

氏名	小林 由佳
学位の種類	博士 (理学)
学位記番号	甲第理7号
学位授与年月日	2018 (平成30) 年3月14日
学位授与の要件	東京女子大学学位規程第3条第3項第1号
学位論文題目	Studies on Accurate and Efficient Solutions of Ill-Conditioned Linear Systems by Preconditioning Methods (前処理を利用した悪条件連立一次方程式の高速かつ高精度な数値計算法に関する研究)
論文審査委員	主査 教授 荻田 武史 副査 教授 大阿久 俊則 副査 教授 加藤 由花 副査 芝浦工業大学システム理工学部准教授 尾崎 克久

内容の要旨および審査の結果の要旨

I. 論文内容の要旨

本論文では、悪条件な連立一次方程式 $Ax = b$ (A は n 次の実行列、 b は n 次元実ベクトル) に対する高精度かつ効率的な数値解法アルゴリズムを開発している。ここで悪条件とは、浮動小数点演算の丸め誤差単位を u としたとき、係数行列 A の条件数 $\kappa(A) = \|A\| \|A^{-1}\|$ が $\kappa(A) > u^{-1}$ のような場合を意味する (IEEE 754 浮動小数点規格では、binary32 (単精度) では $u = 2^{-24} \approx 10^{-7}$ 、binary64 (倍精度) では、 $u = 2^{-53} \approx 10^{-16}$ である)。このような場合、通常の数値解法では高精度な近似解を得ることは一般に困難である。これを解決するため、本論文では、LU 分解に基づく 2 つの前処理方式を提案している。1 つは、LU 分解因子の逆行列を用いる方式であり、もう 1 つは、LU 分解の残差を用いる方式である。後者の方式のほうが、前者の方式よりも計算量 (浮動小数点演算の回数)

が少なく済む。

係数行列 A が $\kappa(A) \ll u^{-1}$ のように悪条件でない場合は、LU 分解と残差反復法を組み合わせた方式によって、 $Ax = b$ の近似解を高精度に得ることができることが知られている。しかしながら、 $\kappa(A) > u^{-1}$ のような悪条件の場合は、この方式では高精度な近似解を得ることができない。これに対して、本論文で提案されている前処理方式を用いると、通常の演算精度である `binary32` や `binary64` で取り扱うことのできる問題の難しさの限界を超えて高精度な近似解を得ることが可能となる。この前処理方式では、高精度な行列積の計算が必要となるが、`Dot2` と呼ばれる高精度内積計算アルゴリズムを利用して、数値実験結果から、 $\kappa(A) \lesssim u^{-2}$ であるような問題については、現実的な計算時間で提案アルゴリズムが適用可能であることが分かる。

また、実用性の観点から、提案する前処理方式を加速させることも目指している。そのために、前処理方式において、`Dot2` の代わりに、使用する計算機に最適化された `BLAS`（線形計算のための数値計算ライブラリ）を有効利用した高精度行列積計算アルゴリズムを適用している。数値実験によって、この高速化した前処理方式の有効性を検証している。

II. 審査の結果の要旨

1. 論文の構成

本論文は、6つの章で構成されている。

第1章では、論文の概要について述べている。

第2章では、本論文で用いる基本的なベクトルノルムや行列ノルムの定義がされており、さらに浮動小数点演算やLU分解について説明されている。

第3章では、悪条件な連立一次方程式に対する数値解法アルゴリズムのフレームワークが示されている。また、本論文で提案する2つの前処理方式及びそれらの計算量について議論している。

第4章では、数値実験によって前処理方式の有効性を検証している。

第5章では、`BLAS`に基づく高精度行列積計算アルゴリズムを紹介し、それを前処理方式に適用したときの数値実験結果を示している。

第6章では、本論文の結論と今後の課題について述べている。

2. 論文の特徴

本論文は、悪条件な連立一次方程式の数値解法を研究対象としており、既に査読付き専門論文誌に掲載された3本の論文の研究成果をもとに内容を再構成して、まとめたものである。計算機上で実行される数値計算は、有限桁計算で実行されるが、たとえ有理数であったとしても、有限桁の小数で表現できるとは限らないため、一般に入力や計算結果において丸め誤差が発生する。悪条件問題では、丸め誤差の影響を大きく受け、数値計算によって得られる計算結果の信頼性が大きく損なわれてしまう。本論文は、連立一次方程式において、そのような問題を解決するための方法を提案したものである。

提案されている数値解法アルゴリズムは、小規模な計算機から大規模なスーパーコンピュータにまで適用可能なスケーラビリティを持つ。また、提案アルゴリズムは通常の浮動小数点演算を有効に活用した方法であり、特別な計算機環境や演算精度を高める多倍長精度演算などの特別な演算を必要としていないため、高いポータビリティも兼ね備えている。

3. 論文の評価

連立一次方程式は科学技術計算の基礎であり、広範な分野に応用があるため、その数値計算結果の信頼性を高めることは、非常に重要である。特に、悪条件な連立一次方程式は、逆問題や最適化問題など多様な応用があるため、本論文で提案している数値解法アルゴリズムによって、そういった応用上重要な問題を高精度に解くことができるようになることは、大きなインパクトのある成果である。

本論文で提案されているアルゴリズムでは、前処理技法を巧みに利用し、連立一次方程式の係数行列の条件数を低減させることによって、高精度な近似解を得ることに成功している。前処理部分の行列積において高精度演算が必要となるが、これは通常の浮動小数点演算のみを利用した高精度内積計算アルゴリズムを利用することによって、計算時間の増大を抑制している。また、それによって多倍長精度演算等の特別な演算の利用を避けている。

演算精度を高める多倍長精度演算は、一般に現代の計算機で使用される通常の浮動小数点演算である `binary32` や `binary64` と比較して、計算速度が数百倍から数千倍遅くなる。これに対して、提案アルゴリズムでは、多倍長精度演算を必要としていないため、非常に高速である。具体的には、連立一次方程式の数値解法として標準的な LU 分解を

用いた方法と比較して、数十倍の計算時間で高精度な近似解を得ることができることが、数値実験によって検証されている。悪条件な問題では、標準的な LU 分解を用いた方法では高精度な近似解を得ることができない。それを多倍長精度演算のように大きな計算コストを掛けずに実用的な計算時間で解決することができるようになったことは、非常に画期的な成果である。さらに、最適化された線形計算ライブラリである BLAS を活用して提案アルゴリズムを高速化すると、標準的な LU 分解を用いた方法と比較して、数倍の計算時間で高精度な近似解を得ることができることも、数値実験によって検証されている。

以上のように、本論文で提案している連立一次方程式の数値解法アルゴリズムは、科学技術計算において多様な応用が期待でき、計算コストとしても実用的であることが実証されているため、応用数理学分野において高い価値を持つ良い成果である。

4. 最終試験の概要

最終試験として、公開の論文発表会を実施した。基本的事項から始めて、提案する数値解法アルゴリズムの詳細を示し、その数理的な側面を説明した。発表内容は論理的に整理され、十分な準備をされたものであった。また、発表では、適切なタイミングで既存アルゴリズムの問題点や提案アルゴリズムの有効性を示すための必要十分な数値実験結果を示し、聴衆の興味を惹き付けながら行われ、良い発表であったと言える。

外国語の試験においても、論文の内容が適切にまとめられ、丁寧に解説された。

以上のように、論文の内容、最終試験の結果ともに、本学博士（理学）に十分に値すると判断できる。