早稲田大学大学院 基幹理工学研究科

博士論文審査報告書

論　文　題　目

Convergence analysis of an algorithm for accurate inverse Cholesky factorization
高精度逆コレスキー分解アルゴリズムの収束解析に関する研究

申　請　者

Yuka	YANAGI SAWA
柳澤	優香

数学応用数理専攻　数値解析研究

2016 年 2 月

理工学の様々な分野において現れる，解析的に解くことが困難な数学的問題を数値的に解く計算や手法を数値計算と言い，計算機による浮動小数点演算を用いる．計算機は計算結果を有限桁の数に収めるため，丸め誤差が生じるため，安定的に高精度な数値解を得ることは数値計算を行う上で重要である．例えば，ルンプによって開発された，実対称行列の正定値性をコレスキー分解にて数値的に検証する方法（以降，ルンプの正定値性の保証法と呼ぶ）を考える．IEEE754 規格が定める倍精度浮動小数点演算で計算する場合，相対精度は 2^{-53}，およそ 10^{-16}（以降，u と呼ぶ）であるから，条件数が 10^{16} 以上の悪条件（数値的に解くことが難しい）問題の場合，通常の倍精度演算による方法では 1 桁も正しい情報を持っていないか，数値的に破綻してしまい計算ができない可能性がある．この場合，多倍長計算ですべての演算精度を増やして計算することも可能だが，実用的ではない．それは，一般的に問題の条件数は未知のため，試行錯誤で必要な計算精度を探すしかなく，多大な時間がかかってしまうからである．本論文では，悪条件な正定値対称行列の場合でも，安定的に高速かつ高精度に逆コレスキー分解が得られ，正定値性の保証が可能な数値解法について考えている．

1980 年代，ルンプは悪条件行列の近似逆行列は前処理行列として効果的であることを発見し，高精度な近似逆行列を求める方法を開発した（以降，ルンプの高精度な近似逆行列計算法と呼ぶ）．さらに 2005 年，荻田らにより，無誤差変換による加減乗算を用いた高速な任意精度の内積計算アルゴリズムが開発された．当アルゴリズムは，多倍長精度演算ライブラリなどを導入する必要がなく，倍精度浮動小数点数の和として値を表現することで，高精度に内積計算を実現する方法である．これを用いて，同年，ルンプの高精度な近似逆行列計算法を基にした連立一次方程式の解に対する精度保証付き数値計算法が太田らによって開発された．当アルゴリズムは多倍長で計算を行った場合の計算時間より数倍高速であることが示された．続いて，2007 年に大石ら，2009 年にルンプにより反復毎に前処理を施すことによって行列の条件数が低減し，行列が正則であれば必ず収束し高精度な近似逆行列が得られる仕組みが説明された．また，2010 年に悪条件な行列に対する行列分解を高速かつ高精度に行う仕組みを荻田が提案した．これは，ルンプの高精度な近似逆行列計算法とほぼ同様の仕組みで LU 分解，QR 分解に適用可能である．しかし，コレスキー分解の場合は同じように適用できない．それは，悪条件な問題に対してコレスキー分解を行うと，数値的に破綻し，計算が完了しない可能性が高いためである．これを克服した方法が，高精度逆コレスキー分解アルゴリズム（以降，荻田-大石の方法と呼ぶ）であり，2012 年に荻田と大石により発表されている．荻田-大石の方法は，コレスキー分解，三角行列の近似逆行列計算，および任意精度の行列乗算で構成されている．これらは LAPACK や BLAS に実装されている標準的なルーチンを用いて実現可能である．任意に高精度な行列乗算は，2012 年に尾崎らにより開発された，BLAS

を用いた高速なアルゴリズムを使用している．アルゴリズムの具体的な手順としては，A の対角成分を一定量シフトした行列に対してコレスキー分解（以降，シフト付きコレスキー分解と呼ぶ）したものを R_1 とし，その近似逆行列を X_1 とし，これを最初の前処理行列と考える．$X_1^TAX_1$ を適切な高精度で計算し，その結果を倍精度に丸めた行列に対して，同様の手順を繰り返す．$X_k^TAX_k$ が十分に単位行列に近づいたところで反復を止める．ここで得られた X_k は高精度な逆コレスキー分解である．荻田と大石は，数回の反復で高精度な逆コレスキー分解が得られることを，いくつかの数値実験を行い検証したが，正しく収束するために必要な精度や，収束条件は明確になっておらず，収束性が確保されていない状態であった．

