

解説

1. 精度保証付き数値計算の現状と動向[†]



中尾 充 宏^{††}

1. はじめに

情報処理技術の急速な発展にともない、その内容は著しく高度化、多様化し、四則演算のみを基本とする科学技術計算 (Scientific Computation) の方式に関する議論は、すでにいわゆる情報科学の主役とは言えなくなってきているかもしれない。しかしながら、高速演算機構と大容量メモリとを本質的に必要とし、スーパー・コンピュータの能力を最も駆使している主体は依然として科学技術計算であることもまた事実であろう。しかるに、このように“計算機利用の主役”でありながら、科学技術計算の場合、計算結果の信頼性 (=品質保証) という点については他の情報処理、たとえば各種の情報検索や金融システムのデータ管理といった場合のそれに比べてずいぶん緩やか、ないしはルーズに扱われてきた感がある。その理由の一つは計算の対象がもともと連続量 (=無限) の近似であり、その意味であまり厳密さが要求されなかったこと、いま一つは計算機内の演算が有限桁で行われるため常に「丸めの誤差」が介在し、それを効率良く把握する方法がなかったからであろう。

ところが最近になって、従来困難だと思われていた浮動小数点演算における丸め誤差を含む演算結果の保証が、理論的にも実用的にも高い精度で効率良く可能なことが明らかにされ始め、これにともなって精度保証という新たな観点から数値計算全般を見直すことが、世界的な話題として急速にクローズアップされるようになった。これは単なる丸め誤差の厳密評価という問題にとどまらず、科学計算のもとになった技術的問題の数値解法アルゴリズムそのものにも影響を与え、さらにさまざまな数理学上に現れる問題の解それ自体を数学的な厳密さで検証するという方向にまで展開しつつある。すなわち、たとえば非線型連立方程式

や微分方程式の解を、その存在、一意性そして存在領域の保証付きで求める数値計算アルゴリズムも開発されている。このような数値計算法は欧米で自己検証の算法 (Self-validating numerics) あるいは精度保証付き数値計算法 (numerical methods with guaranteed accuracy) と呼ばれており、今後の科学技術計算法のあるべき一つの方向と考えられる。本稿では、この意味での新しい数値計算法として現在提案されあるいは実用化されている技法の原理とその特徴について概観し、この分野における内外の研究状況とその動向とを考察する。

2. 科学技術計算における品質保証

ここでは、数値計算の信頼性を誤差の混入という観点から見直し、品質保証の必要性とその問題点について考える。科学計算における誤差は図-1のように階層化してとらえることができよう：

なおここで、数値計算誤差には丸め誤差以外に数値解法自体に起因する誤差 (たとえば連立方程式を反復法で解く場合など) も含まれているが、これを分離するという考え方もあろう。また、問題そのものが始めから離散化された形で与えられることもあり得るので、

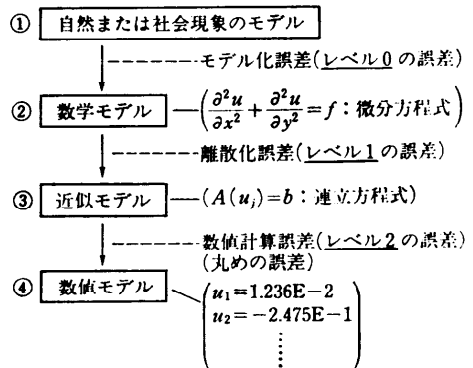


図-1 数値計算モデルと誤差の階層構成

[†] State of the Art for Numerical Computations with Guaranteed Accuracy, by Mitsuhiro NAKAO (Department of Mathematics, Faculty of Science, Kyushu University).

^{††} 九州大学理学部数学科

その場合にはレベル1の誤差を欠くことになる。本稿でとり上げる精度保証付き数値計算の範囲はレベル1と2の両方を含むがレベル0は対象外である。

いま、たとえば現象の数学モデルが図-1のような微分方程式(ポアソン方程式)で記述されている場合、これを差分法または有限要素法などの近似解法により離散化(有限次元化)すれば、近似モデルとして連立1次方程式が得られ、それをなんらかの方法(たとえばガウスの消去法など)を用いて計算機により解いた結果が数値モデルである(図-1)。ここで、離散化誤差については大ざっぱに言って、通常 $10^{-1} \sim 10^{-3}$ 程度になることが多く、その事実は科学技術計算に携わる人々にとってもよく認識されているところであり、計算結果と実験データとの相違などの原因として考慮され、その改良に努力が払われてきた。なおここを正確に把握することは一般に数学的にも多くの議論を要する問題である。

