

「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

早稲田大学理工学術院基幹理工学部・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:

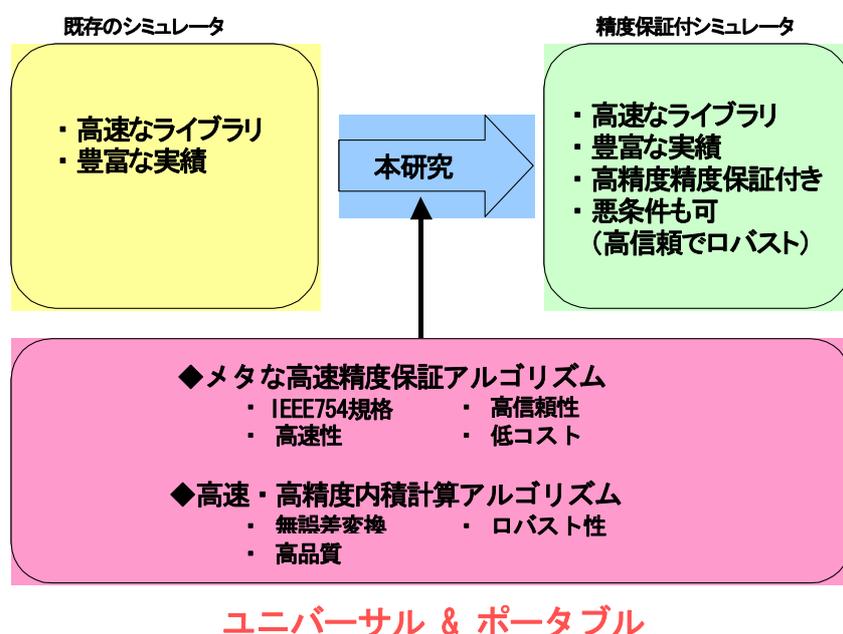
- (a) 連立一次方程式の近似解に対する誤差限界の上限・下限を用いたシャープな精度保証法の開発(論文[3,6])。Rump の方法による任意悪条件行列の逆行列計算法の収束性に関する研究(論文[4])。
- (b) これまでに開発してきた高精度内積計算アルゴリズムの効率的な並列化に関する研究(論文[7])。
- (c) Matlab などに適した BLAS level3 を利用した高精度行列乗算法の開発(論文[2], 口頭講演

[3]。悪条件な非線形代数方程式についての研究(論文[1])。線形二点境界値問題の離散化についての研究(論文[5])。

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さらに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19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) 連立一次方程式の近似解に対する誤差限界の上限・下限を用いたシャープな精度保証法を提案した。本研究者らは、これまでも連立一次方程式に対する比較的過大評価の少ない精度保証アルゴリズムを提案してきた。今回は、特に、近似解に対する誤差限界の上限・下限を同時に考えることにより、任意に過大評価を少なくする方式を開発した。また、これまで未解決問題であった Rump の方法による任意悪条件行列の逆行列計算法の収束性について、ある程

度の条件下での証明に成功した。

- (b) 高精度内積計算アルゴリズムの効率的な並列化に関する研究を行った。内積計算レベルの並列化は、アーノルディアアルゴリズムを用いた固有値計算や、ヤコビアルゴリズムを用いた特異値計算等に有効である。本研究により、並列化版のアルゴリズムは、逐次版のアルゴリズムと同程度の誤差限界を持ち、さらに共有メモリ計算機上で数倍程度の性能向上が可能であることを示した。
- (c) 密行列の乗算に対し、BLAS level3 を利用した高速かつ高精度な計算法を開発した。これは、特に Matlab のようなインタプリタ向きの方法であり、精度保証付きシミュレータの基本アイデアのひとつとなる可能性がある。また、非線形問題への応用として、悪条件な非線形代数方程式のクラスについて研究を行った。

結論として、平成19年度の目標は当初の予定通り達成できている。今後も本研究全体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 研究者名: 大石 進一 (早稲田大学)

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)

- [1] T. Nishi, Y. Nakaya, T. Ogita, S. Oishi: A Class of Ill-conditioned Nonlinear Algebraic Equations, Proceedings of 2007 International Symposium on Nonlinear Theory and its Applications, Vancouver, Canada, 2007, 172-175.
- [2] K. Ozaki, T. Ogita, S. M. Rump, S. Oishi: Accurate Matrix Multiplication with Multiple Floating-point Numbers, Proceedings of 2007 International Symposium on Nonlinear Theory and its Applications, Vancouver, Canada, 2007, 337-340.
- [3] T. Ogita, S. Oishi: Tight Error Bounds for Approximate Solutions of Linear Systems, Proceedings of 2007 International Symposium on Nonlinear Theory and its Applications, Vancouver, Canada, 2007, 345-348.
- [4] S. Oishi, K. Tanabe, T. Ogita, S. M. Rump: Convergence of Rump's Method for Inverting Arbitrarily Ill-conditioned Matrices, Journal of Computational and Applied Mathematics,

205:1 (2007), 533–544.

- [5] T. Yamamoto, S. Oishi, Q. Fang. Discretization principles for linear two-point boundary value problems, II., *Numer. Funct. Anal. Optimz.*, 29 (2008), 213–224.
- [6] T. Ogita, S. Oishi: Tight Enclosures of Solutions of Linear Systems, *International Series of Numerical Mathematics*, Birkhauser Verlag, to be published.
- [7] N. Yamanaka, T. Ogita, S. M. Rump, S. Oishi: A Parallel Algorithm for Accurate Dot Product, *Parallel Computing*, to be published.