「数学と諸分野の協働によるブレークスルーの探索」
平成21年度採択研究代表者

H23 年度
実績報告

大石　進一

早稲田大学理工学術院・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. 研究実施体制

(1)「早稲田大学」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

・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 主たる共同研究者: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　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、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

§2. 研究実施内容

(文中に番号がある場合は(3−1)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).

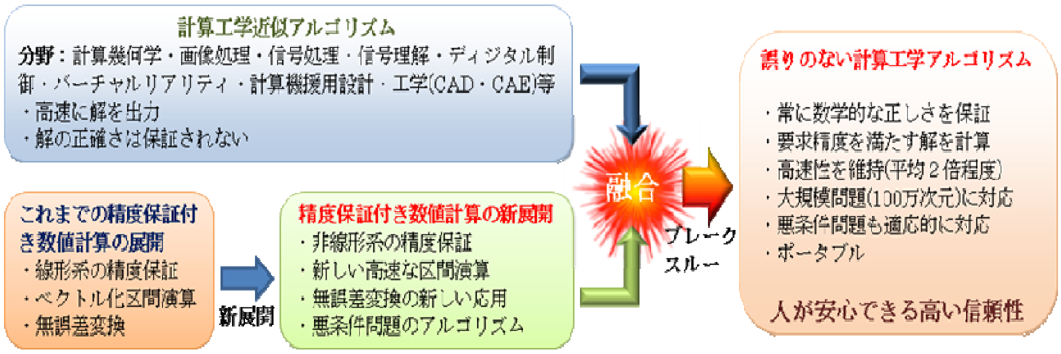

図1． 本研究の目標とストラテジー

本プロジェクトは大きく次の2つを目標に研究を行っている：

I. 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.

II. 計算工学における広範な応用に鑑み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中心的に取り上げ，重要な凸包の計算アルゴリズムなどについて，近似計算に対して完全精度保証化(必ず成功するアルゴリズム)を平均的な計算量を2倍以内で達成する.

これらを達成するために，平成 23 年度は今後の精度保証付き数値計算の基礎となる下記についての研究を行った.

(A) 指数関数や三角関数などに対し，関数値を高精度かつ高速に精度保証付きで計算する手法の構築，また区間演算における基礎・高精度化の研究

(B) 任意多角形領域上での精度保証付き数値計算の理論構築，残差改善方法の研究

(C) 大規模スパース系の固有値問題に対する高速・高精度な精度保証法について研究

(D) 悪条件問題に対するロバストな行列分解アルゴリズムの開発

(E) 良条件な問題に対する浮動小数点演算の結果の正当性を高速に検証する浮動小数点フィルタに関する研究

上記における研究内容・成果は以下の通りである.

(A1) 昨年度開発したツールボックスを基礎とし，指数関数，対数関数，三角関数に対して約四倍精度の結果を与える精度保証付き数値計算法を提案した．昨年度開発したツールボックス同様，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．四倍精度程度の精度を保証する計算法は多倍長に基づく計算法が知られていたが，約四倍精度の計算には倍精度浮動小数点数に基づく計算法が

高速に計算できることを示した.

(A2) 悪条件問題に対するアルゴリズムや残差計算などの精度が要求される問題に対して有効な高精度行列積アルゴリズムを開発した[4]. この成果を組み込んだ Scilab 上のツールボックスを開発し, Scilab Toolbox Contest in Japan で受賞した. また区間行列に対する高速な行列積アルゴリズムを開発した[3]. 区間行列の積を計算する場合, 現在までの手法では行列積2回を最低でも必要としたが, 行列積1回で計算が終わる高速な方式を提案できた. この高速化により, 線形の問題の精度保証自体の高速化に貢献ができる.