本稿ではこの離散化誤差に関する精度保証についても4.で言及する。一方数値計算誤差については、たとえば15桁前後の仮数部をもつ倍精度演算を行った場合、通常当面する問題では 10^{-10} 程度以下のことが多く、よほど多くの有効桁を要する特殊なケースを除き、大抵は無視されているのが現状である。しかしながら良く知られているように、簡単な連立1次方程式においても丸め誤差にともなう桁落ちのため、計算結果に思いもよらない大きな誤差の混入が起こり得ることも事実である。いま、このような数値例をいくつかあげてみよう²²⁾。以下の例で計算に使用された浮動小数点システムは16進14桁の仮数部をもつ倍精度演算である。

①ベクトルの内積： $s = a \cdot b$

ここに、

$$a = \begin{bmatrix} 2.718281828 \\ -3.141592654 \\ 1.414213562 \\ 0.5772156649 \\ 0.3010299957 \end{bmatrix} \quad b = \begin{bmatrix} 1486.2497 \\ 878366.9879 \\ -22.37492 \\ 4773714.647 \\ 0.000185049 \end{bmatrix}$$

厳密な値は $s = -1.00657107 \times 10^{-11}$ であるのに対し、実際の計算結果 \tilde{s} は、 $\tilde{s} = +0.335 \dots \times 10^{-9}$ となる。

②算術式の評価:

$x = 192119201$, $y = 35675640$ に対し、

$$\text{式: } z = (1682xy^4 + 3x^3 + 29xy^2 - 2x^5 + 832)/107751$$

を評価すると真の値 $z = 1783$ に対し、計算結果は $\tilde{z} =$

$-5.385 \dots \times 10^{22}$ となる。

③連立1次方程式： $Ax = b$

ここで、

$$A = \begin{pmatrix} 64919121 & -159018721 \\ 41869520.5 & -102558961 \end{pmatrix} \quad b = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

真の解は

$$x = \begin{pmatrix} 205117922 \\ 83739041 \end{pmatrix}$$

計算結果は

$$\tilde{x} = \begin{pmatrix} 0.987 \dots \times 10^{-1} \\ 0.403 \dots \times 10^{-1} \end{pmatrix}$$

以上は極端な例かもしれないが、現在科学技術計算はますます大規模化、多様化しており、将来もその一途をたどるとすれば、上記のような一見して単純に思える計算においてさえその信頼性を損うという事実を目のあたりに見るとき、浮動小数点演算の品質保証は決して放置できない重大な問題であることが理解できよう。

3. 新しい科学技術計算法

前章で述べたような浮動小数点演算の信頼性低下を避けるため、以前から種々の工夫が試みられてきた¹¹⁾。特に Wilkinson⁵⁵⁾による前進/後退誤差解析にもとづく手法は有名であるが、大規模計算となると誤差伝播に要する複雑な解析の手順をとらなうため、理論的重要性の割には広く実用に供せられることはなかった。一方、完全なエラーフリー計算法を目ざす有理数演算にもとづく手法もしばしば提案されてきたが^{61), 42)}、これも計算時間と必要メモリ量の上からも問題点が多く、現在のところいまだ実用の段階ではないようである。

さて、Mooreにより、その萌芽をみた区間演算(interval arithmetic)の手法³⁹⁾は、数値データをある幅をもった実数の集合として扱い、その間の四則演算を一種の集合算として定義することにより、丸め誤差の厳密な把握をねらうものであった。当初この方法は実用上での否定的見解をとる人々が多かったが、最近これにもとづく有力な精度保証の方式が考案され、また丸め誤差解析だけでなく広い応用分野の存在が明らかになるにつれて再び脚光を浴びるに至っている。以下その概略を説明しておこう。

実数の区間 $[a, b]$ とは次のような閉じた有界な実数の集合を意味する:

$$[a, b] = \{x \mid a \leq x \leq b\}$$

ここで a, b はそれぞれ区間 $[a, b]$ の下限, 上限と呼ばれる. 二つの区間 $X=[a, b], Y=[c, d]$ に対し $*$ を $+, -, \cdot, /$ のいずれかとするとき, 2項演算 “ $*$ ” を次のように定義する.

$$X * Y := \{x * y \mid x \in X, y \in Y\} \quad (1)$$

もちろん $*$ = $/$ の場合には $0 \notin Y$ を前提とする. このとき (1) で定義される実数の集合は再び区間となり, したがって区間全体は演算 $*$ に場して閉じた体系となる. 実際には (1) の定義は次の形に表現できることが分かる.

$$X + Y = [a + c, b + d]$$

$$X - Y = [a - d, b - c]$$

$$X \cdot Y = [x, y]$$

ここに, $x = \min \{ac, ad, bc, bd\}, y = \max \{ac, ad, bc, bd\}$

$$X/Y = [a, b] \cdot [1/d, 1/c]$$

いま計算機で表現可能な浮動小数点数全体を S とし,

$$I(s) := \{[a, b] \mid a, b \in S \text{ かつ } a \leq b\}$$

とおくと, $X, Y \in I(s)$ に対して一般に $X * Y \in I(s)$ とは限らないが, $X * Y \subset Z$ となる $Z \in I(s)$ がある場合には $X * Y$ の $I(s)$ への丸め $R(X * Y) \in I(s)$ を定めることができる. この意味での区間演算を丸め区間演算または機械区間演算と呼ぶが, この考えを用いると浮動小数点数の四則演算結果の丸め誤差は基本的に厳密に把握できる. たとえば

$$2 \div 3 \times \sqrt{2} \in [0.666, 0.667] \cdot [1.414, 1.415] \\ \subset [0.941, 0.944]$$

といった具合である.

