

高速微分法および丸め誤差推定法とその応用

土谷 隆 東京大学工学部計数工学科

(指導教官 伊理正夫教授)

1. はじめに

種々の非線形問題の解法において、複雑な関数の偏導関数値を求めることは不可欠であるにもかかわらず、効率的な算法は従来知られていなかった。ところが現在、そのための実用性の高い算法が生まれ、各種の応用が開拓されつつある。それは、「高速微分法」とも呼ばれる算法で、関数の計算過程を計算グラフとして表現して偏導関数計算をその上での一種の最短路問題として捉え、最短路問題を解くための算法を利用することにより、偏導関数値を効率よく求めるものである(図1)。この算法によれば、 n 変数のスカラー関数 f の計算に要する手間(=四則演算や初等関数等の基本演算の回数)を $L(f)$ とすると、関数の勾配や Hesse 行列とベクトルの積を $L(f)$ の高々数倍の手間で、Hesse 行列の全要素を $n \cdot L(f)$ の高々数倍の手間で求められる。また、 n 変数 m 関数値のベクトル関数 f を計算するのに要する手間を $L(f)$ とすると、 f の Jacobi 行列やその転置とベクトルの積を $L(f)$ の高々数倍の手間で、そして Jacobi 行列の全要素を $\min(m, n) \cdot L(f)$ の高々数倍の手間で求められる。また、関数やその勾配に含まれる丸め誤差の精密な推定値も効率よく求めることができる。

これらの算法が実用化されるに伴って得られるようになるさまざまな情報を利用することを前提として、既存の算法の見直しや改良、新たな算法の考案を行なう必要性が生ずる。その試みとして本論文では以下の3つの問題を取りあげ研究を行なった。

2. 高速微分法の非線形方程式系の解法への応用

ここでは、化学プラントシミュレータDPSによって水-エタノール蒸溜塔の平衡状態を表現した108元非線形連立方程式系(方程式系の計算に要する基本演算の回数は3152;以下「問題A」と呼ぶ)に対して高速微分法を適用し、得られる情報をその解法に生かすことを試み

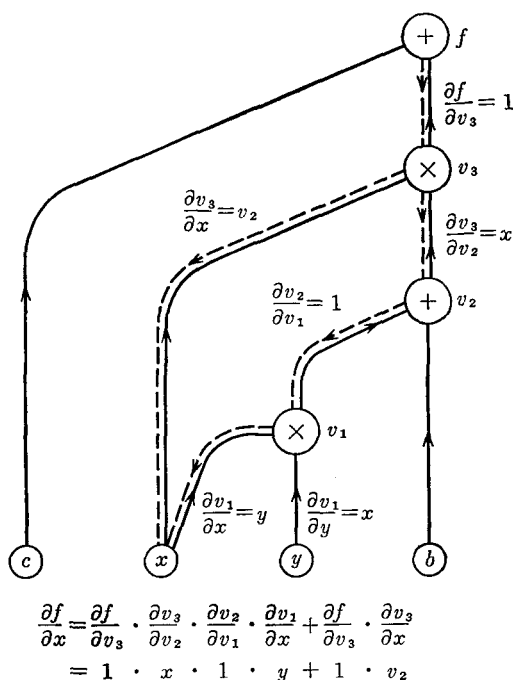


図1 関数“ $f(x, y) = (xy + b)x + c$ ”の計算グラフと高速微分法の原理

た。

(1)高速性の検証:—方程式の Jacobi 行列を計算するのに要する時間を数値微分法と高速微分法とで比較した。その結果、高速微分法は数値微分法に比較して7倍程度速いことが観察された。そして、それは、Jacobi 行列を求めるさいに計算グラフをたどる回数は両方法でほぼ同じ(=108)回であるが、数値微分では1回ごとに計算グラフ全体をたどる(=関数値を1回計算する)必要があるのに対し、高速微分法では1回計算グラフをたどるさいに(=各関数値の勾配を求めるのに)、必要な部分のみ(この例の場合、平均して1つの関数値につき計算グラフ全体の1/15程度)をたどればよいからであることがわかった。

(2)丸め誤差評価の正確さの検証:—高速微分法に

よって得られる丸め誤差評価式の正確さを調べるため、方程式を構成する 108 個の関数値について、ある入力変数値における各関数値の丸め誤差の「絶対評価＝丸め誤差の上界の評価」や「確率評価＝丸め誤差の標準偏差の評価」と「最大丸め誤差（＝その点の近傍 100 点で観測した丸め誤差のうち絶対値最大のもの）」を比較した。その結果、高速微分法による丸め誤差の絶対評価は高々数倍の過大評価にすぎないことが判明した。確率評価についても 1 ～ 2 倍程度の過大評価ですむことがわかった。

