早稲田大学大学院理工学研究科

博士論文審査報告書

論 文 題 目

Studies on fast verification of numerical solutions for matrix equations

連立一次方程式の数値解の高速精度保証に関する研究

申 請 者

荻田 武史
Takeshi Ogita

情報科学 非線形解析

2003 年 3 月

本論文では、連立一次方程式を電子計算機によって解いたときに得られる解の精度を検証することについて考えている。現在の計算機上で実数の計算を普通に行う場合、浮動小数点演算が用いられる。この浮動小数点演算は有限桁計算で実行されるため、演算結果も有限桁に丸められる。これによって生じる誤差を丸め誤差と言う。丸め誤差解析とは、数値計算アルゴリズムの過程で生じる丸め誤差の累積を見積もることや、その丸め誤差の影響を考えることによって数値計算アルゴリズムの信頼性や安定性を評価したりすることである。例えば、ガウスの消去法を用いて連立一次方程式を計算機上で解いたときに、得られた解（これを数値解と呼ぶ）が真の解に対してどれくらいの精度を持っているかを推定するのは丸め誤差解析の代表のひとつである。このようなアプローチは、１９４０年代の計算機の誕生と同時に von Neumann や Turing が開始し、その後、Wilkinson が後退誤差解析などの概念を導入することによってほぼ完成した。

そのような丸め誤差解析のアプローチに対して、１９５０年代に須永が実数の区間を基礎データ型とする区間演算という概念を導入した。浮動小数点数は実数の近似であるため、１つの浮動小数点数だけでは、誤差を表現することができない。そこで、求めたい実数の下界と上界を表す２つの浮動小数点数のペアで誤差まで表現することが考えられた。すなわち、両端を浮動小数点数とする区間（これを機械区間と言う）で実数を表すという考え方である。このような誤差解析の方法を区間解析と言う。その後、１９６０年代に Moore が区間解析を学位論文のテーマとし、専門書を出版するに至って、多くの研究者の研究対象となった。そして、１９８０年代に Karlsruhe 大学の Kulisch を中心とする研究グループが、丸め誤差を含む浮動小数点演算においても演算結果の数学的な正しさを実用的なレベルで保証できることを明らかにし、数値計算の精度を保証するという観点から数値計算法全体を見直す動きが世界的規模で始まった。こうして生まれたのが精度保証付き数値計算である。例えば、ガウス消去法は、連立一次方程式の解を有限回の四則演算の組み合わせで求める方法すなわち直接解法であるため、四則演算を機械区間演算に置き換えることによって、真の解を含む区間が数値解として得られる。これを区間ガウス消去法と言う。

しかし、そのような区間解析のアプローチだけでは、様々な問題が生じることが分かった。第１に、機械区間演算を演算の単位と考えると、１回の演算毎に浮動小数点の丸めの切り替えが必要となり、計算速度が極端に低下してしまうことである。そして、高速化された既存の数値計算ライブラリを利用することはできなくなる。第２に、例に挙げた区間ガウス消去法では、その計算過程で区間の幅の爆発がみられることが多い。つまり、これまでの区間解析のテクニックだけでは、計算効率が悪い上に、精度保証が成功した場合でも得られた数値解の区間が広くなりほとんど意味のない結果となることもある。

区間解析のこのような点の反省に基づき、大石らは区間演算を演算の基本単位

と考えるのではなく、内積計算や行列乗算などの大きな単位を計算の基礎とすることで精度保証をすることを考えた。これを、浮動小数点演算の丸めモード制御演算方式と呼ぶ。これにより、既存の数値計算ライブラリの高速性を失うことなく精度保証付き数値計算が行えるようになった。

本研究は、この思想を精度保証付き数値計算アルゴリズムの開発の出発点として考えている。本論文は、以上のような数値計算の現状を踏まえ、連立一次方程式の数値解の高速かつシャープな精度保証方法に関する研究成果をまとめたものである。

第１章では、本研究の目的、概要および構成について述べている。

第２章では、大石らの提案したＩＥＥＥ標準７５４に従う計算機における倍精度浮動小数点演算の丸めモード制御演算方式について概説している。丸めモード制御演算方式は、連立一次方程式や固有値問題などの線形問題に対して精度保証を行う場合、極めて有用である。特に重要な点は、区間演算の単位を内積計算や行列乗算レベルで考えることによってＢＬＡＳなどの既存の数値計算ライブラリがそのまま利用できるので、その高速性を失うことなく内積計算や行列乗算の包含を得ることができることである。

第３章では、係数行列が疎で単調な場合を扱っている。単調行列は、伝熱学や電磁気学などの物理問題を数値的に解くときなどによく現れる行列である。本章では、共役勾配法などの反復解法に基づき、係数行列が疎で単調である連立一次方程式に対し、その数値解の厳密な誤差限界を計算する方法が提案されている。主要な点は、直接解法ではなく反復解法を用いることによって係数行列の疎性を保ちつつ精度保証を行う高速な方式を開発していることである。数値実験では、楕円型偏微分方程式のひとつである拡散方程式を評価モデルとして、数値解の計算に比べてその精度保証が非常に高速に行えることが示されている。さらに、単調行列の条件数を高速に精度保証する方法も示されている。

第４章では、連立一次方程式の数値解のシャープな誤差限界を得る高速なアルゴリズムを提案している。この精度保証方式は丸めモード制御演算方式と高精度演算の組み合わせに基づいている。高精度演算は、数値解に対する残差の計算をするときにだけ用いている。一般的に、現在の計算機では４倍精度演算などの高精度演算は倍精度演算に比べて数十倍低速である。なぜなら、倍精度演算はハードウェア命令で直接実行されるのに対し、高精度演算はソフトウェアエミュレーションで実行されるからである。しかし、この章で提案されている精度保証方式は残差の計算にだけ高精度演算を用いるため、たとえ高精度演算が倍精度演算に比べて数十倍遅かったとしても、精度保証に必要な全体のコストはほとんど増加しない。また、この方式は残差反復と組み合わせることによって数値解の精度自体を改善することに活用できることも示されている。

第５章では、係数行列が疎な対称行列あるいは疎な対称正定値行列である場合

を扱っている。特に、対称正定値行列は自然科学の分野でよく現れる重要な行列である。疎な係数行列をもつ連立一次方程式を解くときは、係数行列の疎性を保持できる反復解法が直接解法に比べてメモリ的には圧倒的に有利であるが、係数行列の性質によって反復解法では収束が遅い、あるいは収束しない問題もある。そのような場合は、疎な行列に対する直接解法、いわゆるスパースダイレクトソルバーを用いる。この章で提案する精度保証方式は、対称行列に対してスパースダイレクトソルバーを用いるときに適用可能である。また、第４章で提案している残差反復を利用した精度保証方式に基づき、連立一次方程式の数値解をシャープかつ要素毎に精度保証する方法が提案されており、数値実験によって係数行列が疎な対称正定値行列のときに特に有効であることが示されている。

第６章では、本論文の結論として、まとめと今後の展望が述べられている。

以上が本論文の各章の概要であるが、これらの成果は科学技術計算において重要な役割を占める連立一次方程式に対し、その数値解の精度保証をする上で多くの新たな知見および有効な技法を与えており、情報科学における数値解析の分野の発展に貢献したものであると言える。よって、本論文を博士（情報科学）早稲田大学の学位論文として認める。

平成１４年１１月

審査員

主査	早稲田大学教授	工学博士（早稲田大学）	大石進一
	早稲田大学客員教授	理学博士（広島大学）	山本哲朗
	早稲田大学助教授	博士（工学）（早稲田大学）	柏木雅英