しかしながら, このような誤差評価はいわゆる “最悪のケース” を考えたものであり, 保証区間の幅は演算回数を重ねるごとに累積する一方で, 最終結果としては特殊な例を除いてほとんど有意な情報をもたらさないであろう. 事実この意味での素朴な区間演算は丸め誤差の解析には十分な実用性を発揮することができず, したがってその概念自体も永い間, 我が国においてもまた世界的にもあまり積極的な評価を受けることがなかったのである. しかし西ドイツを中心とする一部の人々の間ではその思想が受け継がれ, 徐々にではあるが新しい応用分野の開拓がなされてきたのであった^{1), 31), 46)}. そして科学技術計算の精度保証に関し, 理論と実際の両面において最もセンセーショナルで決定的な影響を及ぼしたのは, 西ドイツ・カールスルーエ大学の Kulisch を中心とする一連の研究であろう²⁰⁾⁻²²⁾. これは計算機内での丸めをとまなう浮動小

数点演算を半同型 (semi-morphism) という概念を用いて公理的に厳密に体系づけるという理論的背景の下に, 区間演算をとり入れることによって, 算術式評価やマトリクス計算などの基本的科学技術計算において高い精度保証を実用レベルで実現しようとする試みである. この研究は 1970 年代の末に始まり, その一部は大手計算機メーカーとの共同研究の形をとり, また他の一部は EC (ヨーロッパ共同体) により 1983 年に始まった情報工学研究開発プログラム ESPRIT の一環として進められた*. 以下では, その中で展開されている基本的な技法の概略をみてみよう.

実際の精度保証を実現する上で用いられている原理的手法は次の三つに要約される.

- ①ベクトル内積の最大精度による計算
- ②区間演算と不動点定理の適用による計算結果の数学的に完全な保証
- ③反復残差改良法 (iterative residual correction) による計算結果の高精度化

ここで最大精度とは, 当該計算機における浮動小数点数表示の最小単位 (マシン・イブシロン) 以下の誤差しか含まないことを意味する (least significant bit accuracy: 略して lsba ともいう).

では次に, これらを計算機上でどのようにして実現し, そのことによって, どうして丸め誤差も含めた計算結果を高い精度で保証できるのかを考えてみよう.

いま浮動小数点数の内部表現を図-2 のように仮定しよう. ただし, 指数部が非負となるような表示法をとるものとする. このとき二つの浮動小数点数 a と b の積 $a \cdot b$ を情報の欠落なしに表現するには $2 \times 2^m + 2$ の長さのアキュムレータを用意する必要がある. 次に二つのベクトル $a = (a_i), b = (b_i)$ の内積 $a \cdot b =$

$\sum_{i=1}^n a_i \cdot b_i$ を計算する場合, オーバフローを考慮してさらにアキュムレータを左側に t 桁拡張しておけば (図-3), 十分大きな n に対しても, t の値によって, その値を完全精度で (=情報落ちなく) 計算できる.

1 ビット	e (ビット)	m 桁 (β 進)
符 号 部	指数部	仮数部

図-2 浮動小数点数の内部表現

* ESPRIT は European Strategic Programme for Research and development in Information Technology の略で, 特に精度保証付き数値計算法の開発プロジェクトには DIAMOND (Development and Integration of Accurate Mathematical Operations in Numerical Data-processing) という名称がつけられている.

桁	$2 \times 2^e + 2m$ 桁
符号部	(桁はいずれも β 進)

たとえば $t=10, m=8, e=7, \beta=16$ のとき アキュムレータ長 = $10 + 2 \times 2^7 + 2 \times 8 = 282$ 桁 (16進)

図-3 内積計算用アキュムレータの構成

たとえば、浮動小数点数が β 進表示である場合、 $t=10$ とすれば $n \leq \beta^{10}$ なる n に対して n 次元ベクトルの内積が正確に求められる。したがって、このような内積計算用アキュムレータを用意しておけば内積 $a \cdot b$ は最大精度で得ることができる。

次に、この最大精度内積を利用して連立1次方程式 $Ax = b$ (A は n 次正方行列、 b は既知ベクトル)

(2)