(3) 正規化ノルムの導入：——数値計算において、方程式 $f_i(x)=0 (i=1, \dots, n)$ を解くということは、 Δf_i を f_i の丸め誤差として、

$$f_i(x) \approx \Delta f_i(x) \quad (i=1, \dots, n) \quad (2.1)$$

を満たす x を求めることであると考えられる。高速微分法を使うならば、(2)においてその精度が確認された丸め誤差評価 Δf で関数値 f を正規化したノルム、 $\|f\|_{\Delta f} = \max_i |f_i| / \Delta f_i$ などを導入してこれが 1 程度になることをもって停止条件とすれば、(2.1)を満たすような解 x を求めることが保証される。問題 A に対してこのような正規化ノルムを導入し、減速 Newton 法を適用してみたところ、正規化ノルム $\|f\|_{\Delta f}$ が 1 程度まで減少しており、近似解が (2.1) を満たすものであることが確認された。このような停止条件は、人間による恣意的な定数の導入などを行なう必要がなく、自動化に適しているという点で優れている。また、このようなノルムが減速のステップサイズの制御に役立つことも明らかになった。

(4) 高速微分法を利用した共役勾配法による Jacobi 行列を係数に持つ線形方程式の解法：——Newton 法の近似解の修正量 Δx を求めるための線形方程式 $J\Delta x = -f$ (J : Jacobi 行列) を共役勾配法によって解くと、手間の大部分は Jacobi 行列やその転置とベクトルの積の計算に費やされる。そこで、これらの積の部分を Jacobi 行列やその転置とベクトルの積を求める高速微分法によって直接計算することになると、修正量 Δx が $2n \cdot L(f)$ の高々定数倍の手間で求められる。しかも Jacobi 行列自身を保持する必要はない。この方法は、Jacobi 行列が密で、しかも計算グラフの枝の数が少ない時に有利である。問題 A およびこの方法が適していると思われる方程式 $f_i(x_1, \dots, x_{100}) - s_i = 0 (i=1, \dots, 100; f_i = v/x_i, v = \prod_{i=1}^{100} x_i; \text{以下「問題 B」と呼ぶ})$ について、この方法により Δx を求めるのに要する計算時間と、通常行なわれ

る (高速微分法による Jacobi 行列計算) + (LU 分解) による計算時間を比較した。その結果は、本節の方法の通常の方法に対する計算時間の比が問題 A では 5 程度、問題 B では 0.7 程度で、問題によっては本節の方法が有利になり得ることが確認された。

その他、丸め誤差評価を考慮にいたし、Scaling 不変な (Newton 法の) 減速ルールや、丸め誤差評価を利用した残差空間、変数空間への計量の導入、近似解自身の精度推定等についても考察、実験を行なった。

3. 大規模計算過程における丸め誤差の振舞い

高速微分法の 1 つの特色は丸め誤差の発生・伝播を表現する式にもとづいて、関数の丸め誤差の精密な評価ができることである。本論文では、各基本演算で発生する丸め誤差が互いに独立な一様分布にしたがう確率変数であるとした丸め誤差の確率モデルが、大規模な計算過程における丸め誤差の性質をどの程度説明しうるかを、先にとりあげた 108 元非線形方程式系について調べた。そして、108 個の関数の丸め誤差の統計的諸量について、現実の丸め誤差から求めた標本値と、確率モデルより導かれる理論値を比較した結果、丸め誤差の挙動は確率モデルによってよく説明されることがわかった。さらに、確率変数としての各関数の丸め誤差は、分布幅が等比級数的に減少する多数の独立な一様分布にしたがう推定変数の和と見なすことができ、その公比は $R = (\text{確率評価}) / (\text{絶対評価})$ を使って、 $(1 - 3R^2) / (1 + 3R^2)$ と表現できることも明らかになった。

