早稲田大学大学院 基幹理工学研究科

博 士 論 文 概 要

論 文 題 目

Studies on methods for verifying the accuracy of numerical solutions of symmetric saddle point linear systems
対称な鞍点行列を係数に持つ連立一次方程式の解に対する精度保証付き数値計算法に関する研究

申 請 者

Ryo	KOBAYASHI
小林	領

数学応用数理専攻　数値解析研究

+

２０１７年１１月

本論文では、**対称な鞍点行列を係数に持つ連立一次方程式の解に対する精度保証付き数値計算法**について考える．鞍点行列を係数に持つ連立一次方程式とは、次のような２×２のブロック行列を係数に持つ連立一次方程式である．

$$Hu = b, \quad H = \begin{pmatrix} A & B \\ B^T & -C \end{pmatrix}, \quad u = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} f \\ g \end{pmatrix}$$

ここで、行列A，Cはそれぞれ$n \times n$と$m \times m$の対称半正定値行列であり、行列Bは$n \times m$の行列($n \geq m$)で列 full rank(rank(B)=m)である．ベクトルx、fとy、gは、それぞれn次、m次のベクトルとする．さらに、係数行列Hは正則とする．また、本論文で精度保証付き数値計算法とは、数学的に厳密な解の存在と（局所）一意性を証明し、精度の保証された数値計算により、得られた近似解との誤差上限を求める方法をいう．

科学技術計算において、自然現象や社会現象を数理モデル化し、さらに離散化（線形化）を行うことで近似モデルを作成し、さらに近似モデルに関して計算機を用いてその解を計算することで現象のシミュレーションを行うことができる．この過程において、様々な誤差が解に混入する．数理モデル化においてはモデル誤差と呼ばれる誤差が混入し、離散化（線形化）においては離散化誤差や極限の計算を含む無限級数などの計算を有限桁で打ち切る時の打ち切り誤差などが発生する．また、近似モデルを解いて数値解を得る際にも、丸め誤差や情報落ち、桁落ちなどの誤差が発生する．精度保証付き数値計算は、離散化の際の誤差や数値解を得る際の丸め誤差などのすべての数値計算誤差を考慮する．本研究では、特に丸め誤差などを含む数値計算誤差について考える．簡単な二元連立一次方程式においても、数学的な厳密解と IEEE754 基準の倍精度浮動小数点でガウスの消去法を用いて計算機で計算した解に大きな誤差が生じる例があり、得られた解に対して誤差を考慮してその精度を保証することはとても重要である．

一方で、鞍点行列を係数に持つ連立一次方程式は、様々な科学計算や工学の分野から現れる方程式であり、Golub など多くの研究者によって研究されてきた．例えば、数理モデル化された偏微分方程式を弱形式化し、混合有限要素法を用いて離散化した時に得られる離散化方程式が本研究で扱う連立一次方程式の形をしている．このように各分野で数値解を得るための強力なアプローチが開発され、その中で対称な鞍点行列を係数に持つ連立一次方程式を解く必要があるため、本問題の重要性は増している．

本論文は５章から構成される．第１章では、前述した研究背景に加え、研究目的および概要を述べる．本研究では、鞍点行列の構造的特徴を生かした精度保証付き数値計算法を提案する．この構造的特徴とは、２×２のブロック行列で各ブロック成分が前述した性質を持つことであるが、具体的には、Schur 補元($S = B^T A^{-1} B + C$)と呼ばれる行列を用いた方法である．連立一次方程式$Hu = b$に対する一般的な直接法として係数行列の逆行列を用いる場合、$u = H^{-1} b$を計算するが、こ

のときHの行列サイズは$(n+m)\times(n+m)$であるので、H^{-1}を求める計算コストは$O((n+m)^3)$である．一方、Schur 補元を用いた方法では、$y=S^{-1}(B^TA^{-1}f-g)$、$x=A^{-1}(f-By)$で計算でき、A^{-1}とS^{-1}の計算コストを考慮すると$O(n^3)+O(m^3)$となる．従って、この方法は逆行列を使用する方法に比べ高速に計算ができることがわかる．そこで、Schur 補元に基づいた高速な精度保証付き数値計算法を提案する．