の解の精度保証を行うことを考えてみる⁴⁹⁾。まず(2)の近似解 \tilde{x} と係数行列 A の近似逆行列とを通常の、すなわち精度の保証をしない方法で求めておく。このとき(2)は次の不動点形式に書き換えられる：

$$R(b - A\tilde{x}) + (I - RA)x^* = x^* \quad (3)$$

ここに I は単位行列、 R は A の近似逆行列を表し、(3)の解 x^* に対し $x = \tilde{x} + x^*$ が(1)の解となる。いま(3)の左辺を $f(x^*)$ と書くことにし、 n 次元区間ベクトル $X = (X_i)$ (各 X_i は実数区間) に対し、

$$g(X) := R(b - A\tilde{x}) + (I - RA) \cdot X \quad (4)$$

として区間ベクトル $g(X)$ を定める。このとき

$$g(X) \subset X \quad (\text{各成分区間ごとの包含関係}) \quad (5)$$

が成り立てば、ブラウエル (Brouwer) の不動点定理 (たとえば文献 25)) によって、 $g(x^*) = x^*$ となる $x^* \in X$ の存在が立証される。換言すれば(2)の解 x が区間ベクトル $\tilde{x} + X$ の中に包含されたことになる。ここで(4)は区間演算と最大精度の内積計算とを用いて数学的に厳密な評価が可能である。さて、(5)が成り立つような区間ベクトル $X = (X_i)$ 、 $X_i = [\underline{X}_i, \bar{X}_i]$ ($1 \leq i \leq n$) の幅: $w(X) := \max_{1 \leq i \leq n} \{(\bar{X}_i - \underline{X}_i)\}$ は必ずしも狭い (すなわち精度が良い) とは限らない。ところが、 $X^{(0)} = X$ として次の反復

$$X^{(k+1)} = g(X^{(k)}) \cap X^{(k)} \quad (k=0, 1, \dots) \quad (6)$$

に対して、必ず $x^* \in X^{(k)}$ となるが、さらにこのとき、一般に $I = RA$ は 0 (零行列) に近く、このことから $w(X^{(k)}) \rightarrow 0$ ($k \rightarrow \infty$ のとき) となることがいえる。したがって解を含む区間の幅は反復(6)の実行によっていくらかでも小さくできる。実際には(6)の計算においても数値の丸めをとまなうため、マシン・イブ

シロン以下の幅にはなりえないが、理論的にはそれと同じ程度まで反復改良が可能になる。実際多くの実例について lsba もしくはそれに近い高精度保証区間を達成できることが分かっている^{48), 49)}。

こうして、①~③の原理にもとづき連立1次方程式(2)の高精度保証付き解が求まるわけであるが、この手法はたとえば算術式

$$\begin{aligned} f(p) &:= ap^3 + bp^2 + cp + d \\ &= ((ap + b)p + c)p + d \end{aligned}$$

の高精度評価にも適用できる。それには

$$\begin{aligned} x_1 &= a \\ x_2 &= x_1 p + b \\ x_3 &= x_2 p + c \\ x_4 &= x_3 p + d (= f(p)) \end{aligned}$$

とおいて問題を(2)で各係数をそれぞれ次の形にしたときの解を求めることに帰着させるのである。

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ -p & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -p & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -p & 1 \end{bmatrix} \quad x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} \quad b = \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \\ d \end{pmatrix}$$

一般の複雑な算術式についても、これを適当な方法で構文解析し連立方程式の解法に変換することが可能である⁵⁾。さらに $\sin x$ 、 $\log x$ などの初等関数の値を高精度保証付きで得ることも、多項式近似とその誤差評価式を高精度で区間評価することにより可能となる。

以上のことから分かるように、原理①~③をもとにした手法により実現できる精度保証付き計算は、日頃われわれがプログラムする科学技術計算の広い範囲をカバーするものである。この手法にもとづく精度保証付き計算システムの実用化については本特集の別稿で詳しく解説されるであろう。Kulisch らの研究実用化で注目すべき点は、位相数学上の成果の一つである Brouwer の不動点定理の成立条件を計算機内で検証することによって解の包み込みを行うという、数学者ならではの着想が見事に生かされていることである。

さて、以上述べた方法を実現するためには原理①を達成できるようなハードウェアまたはソフトウェアが必要であるが、最近久保田・伊理¹⁹⁾は区間演算を用いた別のアプローチで、そのような道具を欠く場合にも適用できる実用的な丸め誤差の推定方法を提案している (別稿参照)。

なおここで対象としたのはレベル2の精度保証であ

り、レベル1に関しては同様の方法が適用できないのはもちろんである。レベル1精度保証の問題は4.3で扱うが、そこでも本章で述べた数値計算誤差把握の技法は不可欠の道具として用いられる。

4. 分野別精度保証付き数値計算法

本章では、前章に述べた基本的な科学技術計算上の精度保証の上に立って、より高度化された数値解析上の問題に対する精度保証技法の現状を概観する。

4.1 線型及び非線型方程式

3. で詳しく述べた方法は連立1次方程式の精度保証付き解法アルゴリズムにもなっているが、このほかにも区間係数方程式に対して区間演算を用いて解を包み込む方法については多くの議論がなされている^{1), 26), 31), 39), 47)}etc. これらの中には、区間係数という性質上、ガウスの消去法のような直接法でなく前章で述べたようなNewton-likeの反復法を用いたものが多い。