4. 非線形最適化問題に対する応用

高速微分法によると、スカラー関数 f の Hesse 行列とベクトルの積や Hesse 行列自身が各々 $L(f)$, $n \cdot L(f)$ の高々数倍の手間で求められ、勾配の各成分の丸め誤差も $n \cdot L(f)$ の高々数倍の手間で求められる。これらの特色は最適化算法については、(1) 手間の観点から不経済であるとされてきた、正確な Hesse 行列情報を利用した Newton 法や Hestenes-Stiefel-Daniel の共役勾配法が利用できる、(2) Hesse 行列自身を保持せずに Newton 法や共役勾配法などが行なえる、(3) 目的関数値や勾配の各成分の丸め誤差の評価を利用して、合理的な停止条件を設けることができる、(4) 高速微分法によって得られる情報を生かした新たな算法が設計可能になる、といった新しい視点を提供する。

これらの観点からの従来の算法の見直しとして、種々の共役勾配法の中でも一番原理的であるにもかかわらず Hesse 行列とベクトルの積を用いるがために、これまでは実用的ではないとされてきた Hestenes-Stiefel-Daniel の共役勾配法をとりあげ、従来の共役勾配法に比して性能が優れていること、準 Newton 法に比しても性能は悪くなく、準 Newton 法が使えないような大規模な問題については実用的算法たりうることを確認した。

5. おわりに

高速微分法の非線形方程式系や非線形最適化問題への応用をとりあつかってきたが、まだその可能性は緒にいたばかりである。本格的な応用を可能にする FORTRAN プリプロセッサが現在製作されつつあり、それが完成してさまざまな問題を解くのにこの技術が適用されれば、またそこから、さらに新しい算法への可能性が開けてくるのではないかと思われる。

参考文献

- [1] M. Iri: Simultaneous Computation of Functions, Partial Derivatives and Estimates of Rounding Errors...Complexity and Practicality. *Japan Journal of Applied Mathematics*, Vol. 1, No. 2, pp. 223-252(1984)
- [2] K. V. Kim, Ju. E. Nesterov, V. A. Skokov, and B. V. Čerkasskiĭ: Èffektivnyiĭ Algoritm Vyčislenija Proizvodnyh i Èkstremaĭnye Zadachi(in Russian). *Èkonomika i Matematičeskie Metody*, Tom 20, Vyp. 2, pp. 309-318(1984)
- [3] 伊理正夫, 星守, 土谷隆: 偏導関数計算と丸め誤差推定の自動化の大規模非線形方程式系への応用. 情報処理, Vol. 26, No. 11, pp. 1411-1420(1985)
- [4] 土谷隆, 伊理正夫: 共役勾配法における高速微分法の役割. 第2回大型行列計算シンポジウム「共役勾配法とスーパーコンピュータ」(1986年3月14日, 慶応大学日吉校舎) 予稿集, pp. 97-107(1986)

最新刊

パソコン・パッケージによる 例解 線形計画法

平本 巖・木下昌男・栗原和夫共著 A5・1800円

ソフト別売 定価80,000円

入門者向けに、線形計画法におけるパソコン応用を解説。プログラム・パッケージを用いて、線形計画問題を解きすすむうちに理解を深めることができる。併せてプログラム・パッケージも販売。(ソフトウェア御希望の方は小社営業部まで。)

主要目次 線形計画法入門(単体法 感度分析 2段階単体法他) 例題編(生産計画問題 栄養問題 混合問題 多期間計画問題他) パーソナルコンピュータの活用(手法理解のためのLPパッケージ 実務に利用するためのLPパッケージ 教育の場を利用するためのLPパッケージ他)

Computer Today 定価880円

62年1月号予告

情報化社会の暗号システム ——コンピュータと公開鍵暗号——

データ保護の1つの方法としての「暗号」を取り上げ、暗号システムをとりまく最新の動向を詳説する。

数 理 科 学

1月号予告

定価 880 円

特集=不可能

神の存在証明と選択公理
不可能性の証明
巡回セールスマンの問題
働きものの海狸の話
寿命—その限界と意味
宇宙の外の宇宙を考える
発熱のない計算
地球外文明との交信
重力の遮蔽
手足の再生
巨大システム
人工知能の限界

藁谷敏晴
一松 信
国沢清典
中村 昭
山本俊一
佐藤勝彦
吉田宣章・後藤英一
桜井邦朋
小玉英雄
土居洋文
米沢明憲
高沢嘉光

数理科学・別冊

好評発売中

ゲーデルとチューリング 形・フラクタル

定価2,000円

定価2,000円

サイエンス社

東京都千代田区神田須田町2-4 安部徳ビル

☎03(256)1091 振替 東京7-2387