(B) 非線形偏微分方程式の精度保証付き数値計算法に関する先行研究では, 対象の領域を凸領域に仮定することが多い. しかし, 実用的な手法を確立するために本年度は任意多角形領域上で偏微分方程式の解を検証した. 特に対象領域が非凸な場合, 偏微分方程式の弱解に滑らかさの欠如が起こり, 従来の誤差評価式が破綻する. そこで Hyper-circle を利用した事後誤差評価式を用いて, 解の検証を可能にした. 本手法は我々が提案している従来手法の高い汎用性を維持するので, 先行研究の非凸領域上への対応である領域の変換などの面倒な事前処理が不要になる. すなわち任意多角形領域について自動的に対応することが可能になった. さらに Raviart-Thomas 混合型有限要素を用いた高精度なある作用素方程式に対する残差評価法を提案した. 任意多角形領域を考える場合, 滑らかさの欠如により残差評価が減少しない現象が起こる. これを回避するために混合型有限要素を用いた平滑化を行い, 残差が減少するような評価式を提案した. 偏微分方程式の解の検証について重要な役割を果たす微分作用素の固有値評価について、Lehmann-Goerisch の定理と特異基底関数を合わせて、高精度な固有値評価方法を提案した. 従来の有限要素法の計算結果と比べると、精度は 10000 倍以上良くなることが分かっている. また、提案した方法は非凸な領域での問題に自然的に対応できるので、この方法によってより多くの非線形偏微分方程式の解を高精度に評価することが期待できる.

(C) スパースで悪条件な行列方程式に帰着される非線形問題の精度可変な非定常反復数値解法およびそれに基づく精度保証方式に関する研究を実施した. 具体的には, スパース系線形方程式に対する反復解法の高精度化について検討し, エラーフリー変換を用いて Krylov 部分空間法に基づくアルゴリズムの高速な実装に成功した. さらに, 対称スパース系線形方程式に対して, 複数の固有値の上界および下界評価を利用した新しい精度保証法を提案した. さらに, この方法を非対称系に拡張する方法も考案した. これにより, 従来, 精度保証が不可能または困難であった問題について, それが可能となる問題の範囲が拡張された.

(D) 悪条件行列に対する高精度かつロバストな逆 Cholesky 分解アルゴリズム[1]や行列式の計算アルゴリズム[2]を提案した. これにより, 通常の数値計算アルゴリズムでは, まったく正しく

ない解が得られてしまうような悪条件な問題についても，効率良く高精度な解を得ることが可能となった．

(E) 点の配置がランダムであるような良条件な問題に対して，浮動小数点フィルタが成功する確率を求める研究を開始した．これにより，多くの問題が浮動小数点フィルタによって精度保証され，高速に正確な凸包などが求められることを示す．

以上の平成23 年度の成果を基に，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．

§3. 成果発表等

（3－1） 原著論文発表

●論文詳細情報

[1] T. Ogita, S. Oishi: Accurate and Robust Inverse Cholesky Factorization, Nonlinear Theory and Its Applications, IEICE, Vol. 3, No. 1, pp.103-111, 2012. (DOI:10.1587/nolta.3.103)

[2] T. Ogita: Accurate and Verified Numerical Computation of the Matrix Determinant, International Journal of Reliability and Safety, Vol. 6, Issue 1-3, pp.242-254, 2012. (DOI:10.1504/IJRS.2012.044287)

[3] K. Ozaki, T. Ogita, S. M. Rump, S. Oishi: Fast Algorithms for Floating-point Interval Matrix Multiplication, Journal of Computational and Applied Mathematics, Vol. 236, Issue 7, pp. 1795-1814, 2012. (DOI: 10.1016/j.cam.2011.10.011)

[4] K. Ozaki, T. Ogita, S. Oishi, S. M. Rump: Error-Free Transformation of Matrix Multiplication by Using Fast Routines of Matrix Multiplication and its Applications, Numerical Algorithms, Vol. 59, Issue 1, pp. 95-118, 2012. (DOI: 10.1007/s11075-011-9478-1)

[5] N. Yamanaka, M. Kashiwagi, S. Oishi, T. Ogita, A Note on a Verified Automatic Integration Algorithm, Reliable Computing, Vol. 15, Issue 2, pp.156-167, 2011.

[6] K. Ozaki, T. Ogita, S. Oishi: A robust algorithm for geometric predicate by error-free determinant transformation, Information and Computation, in press (DOI: 10.1016/j.ic.2011.09.007).