また非線型方程式に対する解の精度保証法も種々研究されている。以下ではそれらの中で区間解析にもとづくいくつかの方法を紹介しておこう。

いま、非線型方程式を

$$f(x)=0 \tag{7}$$

と書く、ここに x は n 次元ベクトル空間 R^n の元で f は R^n から R^n への1回連続微分可能な写像とする。 f の x におけるフレッシュ (Fréchet) 微分を $f'(x)$ とし、区間ベクトル $X(\subset R^n)$ に対し値域 $f'(X)$ を区間ベクトルとして拡張したものを $F'(X)$ と書く。与えられた区間ベクトル X ($=n$ 次元の矩形領域)の中にある(7)の解を全て求める区間解析法として、Krawczyk-Mooreの方法があげられる^{18), 30)-32)}。

区間写像 $K(X)$ を

$$K(X):=y-Yf(y)+\{I-YF'(X)\}(X-y) \tag{8}$$

と定義する。ここに y は与えられた X 内の点で、 Y は正則行列とする。このとき反響列:

$$X^{(k+1)}=X^{(k)}\cap K(X^{(k)}) \quad k=0, 1, 2, \dots \tag{9}$$

は条件 $K(X^{(0)})\subset X^{(0)}$ 及び $\|I-YF'(X^{(0)})\|<1$ の下で $X^{(0)}$ 内にある(7)の一意解に収束することが示される。ここに $\|\cdot\|$ は $n\times n$ 行列のノルムであり、(8)の y と Y とは各 k ごとに一定手順で定められる³²⁾。いま、(7)の解を探る領域を B とするとき、 $X\subseteq B$ なる任意の部分領域(区間ベクトル)に対し次の三つの場合が起こり得る:

- i) X は(9)の収束条件を満たす
- ii) $K(X)\cap X=\emptyset$ (空集合)となる
- iii) 上記i), ii)のいずれでもない

i)ならば(7)の解は反復(9)で X 内に精度良く包み込むことができる。ii)の場合は X の中に(7)の解が存在しない。iii)のときは X をさらに小さな領域に分割(bisect)して同様のテストを行う。この手続きを繰り返せば原理的には B 内の全ての解を区間で包み込むことが可能となる^{31), 32)}。この場合、領域分割の方法がアルゴリズムの効率に大きく影響するが、奥村らは⁴³⁾電子回路解析に現れる非線型超越方程式の区間解を求めるための効率的アルゴリズムを与えている。

次にKrawczyk-Moore法の一つの変形とみられるものにRump⁴⁸⁾の提案する方法がある。これはあらかじめ他の方法(たとえば通常のNewton法など)によって(7)の近似解 \bar{x} を十分精度良く求めておき、それを含む小区間内に真の解を包み込むことをねらうものである。いま $X^{(0)}=\{\bar{x}\}$ とし、 $X^{(k)}$ を上下に $\epsilon>0$ だけ拡張したものを(ϵ -inflationという)を $\tilde{X}^{(k)}$ とすると、

$$X^{(k+1)}:=-R\cdot f(\bar{x})+\{I-RF'(\bar{x}+\tilde{X}^{(k)})\}\tilde{X}^{(k)} \tag{10}$$

($k=0, 1, 2, \dots$)と定義する。ここに R は $n\times n$ 行列で通常 $f'(\bar{x})^{-1}$ の近似行列にとられる。このとき $X^{(k+1)}\subset\tilde{X}^{(k)}$ ならば(7)の解 x^* が $\bar{x}+X^{(k+1)}$ の中にただ一つ存在することが示される。なお(10)と(4)の右辺を比較すれば分かるように、前章で述べた線型方程式に対する方法は上述の方法において $f(x)=Ax-b$ とおいたものとみなすことができる。ただ線型の場合には最大精度の内積演算と非常に密接な関連をもつため前章で区別してとりあげたわけである。

次にパラメータを含む非線型方程式

$$F(x, \lambda)=0 \tag{11}$$

の解 x の λ に対する変化を明らかにする問題は実用上しばしば現れるが、Neumaier⁴⁰⁾は(11)を2変数(ただし、一般には x, λ ともベクトル)の方程式とみなし、前述の領域分割法と類似したアルゴリズムにより(11)の解曲線を小区間の和で包み込む方法(covering methodと呼んでいる)を与えている。ただし、この方法では「解の存在しない区間を取り除く」というものであるため厳密な意味で解を特定したことにはならない点に注意を要する。一方Lohner²³⁾は最近(11)の1組の解 (x_0, λ_0) を通る解集合を、次の微分方程式の初期値問題に対する解曲線として求めるといふ新しい方法を与えている。

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = F_x(x, \lambda), & x(0) = x_0 \\ \frac{d\lambda}{dt} = -F_\lambda(x, \lambda), & \lambda(0) = \lambda_0 \end{cases} \quad (12)$$

これは Neumaier 法とは違って(11)の1組の解, または解の範囲が既知の場合にしか適用できないが, 解集合を厳密に捉えられる点が特長である. なお方程式(12)の解の包み込みには彼自身の方法(4.2参照)が用いられている.

