

「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

H24 年度 実績報告

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

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)。

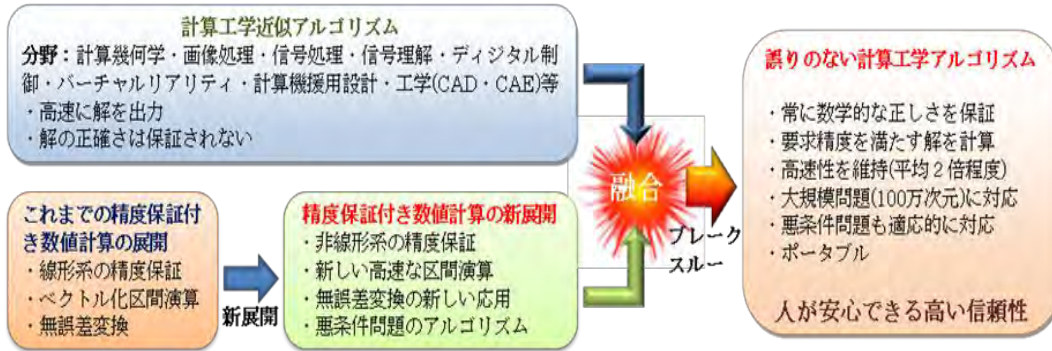


図1. 本研究の目標と戦略

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:

- (1) 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。
- (2) 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年度は下記の精度保証付き数値計算の研究を行った。

- (A) 双曲線関数、逆双曲線関数、逆三角関数の計算法を提案
- (B) 誤差関数やガンマ関数の高速かつ高可搬な精度保証付き計算法の構築
- (C) 大規模スパース系の固有値問題に対する高速かつ高精度な精度保証法の開発
- (D) 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
- (E) 混合型有限要素法を使った作用素方程式の残差改善方法を開発
- (F) 悪条件問題を正しく解くための適応的な高精度計算法の設計
- (G) 精度保証理論の凸包などの応用問題への適用

上記における研究内容・成果は以下の通りである。

- (A) 開発したツールボックスを基礎とし、既に関連済みの指数関数や三角関数を利用して逆双曲線関数、逆三角関数の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。これまでに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保証計算においては、多倍長に基づく計算法に比べて倍精度浮動小数点数に基づく計算法のほうが高速に計算できることを示した。

- (B) 誤差関数やガンマ関数など特殊関数の高速かつ高可搬な精度保証付き計算法について、それらを構築するのに必要な精度保証付き初等関数や精度保証付き数値積分の構築を達成した。精度保証付き数値積分計算法についても最近点への丸めモードのみで実現し、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ため様々な環境で高速に動作する。
- (C) 悪条件な正定値行列に対するロバストな行列分解の反復アルゴリズムを提案した[論文 1]。そして、これを用いて行列の正定値性を保証できることも示した。また、同様のアルゴリズムで、行列式を高精度に求める方式も提案した[論文 7]。さらに、スパース系の線形方程式に対する精度保証法を提案し、精度保証付き数値計算の分野で最も規模が大きい国際会議において招待講演を行い、本研究チームの成果発表に努めた。
- (D) 任意多角形領域上での精度保証付き数値計算の理論を構築するため必要不可欠な微分作用素の固有値評価について、Laplace 作用素の他に一般的な自己共役楕円型微分作用素の固有値評価も検討した。特に、非凸な多角形領域に現れる特異性を処理するため、微分作用素に対応する **Hypercircle** を構築し、固有値の評価を可能にした。
- (E) 混合型有限要素法を使った残差評価方法を開発した[論文 4]。提案手法は補間関数の次数を同じにすれば、先行研究よりも良い評価を得る事ができる画期的な手法である。これを応用し、**FitzHugh-Nagumo** 型の連立非線形偏微分方程式の解の存在検証アルゴリズムを構築した。また、偏微分方程式の解に対する精度保証付き数値計算の理論において、基盤となる逆作用素ノルム評価の評価法を再考し、線形化作用素の固有値評価を利用した新しい評価法を提案することができた。さらに、微分方程式の初期値境界値問題の解の検証を目的として研究を行い、線形放物型問題の事前誤差評価法、非線形放物型問題の解の存在性・存在範囲を計算機上で検証する手法を開発した。また、これらの研究において、離散化スキームの選択によっては、解の検証に必要な評価定数が発散することを発見・例証した[論文 5]。
- (F1) 悪条件な係数行列に対する高精度反復法に応用可能な高精度行列積アルゴリズムに関して、計算量を減らす最適化を行った[論文 2]。係数を最適に見つけることで、アルゴリズム中の行列積の回数を削減できた。
- (F2) 適応的な手法の一番はじめに適用する浮動小数点フィルタについて研究が進展した。前年度までに、分岐処理が1回のみで浮動小数点例外を含めて正しく機能するフィルタを開発したが、数値結果が非正規化数であった場合でも良条件であれば結果を保証できるタイプの浮動小数点フィルタを別途開発できた。
- (G) 入力されるデータが、浮動小数点数ではなく、実数である場合であっても、近似された浮動小数点数と演算によって点と有向直線の位置関係を保証する高速な浮動小数点フィルタを開発し、凸包を求める包装法(**Gift Wrapping Algorithm**)に適用した。入力に誤差がある場合には、3 点の位置関係が不能という結果があり得るが、アルゴリズム中の途中計算で判定不能な状況が起きても、破綻せずに結果を出力するようにアルゴリズムを工夫した。

以上の平成24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

- [論文 1] Y. Yanagisawa, T. Ogita: Convergence analysis of accurate inverse Cholesky factorization, JSIAM Letters, 5 (2013), 25-28.
- [論文 2] K. Ozaki, T. Ogita, S. Oishi, S. M. Rump: Generalization of Error-Free Transformation for Matrix Multiplication and its Application, Nonlinear Theory and its Applications, IEICE, Vol. 4:1 (2013), 2-11.
(<http://dx.doi.org/10.1587/nolta.4.2>)
- [論文 3] Y. Morikura, K. Ozaki and S. Oishi: Verification methods for linear systems using ufp estimation with rounding-to-nearest, Nonlinear Theory and its Applications, IEICE, Vol. 4:1 (2013), 12-22. (DOI: <http://dx.doi.org/10.1587/nolta.4.12>)
- [論文 4] A. Takayasu, X. Liu, S. Oishi: Verified computations to semilinear elliptic boundary value problems on arbitrary polygonal domains , Nonlinear Theory and its Applications, IEICE, Vol. 4:1 (2013), 34-61. (DOI: <http://dx.doi.org/10.1587/nolta.4.34>)
- [論文 5] T. Kimura, T. Kinoshita and M. T. Nakao: Some remarks on the instability of approximate solutions for ODEs, Nonlinear Theory and its Applications, IEICE, Vol. 4:1 (2013), 80-87. (DOI: <http://dx.doi.org/10.1587/nolta.4.80>)
- [論文 6] T. Kimura: Validated solutions for P-matrix linear complementarity problems, Pacific Journal of Optimization, in press.
- [論文 7] T. Ogita: Robust Computation of Determinant, AIP Conference Proceedings, 1504 (2012), 1119-1123. (<http://dx.doi.org/10.1063/1.4772123>)
- [論文 8] K. Ozaki, T. Ogita, S. Oishi: Matrix Multiplication with Guaranteed Accuracy by Level 3 BLAS, AIP Conference Proceedings, 1504 (2012), 1128-1133. (<http://dx.doi.org/10.1063/1.4772125>)