精度保証付き数値計算法において、一般的な連立一次方程式に対しては多くの場合、係数行列の近似逆行列$R\approx H^{-1}$を用いる方法が良く知られている．例えば、バナッハの縮小写像原理から導かれる近似逆行列を用いた定理や成分毎に評価を行う Yamamoto の定理などがある．しかし、2000 年代になり、この鞍点行列を係数に持つ連立一次方程式に対して、係数行列の近似逆行列を使用せず Schur 補元を用いる方法が研究されている．Chen と Hashimoto は、2003 年に行列Aが対称正定値行列、Cが対称半正定値行列である問題に対する精度保証付き数値計算法を開発した。この方法は、前述した Schur 補元を用いた直接法に基づいて行列のノルム評価を用いた方法であり、従来の方法である近似逆行列を使用する方法より高速に精度保証することができる．また、2009 年には Kimura と Chen により行列Aが対称半正定値行列且つ$C=O$(零行列)である問題に対する精度保証付き数値計算法が研究されている．この方法も Schur 補元を用いた方法であり、行列Aの正則性が必要となる．著者らは、対称半正定値行列Aを正則化する方法を示し、正則化されたAと Schur 補元Sを対角に持つブロック対角行列を前処理行列として使用し、前処理付き係数行列の固有値の存在範囲を示した．さらに、その前処理付き係数行列の絶対値最小固有値を用いて近似解と厳密解の誤差上限を求める方法を提案している．しかし、これまでの研究では、Aが対称半正定値行列、Cが対称正定値行列または対称半正定値行列であるような問題に対する精度保証付き数値計算法の研究がされていなかった．そこで、本研究ではこのような問題を扱い、Kimura と Chen の方法の適応範囲をCが零行列から対称半正定値行列となるように拡張した精度保証付き数値計算法を提案する．

第 2 章では、本論文で使用する記法と共に鞍点行列を係数に持つ連立一次方程式に対する先行研究である Chen と Hashimoto の方法と Kimura と Chen の方法を紹介する．

第 3 章では、対称な鞍点行列を係数に持つ連立一次方程式の解に対する Schur 補元に基づく厳密解と近似解との誤差上限についての定理を述べ、さらにその精度保証付き数値計算法を述べる．提案する定理は、大きく 3 つの工程からなる．1 つ目は、行列Aの正則化である．Schur 補元を用いるためには行列Aの正則性が求められる．しかし、Aが対称半正定値行列の場合、そのままでは Schur 補元を用いることができないため行列Aの正則化を行う．まず、行列Aが対称半正定値行列、行列Hが正則という条件の元で、$\tilde{A}=A+BWB^T$が対称正定値行列、$\tilde{B}=B-BWC$が full rank、$\tilde{C}=C-C^TWC$が対称半正定値行列という条件を満たす対称正定値行

列Wが存在するという命題を証明する．次に、この命題に基づいて、前処理行列を連立一次方程式の両辺にかけて、行列Aが正則である対称な鞍点行列を係数に持つ連立一次方程式が得られることを示す．このとき、Bが full rank 且つCが対称半正定値行列、Hが正則という条件は変わらない．

２つ目は、前工程で得られた行列Aが正則である連立一次方程式に対して、Schur補元に基づく前処理行列を用いて前処理付き係数行列の固有値の範囲を限定する．行列AとSとを成分に持つブロック対角行列Pを前処理行列に用いる．Axelsson と Neytcheva の研究により、前処理付き係数行列$P^{-1}H$の全ての固有値が閉区間$[-1,-\frac{1}{2}]$と閉区間$[1,2]$との共通集合に含まれることが証明されている．本論文では、この区間をさらに改善し、前処理付き係数行列$P^{-1}H$の全ての固有値が半開区間$(-1,\frac{1-\sqrt{5}}{2}]$と閉区間$[1,\frac{1+\sqrt{5}}{2}]$との共通集合に含まれるという補題を証明する．

３つ目は、前処理付き係数行列の絶対値最少固有値を用いて、厳密解と数値計算により得られた近似解との誤差上限を求める定理を提案する．前工程の補題より前処理付き係数行列の絶対値最少固有値は$2/(\sqrt{5}-1)$であることがわかる．厳密解と近似解との誤差の２ノルムは、前処理付き係数行列の絶対値最少固有値の逆数と前処理行列の逆行列P^{-1}の２ノルム、残差の２ノルムとの３つ値の積で上から抑えられることを定理として提案する．

ここで提案した定理は、Cが零行列の場合、Kimura と Chen の方法と一致する．また、本論文で提案した定理の中で計算する成分は、A^{-1}とS^{-1}と残差の２ノルムであり、これらは Chen と Hashimoto の方法でも計算する成分と一致する．従って、一度これらの値を計算することで２つの誤差上限を得ることができ、２つの誤差上限のうち良い評価の方を採用することで誤差上限を改善できる．