以上のほかに Newton 法に対する精度保証の方法として, Kantorovich 型定理にもとづく事後誤差評価法^{57), 58)}もしばしば用いられる.

これに関しては別稿で解説されるのでここでは省略する. なお, 非線型方程式の解法に Newton-like の方法を適用する場合, 関数の導関数値を区間評価することがしばしば必要となるが, それを効率良く実行するアルゴリズムも研究されている^{6), 19), 45)}.

また, 関数の最大/最小値を求める最適化問題は, 本質的に $f'(x)=0$ の解を求める問題に帰着するため, これに関しても区間解析を用いた研究がなされている^{7), 9)}.

4.2 関数方程式

関数方程式に対する精度保証付き数値計算を実現するためには, まずレベル1誤差 (=離散化誤差) を定量的に数値として捉えることができないなければならない. レベル1誤差の解析は従来から, “a priori” なもの, すなわち関数方程式の厳密解を既知とした理論的誤差評価が中心であったが, 今の場合当然それでは不十分であり, “a posteriori” な評価法を必要とする. ところで, これまで述べてきたレベル2の数値計算に対する精度保証と関数方程式に対するそれとの本質的相違は, 前者が数学的に有限次元の問題であるのに対し, 後者が一般に“無限次元”を扱うものであるという点にある. すなわち関数方程式は一般に無限個の未知数をもつ無限個の方程式と等価であり, たとえ浮動小数点演算が無限精度で行われたとしても, それだけでは誤差が消失することはない. しかしながら, 有限桁での浮動小数点演算の a posteriori な精度保証が数学的に100%の厳密さで実現できたように, 無限次元の問題も有限次元における有限操作で捉えることができないであろうか? 事実, いくつかの場合にはそのような“無限の超越”が可能になってきた³⁹⁾. 以下では微分方程式を中心にしてそれらの試みを概観してみよう.

i) 常微分方程式

前にも述べたことから分かるように, 一つの区間 $X=[a, b]$ は $a \leq x \leq b$ となる全ての実数の集まりという無限集合を表現しており, このことが有限桁浮動小数点演算での完全な精度保証を与える上で本質的役割を果たしている. この区間のもつ“無限性”は関数方程式の解に対する精度保証においても“無限の壁”を超える一つのカギを与える. それは区間 $[a, b]$ が, 「ある集合 S 上で定義された関数でその値域が a と b の間にあるもの全体の集合」とみなすことができるからである. たとえば $S=[0, 5]$ に対して区間 $X=[1, 3]$ は, 次の関数集合と解釈できる:

$$X = \{f \in C(S) \mid 1 \leq f(x) \leq 3, \forall x \in S\}$$

ここに $C(S)$ は S 上の連続関数全体の集合である. 区間をこのように解釈すると, $f(x) = \frac{x}{5} + \frac{3}{2}$ や $f(x) = \sin \pi x + 2$ といった関数も区間 $[1, 3]$ の要素として含まれることになる(図-4).

さて, Kaucher & Miranker¹⁴⁾⁻¹⁶⁾ は実数に対する有限桁での浮動小数点演算に対応するものとして, 関数を対象とした ultra-arithmetic という概念を導入し, 関数方程式の計算機上での操作を代数方程式と同様に扱うことを提案している. これは関数の集合(関数空間)上に適当な基底 $\{\phi_j\}_{j=1,2,\dots}$ を固定しておき, 計算機上で扱う全ての関数を関数型データタイプ (Functoid と呼んでいる) という $\{\phi_j\}$ の有限級数として表現し(これを関数の rounding という), その間の演算(四則演算と積分)を定義するものである. たとえば基底として $\{\phi_n\}_{n=0,1,\dots}$ をとり N 項までの rounding を用いる場合, 関数型データタイプは

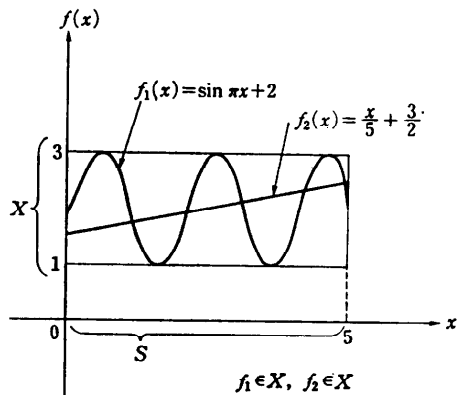


図-4 区間 $X=[1, 3]$ の関数集合としての解釈

$\sum_{n=0}^{N-1} a_n t^n$ という有限和に対応した N 次元配列 $(a_0, a_1, \dots, a_{N-1})$ として表される. より具体的には $\sin t = t - \frac{1}{3!}t^3 + \frac{1}{5!}t^5 - \dots$ という Taylor 展開を利用して, $N=7$ の場合

$$\sin t \approx \left(0, 1, 0, -\frac{1}{3!}, 0, \frac{1}{5!}, 0\right)$$

と表現するたぐいである. さらに有限級数表現したときの打ち切り誤差を考慮できるような関数型データタイプとして interval functoid という概念を導入している. 上記の例だと

$$\sin t \in \frac{1}{6}[-1, 1] + t - \frac{1}{3!}t^3 + \frac{1}{5!}t^5, \forall t \in [0, 2\pi] \quad (13)$$

