な問題に対して精度保証が適用可能となった。

- (b) もう1つは、シミュレーションに現れる計算幾何学の基礎的な判定問題に対する高速かつロバストなアルゴリズムの開発である。たとえば、2次元では点と直線あるいは点と円の位置関係、3次元では点と平面の位置関係などの判定は、行列式の符号判定問題に帰着できる。このような問題は、数値シミュレーションにおいてよく用いられる有限要素法のメッシュ生成技術と関係が深い。品質の高い有限要素近似を得るためには、計算幾何学に関する判定問題を解きながら、できるだけ性質の良いメッシュを生成する必要があるが、計算機上で実行する以上、メッシュ生成にも計算誤差が混入してしまい、間違った判定がなされてしまうことがある。したがって、高品質な結果を得るためには、計算誤差によって性質の悪いメッシュが生成されてしまうのを避けることができるようなロバストな手法が不可欠である。この問題に関する研究は従来からなされてきたが、本研究において開発したアルゴリズムは、現在開発中の新しい高速かつ高精度な内積計算法に基づいており、入力データから得られる特性を考慮して今回の問題に特化したものである。これにより、本アルゴリズムでは、点と平面の位置関係を判定する問題において、従来の最高速の手法に対して実験的に約20%高速であることを示した。

結論として、本年度の目標は当初の予定通り達成できている。今後も本研究の目的を達成するために革新的なアイデアを生みながら研究を推進していきたい。

### 3. 研究実施体制

#### (1) 「精度保証」グループ

##### ① グループリーダー

大石 進一(早稲田大学 教授)

##### ② 研究項目

・大規模線形問題の精度保証付き数値計算法の開発とシミュレータへの適用

### 4. 研究成果の発表等

#### (1) 論文発表(原著論文)

- S. M. Rump, T. Ogita: Super-fast Validated Solution of Linear Systems, Journal of Computational and Applied Mathematics, 199:2 (2007), 199–206.
- K. Ozaki, T. Ogita, S. Miyajima, S. Oishi, S. M. Rump: A Method of Obtaining Verified Solutions for Linear Systems Suited for Java, Journal of Computational and Applied Mathematics, 199:2 (2007), 337–344.

- 宮島 信也, 荻田 武史, 大石 進一: 実対称行列の各固有対の精度保証付き数値計算法, 日本応用数理学会論文誌, 16:4 (2006), 535-552.
- 尾崎 克久, 荻田 武史, S. M. Rump, 大石 進一: 点と平面との位置関係を判定する高速かつロバストなアルゴリズム, 日本応用数理学会論文誌, 16:4 (2006), 553-562.
- 大石 進一, 荻田 武史, 太田 貴久: 高精度内積計算アルゴリズムを用いた連立一次方程式の精度保証付き数値計算法, シミュレーション, 25:5 (2006), 170-178.
- 荻田 武史, 大石 進一: 連立一次方程式のメモリ量を低減した精度保証付き数値計算法, シミュレーション, 25:5 (2006), 179-184.