

大石 進一

早稲田大学理工学術院基幹理工学部・教授

非線形系の精度保証付き数値計算法の基盤とエラーフリーな計算工学アルゴリズム の探求

§1. 研究実施の概要

本プロジェクトは100万次元の連立非線形方程式を精度保証付き数値計算によって解く方式を設計することと、計算工学アルゴリズムの高速かつ完全精度保証化を目標としている。

そのために今年度行った研究は以下の通りである。

- (A) 高速で適応的に高精度化できる区間演算方式の確立。また丸めモードを変更しない区間演算の開発および無誤差変換との組み合わせ、初等関数の高精度計算の一般的な枠組みの検討した。結果として、ライブラリの開発、高速な区間演算法の開発に成功した。
- (B) 悪条件問題に対するロバストな行列分解法と、その手法に必要な高速かつ高精度な行列積の計算法を開発できた。
- (C) 点と直線の位置関係の判定問題の難しさに対する考察を与えた。また凸包に対する精度保証化に対するパフォーマンスを示した。
- (D) 非線形偏微分方程式の精度保証付き数値計算法を確立するため、ある程度滑らかな基底を用いる効果的な残差評価を利用し適用範囲を拡大し、また有限要素法に基づく任意多角形領域での偏微分作用素の固有値に対する精度保証付き評価を可能にした。

平成 22 年度の目標分は十分に達成され、当初の予定通り研究は進捗しているため、今後も全体計画に沿って研究が推進できる見込みである。

§2. 研究実施体制

(1)「早稲田大学」グループ

- ① 研究分担グループ長:大石 進一（早稲田大学理工学術院、教授）
- ② 研究項目

・非線形系の精度保証付き数値計算法の基盤とエラーフリーな計算工学アルゴリズムの探求

(2)「東京女子大学」グループ

① 研究分担グループ長: 荻田 武史 (東京女子大学現代教養学部、准教授)

② 研究項目

・悪条件問題に関する高速かつ高精度な数値計算法の確立

(3)「芝浦工業大学」グループ

① 研究分担グループ長: 尾崎 克久 (芝浦工業大学システム理工学部、助教)

② 研究項目

・計算工学のための精度保証付きアルゴリズムの開発

§3. 研究実施内容

(文中に番号がある場合は(4-1)に対応する)

本研究全体では、100万次元の連立非線形方程式を精度保証付き数値計算によって解く方法の開発と、計算工学における精度保証アルゴリズムの基盤として計算幾何学アルゴリズムの高速かつ完全精度保証化を目標としている(図1)。

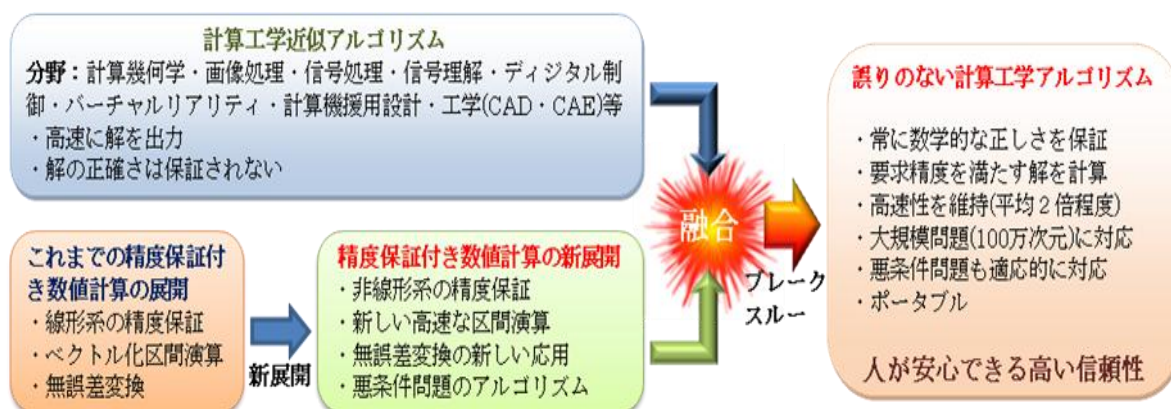


図1. 本研究の目標と戦略

本年度は、この基盤となる研究を実施し、以下の成果を得た。

- (A1) 最近点への丸めモードを用いた区間演算・初等関数の精度保証付き数値計算法を実装した Scilab で動作するツールボックス VTOOLS (Verification Toolbox for Scilab)を開発した。区間演算を最近点への丸めモードのみで実現しているため、プログラムコードのポータビリティが非常に高い方法である。また、連立一次方程式や固有値問題、特異値問題に対する精度保証アルゴリズムも実装済である。このツールボックスは Scilab Toolbox Japan Contest 2010 における一般カテゴリ部門で最優秀賞を受賞した。
- (A2) 前年度の研究を続けて推進し、区間行列と区間行列の積、また点行列と区間行列の積について、高速な方式を提案した。提案手法は、最低行列積1回で区間演算できるために、点行列と点行列の積とほぼ同等の計算時間で計算ができる。さらに、区間行列の正則性の検証に対して応用し、提案手法は行列積1回でも、従来法とほぼ同等の働きをする例を示し、その成果を論文投稿した。
- (B1) 悪条件行列にも適用可能なロバストな行列分解法を開発した。これは、従来の信頼性の高い高速な数値計算アルゴリズムと高精度計算を融合することに成功した革新的な方式であり、問題の難しさに応じて反復計算によって計算精度を増加させる適応的なアルゴリズムを開発可能とする。本研究成果に関連した論文[原著論文 1]が、この分野で最も権威のある SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications で出版されて以来、月間ダウンロード数で常に上位を維持している(2010年8～2011年2月の7ヶ月連続)。