本章では、さらに Chen と Hashimoto の研究や Kimura と Chen の研究で提案されている前処理行列を用いた誤差上限を改善する技術を適応した定理も提案する．この技術を用いることで、混合有限要素法などから導かれた連立一次方程式に対して、$(B^TB)^{-1}$の２ノルム評価を小さくし、誤差上限が小さくすることができる．また、提案された誤差上限を精度保証付きで数値計算するために、行列や逆行列の２ノルムを精度保証付き数値計算する方法なども述べる．

第４章では、学術的な例と実用的な例を用いて提案方法の有効性を例証する．まず、Aが対称半正定値行列、$C\neq 0$である鞍点行列を係数に持つ連立一次方程式の例で数値実験を行い、**従来の近似逆行列を使用する方法を改良し Schur 補元を用いた提案方法で高速化される**ことを確認する． また、Aを正則化した後の問題を例として用いて、**提案方法は Chen と Hashimoto の方法と比べほぼ同じ計算時間でより小さい誤差上限が得られる**ことを確認する．

第５章では、本論文のまとめとして提案方法、数値実験をふまえて結論を述べる．

早稲田大学　博士（工学）　　学位申請　研究業績書

氏 名　　　　　　小林　領　印

（２０１７年　９月　現在）

種 類 別	題名、　発表・発行掲載誌名、　発表・発行年月、　連名者（申請者含む）
論文 (査読有)	[1] ○Ryo Kobayashi, Takuma Kimura, Shin'ichi Oishi, "A method for verifying the accuracy of numerical solutions of symmetric saddle point linear systems", Numerical Algorithms, Volume.76, Issue.1, pp.33--51, September 2017.
国際会議 講演	[2] Ryo Kobayashi, Kouta Sekine, Masahide Kashiwagi, Shin'ichi Oishi, "Verified numerical integration for function with power-type singularity using partial integration", INVA2017(The International Workshop on Numerical Verification and its Applications), HOTEL BREEZE BAY MARINA OKINAWA, Japan, (2017/3/18).
	[3] Ryo Kobayashi, Kouta Sekine, Masahide Kashiwagi, Shin'ichi Oishi, "Verified quadrature for integrand with power-type singularity using partial integral", ANZIAM2017, The Adelaide Hills Convention Centre, Australia, (2017/2/6).
	[4] Ryo Kobayashi, Takuma Kimura, Shin'ichi Oishi, "A method of verified computation for convex programming", SCAN2016(The 17th International Symposium on Scientific Computing, Computer Arithmetics and Verified Numerics.), UPPSALA UNIVERSITY, (2016/9/27)
	[5] Ryo Kobayashi, Takuma Kimura, Shin'ichi Oishi, "Validated Solutions for Symmetric Saddle Point Linear Systems", The 14th Asia Simulation Conference & The 33rd JSST Annual Conference, International Conference on Simulation Technology, Kitakyusyu, Japan, Oct.2014.
国内講演	
	[6] 小林　領, 関根　晃太, 柏木　雅英, 大石　進一, "部分積分と Euler-Maclaurin の公式を用いたベキ型特異点を持つ関数の精度保証付き数値積分", 日本応用数理学会 2016 年度年会, 北九州国際会議場 (2016/9/14).
	[7] Ryo Kobayashi, Takuma Kimura, Shin'ichi Oishi, "A Numerical Verification Method for Solutions of Symmetric Saddle point Linear Systems", Joint Seminar on Numerical Analysis at Niigata University, Niigata, Japan, Sep.2015.
	[8] 小林 領, 木村 拓馬, 大石 進一, "カントロビッチの定理を用いた凸二次計画問題の精度保証", 日本応用数理学会 2015 年度年会, 金沢大学 (2014/9/9).
	[9] 木村拓馬、小林 領、大石 進一, "SADDLE POINT MATRIX EQUATIONS の近似解に対する誤差評価について", 2014 年度応用数学合同研究集会、龍谷大学瀬田キャンパス (2014/12)

早稲田大学　博士（工学）　　学位申請　研究業績書

種 類 別	題名、　発表・発行掲載誌名、　発表・発行年月、　連名者（申請者含む）
	[10]　小林　領，木村　拓馬，大石　進一，″対称な鞍点行列を係数に持つ連立一次方程式に対するブロック対角行列を前処理に用いた精度保証付き数値計算法″，日本応用数理学会 2014 年度年会，政策研究大学院大学（2014/9/3）.