となるから interval functoid としては, 区間を成分とする配列 $\left(\frac{1}{6}[-1, 1], 1, 0, -\frac{1}{3!}, 0, \frac{1}{5!}, 0\right)$ がとられる. このことは実数全体を $\{10^k\}_{k=0, \pm 1, \dots}$ を基底とした無限級数 (係数は 0 から 9 までの整数) の全体と考えたとき,

$$\begin{aligned} \sqrt{2} &= 1.4142\dots \\ &= 1 \times 10^0 + 4 \times 10^{-1} + 1 \times 10^{-2} + 4 \times 10^{-3} + \dots \\ &\in 1 \times 10^0 + 4 \times 10^{-1} + 1 \times 10^{-2} + 4 \times 10^{-3} \\ &\quad + [0, 10^{-3}] \\ &= [1.414, 1.415] \end{aligned}$$

として浮動小数点数を区間表示するのと類似している. interval functoid は一般には (13) の右辺のような表示を含む次の形の区間多項式をその典型的な要素とするものである:

$$X(t) = \sum_{n=0}^N A_n t^n$$

ここに A_n は実数区間であり, $X(t)$ は次のようにグラフの意味に解釈される.

$$X(t) = \{f \in C([a, b]) \mid f(t) \in \sum_{n=0}^N A_n t^n, \forall t \in [a, b]\}$$

これは前に述べた関数の無限集合としての区間を一般化したものである. したがって当然 $X(t)$ は多項式の集合ではなく, たとえば $e^t \in [-1, 1] + [0, 2]t$ ($t \in [0, 1]$) という関係も成り立つことになる. 簡単な例として次の初期値問題

$$\frac{dx}{dt} = x, \quad x(0) = 1 \quad 0 \leq t \leq 1 \quad (14)$$

の解を区間多項式を用いて包み込むことを考えてみよう. (14) は不動点形式に

$$F(x) := 1 + \int_0^t x dt = x$$

と書けて, 区間多項式

$$X(t) = [0.95, 1.05] + [1.08, 1.20]t + [0.54, 0.60]t^2$$

に対して, $t^3 \in \left[0, \frac{1}{4}\right] + \frac{3}{4}t$ を考慮すると

$$F(X)(t) \subset X(t) \quad (\forall t \in [0, 1])$$

が成立することが分かる. よってプロウエル不動点定理の無限次元版であるシャウダー (Schauder) の不動点定理²⁵⁾によって, 関数の集合 $X(t)$ の中に (14) の解 $x(t) = e^t$ の存在が立証されたことになる. 実際に (14) の $X(t)$ を計算機内で構成するためには適当な反復法が用いられる¹⁴⁾. この方法は関数方程式の近似解の計算と厳密解の検証とを, それぞれ functoid 及び interval functoid 上で一貫した手続きの下に行う自己検証的算法の確立を旨とし, その実現を容易にするためのプログラム言語への提言までなされており非常に意欲的な試みといえる. 多くの数値例も与えられているが現在のところ本方式の適用に際しては不動点方程式を構成する写像の縮小性 (contractivity) を前提とするなど制約も厳しいようである.

このほかに区間を用いて常微分方程式の解を包み込む技法としては Moore-Shen³³⁾ や Lohner²⁴⁾ などの方法がある. これらの中で Lohner は初期値問題の 1 段階近似解法の残差評価を Taylor 展開と区間解析を用いて精密化し, 非常に高精度で解を包み込む方法を提案している. これは Shooting method を用いた境界値問題への適用もなされており, ヨーロッパを中心とした研究者の間で高い評価を得ているようである. ただし, これら区間法全般について言えることは, 区間に対する微分演算が原理的に不可能であるため, 微分方程式は全て一度等価な積分方程式に変換しなくてはならないことである. このことは区間法の偏微分方程式への適用を本質的に困難にしている.