本論文において，入力した実対称行列が正定値かつ任意に高精度な行列乗算が可能であれば，反復毎に条件数が低減し，必要な回数の反復を経て必ず収束することを説明している．ただし，当論文の収束解析は前述の大石やルンプの解析と同様，厳密な誤差限界を求めることは難しく，小さい係数や全体の精度に影響を及ぼさないような小さい誤差は省略して評価している．この評価方法を用いて，悪条件な行列に対して前処理が効果的に働く仕組みを説明している．解析において最も重要な点は，行列乗算の精度である．解析の中で，前処理行列の条件数が期待通りに低減するために必要な精度を導出し，その精度は必要最小限に近いことを示している．さらに数値実験によりその有効性を検証している．ただし，荻田-大石の方法で得られる前処理行列 $X_k^TAX_k$ は，シフト付きコレスキー分解に起因した誤差（およそ n^2u）が含まれてしまうという課題がある．

そこで，本論文ではさらに精度の良い逆コレスキー分解を行うことを目的に，荻田-大石の方法における反復停止条件を改良した新しい方法を提案している．前述の通り，悪条件行列に対するコレスキー分解は数値的に破綻してしまうためシフト付きコレスキー分解は必須だが，前処理行列の条件数が十分に低減した状態であれば，対角成分をシフトすることなくコレスキー分解が成功すると期待できる．そこで，コレスキー分解が必ず成功する条件を導出し，その条件をアルゴリズムの反復停止条件として組み込んでいる．改良後の方法では，精度は u（およそ 10^{-16}）を達成し，荻田-大石の方法より高精度な結果を高速に算出している．以上の 2 点が本論文の目的である．

以下，各章の構成に基づき本論文の概要を述べている．本論文は，全五章で構成されている．第一章では，本研究における背景，目的を述べている．第二章では，本論文で用いる表記法，定義，および，高精度内積演算の誤差評価式を紹介した後，荻田-大石の方法を紹介している．さらに当章では，ルンプによるコレスキー分解の厳密な後退誤差評価式を用いてシフト量を最適に近い値に改良している．第三章では，荻田-大石の方法を解析している．アルゴリズムの各ステップで発生するおよその誤差を評価し，反復毎に前処理行列の条件数が期待通りに低減し，最終的に 1 に収束することを説明してい

る．この解析の中で，収束するのに必要最小限に近い精度を導出している．具体的な解析の方法は帰納法に基づいている．まず 1 回目の反復で得られる前処理行列 X_1 を用いて前処理行列 $X_1{}^TAX_1$ の条件数が A より低減していることを説明している．続いて，k 回目の反復で得られる X_k の状態を仮定し，k+1 回目の反復で前処理行列 $X_{k+1}{}^TAX_{k+1}$ の条件数が k 回目で得られる前処理行列 $X_k{}^TAX_k$ よりも十分に低減していることを示している．続いて，いくつかのテスト行列に対して数値実験を行っている．数値実験結果は，解析で導出した精度で条件数が低減し，一定の反復回数を経て収束している．つまり，解析で導出した結果と数値実験結果は矛盾がないことを示している．このように本章では，入力した実対称行列が正定値であり，任意に高精度な行列乗算結果が得られることが可能であれば，荻田-大石の方法は必ず収束することを解析と実験により示している．また，実対称行列の正定値性の保証を目的に，前述のルンプの正定値性の保証法を多倍長で計算した場合と，荻田-大石の方法が収束するまでの計算時間を比較したところ，問題の条件数が 10^{40} 程度であれば多倍長計算の約半分の時間で完了することを確認している．第四章では，荻田-大石の方法を改良した新しい方法を提案している．具体的には，コレスキー分解がシフトなしで必ず成功するための条件を導出し，アルゴリズムに組み込んでいる．条件を導出する上でのポイントはコレスキー分解の後退誤差と行列乗算の前進誤差である．これらの誤差の上限よりも最小固有値の下限が大きい時に，コレスキー分解はシフトなしで成功し，得られる結果の精度が向上すると期待できる．実際に得た前処理行列 $X_k{}^TAX_k$ と単位行列の誤差はおよそ u（およそ 10^{-16}）を達成しており，荻田-大石の方法の約 3 分の 2 の計算時間で完了している．このように改良後のアルゴリズムは，非常に高精度で高速な結果が得られるアルゴリズムであることを示している．第五章では，結論を述べている．

以上が本論文の各章の概要である．申請者は，従来計算を行えなかった悪条件な問題に対して高精度な逆コレスキー分解が得られる荻田-大石の方法を詳細に解析し，アルゴリズムが収束するのに必要な最小限に近い精度を導出することに成功している．また，荻田-大石の方法を改良し，さらに高精度な逆コレスキー分解を高速に得られるアルゴリズムを提案している．これらの成果は，数値計算分野の発展に大きく貢献するものである．従って，本論文は博士（工学）の学位論文として価値あるものと認める．

2016 年 1 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

早稲田大学教授　工学博士（東京大学）　高橋　大輔

早稲田大学教授　博士（工学）（早稲田大学）　柏木　雅英