- (B2) 行列積に関して、行列のエラーフリー分割を応用した高精度行列積の研究を行った。性能がチューニングされた BLAS の関数を主に用いるために、高速かつ並列性が非常に高いことが示された。疑似4倍精度を達成する高速な計算方式を開発した。また、行列の分割数を事前に高速に見積もることができるため、高速である場合のみに提案手法を用いるなど、適応的な手法も構築可能である。この手法は悪条件問題に対する精度保証法への応用が期待される。
- (C1) 点と直線の位置関係の判定問題について、テスト集合に関して議論をし、問題の難しさに関する考察を与えた。行列式の計算方式によって、浮動小数点フィルタが精度保証を成功・失敗したりする例を与えた。また、ライブラリの公平な比較のために、計算方式に依存せず、同じような難しさを持ったテスト問題の生成法を提案した。
- (C2) 浮動小数点フィルタに関して、精度保証のための誤差限界をメインループ外で一度求めてしまい、メインループ内では誤差限界を求める必要がない高速な精度保証方式を開発した。この手法を応用し、2次元凸包を精度保証付きで求めた。近似計算に対する精度保証が要する計算間の比を逐次添加法・包装法・Graham のアルゴリズムで求めた。問題が良条件な場合には、平均して近似計算にかかるコストの5%~20%程度で正しい凸包を得られることがわかった。また、浮動小数点フィルタは、オーバーフローに対して特別な分岐処理が必要のないことを示した。
- (D1) 非線形偏微分方程式の精度保証付き数値計算法を確立するため、ある程度滑らかな基底を用いる効果的な残差評価を利用し、適用範囲を拡大した。これにより、これまで証明不可能であった非線形偏微分方程式の解の存在と誤差の範囲内での一意性を証明することに成功した。これまでの Newton-Kantorovich の定理を用いた非線形偏微分方程式の精度保証付き数値計算法は、Emden 方程式の解をはじめとする非線形性が大きな解に対して、その性質から解の一意存在性の証明が困難であった。しかし、ある程度滑らかな基底を用いる効果的な残差評価を利用することで既存の理論における過大評価を回避し、非線形性の大きな解の存在と誤差の範囲内での一意性を証明することに成功した。これにより提案手法の適用範囲が拡大し、非線形偏微分方程式の精度保証付き数値計算法の確立に向けて一歩前進することができた。
- (D2) 楕円型偏微分方程式に対する精度保証法において、従来法の多くは凸領域を仮定することが多いが、非凸な領域で偏微分作用素は特異性があるので非常に難しい問題である。これに対し、Hypersphere equation 等の方法を用いて、任意多角形領域上での偏微分作用素の固有値評価を精度保証付きで求める手法を開発した。この結果は、国内外の研究会で高い評価を受けた。また、この手法を用いた Web アプリケーションを開発し、ユーザーがオンライン上でグラフィカルなシミュレーションを行えるデモプログラムを作成することによって、研究成果の社会への還元に努めた。

結論として、平成 22 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。

§4. 成果発表等

(4-1) 原著論文発表

●論文詳細情報

- [1] T. Ogita: Accurate Matrix Factorization: Inverse LU and Inverse QR Factorizations, SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications, Vol. 31, Issue 5, pp.2477-2497, 2010. (DOI: 10.1137/090754376)
- [2] S. M. Rump, T. Ogita, S. Oishi: Fast High Precision Summation, NOLTA, IEICE, Vol. 1, No. 1, pp.2-24, 2010. (JOI : JST.JSTAGE/nolta/1.2)
- [3] S. M. Rump, S. Oishi: Verified computation of a disc containing exactly k roots of a univariate nonlinear function, NOLTA, IEICE, Vol. 1, No. 1, pp.89-96, 2010. (JOI: JST.JSTAGE/nolta/1.89)
- [4] A. Takayasu, S. Oishi, T. Kubo: Numerical Existence Theorem for Solutions of Two-Point Boundary Value Problems of Nonlinear Differential Equations, NOLTA, IEICE, Vol. 1, No. 1, pp.105-118, 2010 (JOI: JST.JSTAGE/nolta/2.74)
- [5] N. Yamanaka, T. Okayama, S. Oishi, T. Ogita: A fast verified automatic integration algorithm using double exponential formula, NOLTA, IEICE, Vol. 1, No. 1, pp.119-132, 2010. (JOI JST.JSTAGE/nolta/1.119)
- [6] A. Takayasu, S. Oishi: A Method of Computer Assisted Proof for Nonlinear Two-point Boundary Value Problems Using Higher Order Finite Elements, NOLTA, IEICE, Vol. 2, No. 1, pp.74-89, 2011.(JOI:JST.JSTAGE/nolta/2.74)
- [7] K. Ozaki, T. Ogita, S. Oishi: Tight and efficient enclosure of matrix multiplication by using optimized BLAS, Numerical Linear Algebra With Applications, Vol. 18, Issue 2, pp. 237-248, 2011.(DOI: 10.1002/nla.724)