以上の方法は関数 (またはその集合) を表現するのに区間を用いており, 区間解析の利用は本質的であるが, このほかに手法自体は純解析的方法を用い, 区間解析は途中計算の丸め誤差把握にのみ利用するものもある. これは主に Newton-Kantorovich 型定理の局所収束条件を数値的に確認することで解の存在と存在範囲の検証を行う方法である. このような試みについては我が国でも非線型常微分方程式

$$\frac{dx}{dt} = f(t, x) \quad (x, f \text{ はベクトル})$$

に対する占部の方法⁵⁴⁾ がよく知られている. 最近,

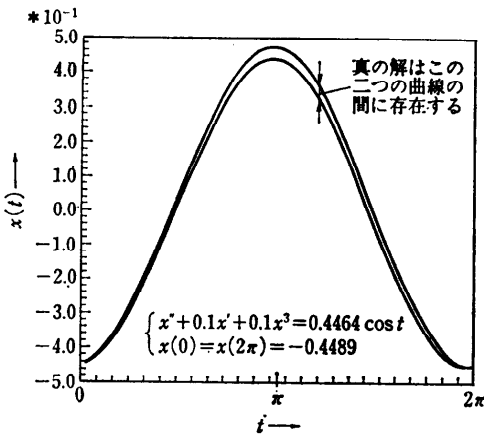


図-5 Duffing 方程式の解の包み込み例

山口, 吉原, 西田⁵⁶⁾ はこれを改良した方法により Duffing 方程式:

$$x'' + \varepsilon x' + bx + cx^3 = P \cos t$$

(ε, b, c, P は非負定数) の周期解を高精度の保証付きで捉えることに成功している。そのほかにも Newton-like の方法により精度保証付きの計算法を与えているものに Kedem¹⁷⁾, McCarthy²⁷⁾ らの研究がある。また、筆者の方法³⁷⁾ はもともと楕円型偏微分方程式の解を数値的に検証する目的で導入したものであるが、常微分方程式に対しても同じ原理が適用できる。この方法の詳細は次項に述べるが、区間法と純解析的方法の中間に位置するものであり、前出の Duffing 方程式に対する 2 点境界値問題を精度良く検証できることが分かっている (図-5)。

以上のほかにもいくつかの方法が提案されているが^{41), 51)}, これらを含めて常微分方程式に対する精度保証付き数値計算法は一応実用レベルに達したとみることができよう。もちろん、いまだケース・スタディの段階であり、今後なお多くの実例に対する適用を経て改良が重ねられ真に有効な手法が定着していくものと思われる。

ii) 偏微分方程式

偏微分方程式は常微分方程式に比べて理論的/実際の取扱いは複雑であり、多くの場合初等的手段で議論することは難しい。一般に偏微分方程式に関する数学的な解の存在、一意性、解の大きさの評価などの議論を行うためには超関数 (distribution) の理論を背景とした適切な関数空間を設定し、その中で弱い解 (weak solution) を定式化することが必要となる。数学専攻以外の多くの人々にとってこのような数学解析

の理論は煩しく、敬遠されているのが現実であろう。近年スーパー・コンピュータの登場や有限要素法をはじめとする有力な数値解法手段の開発にとまない、工現場などにおける実用的な近似解を求める手段はずいぶん普及してきたものの、近似解の収束性や誤差解析となるとやはり偏微分方程式論の結果も必要となり、これまた一部の限られた人たちだけの関心事にとどまっている。このようなわけで、近似解に対する a posteriori な誤差評価、すなわち精度保証の問題に関する研究もいまだ非常に少ない状況にある。ここでは筆者が提案している楕円型方程式の弱い解を数値的に包み込む方法の概略を紹介しよう。

次の 2 階非線型楕円型境界値問題を考える:

$$\begin{cases} -\Delta u = f(x, u, \nabla u), & x \in \Omega, \\ u = 0, & x \in \partial\Omega. \end{cases} \quad (15)$$

ここに Ω は $\mathbb{R}^n (1 \leq n \leq 3)$ の有界凸領域で、その境界 $\partial\Omega$ は区分的に滑らかとする。また $\Delta u \equiv \sum_{j=1}^n \frac{\partial^2 u}{\partial x_j^2}$ 及び $\nabla u \equiv (\frac{\partial u}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial u}{\partial x_n})$ とし、 f には適当な条件が付加される。(15) に対する弱い解 u は次の変分方程式と等価である。

$$(\nabla u, \nabla v) = (f(\cdot, u, \nabla u), v) \quad \forall v \in H_0^1, \quad (16)$$

ここに、 Ω 上の関数 ϕ, ψ に対して $(\phi, \psi) = \int_{\Omega} \phi(x) \psi(x) dx$ とし、 H_0^1 は Ω 上で 2 乗可積分な導関数をもつような、斉次境界条件を満たす関数の集合を意味する。このとき (16) は不動点方程式: $u = F(u)$ の形に書くことができる。ここで F は次式を満たすような H_0^1 から H_0^1 への写像で特にコンパクトという性質をもつ。

$$(\nabla F(u), \nabla v) = (f(\cdot, u, \nabla u), v), \quad \forall v \in H_0^1$$

したがって、有界凸閉集合 $U \subset H_0^1$ で $F(U) \subset U$ を満たすものを見出すことができれば、(シャワダーの) 不動点定理によって、(15) の弱い解 u の存在を集合 U の中に立証できたことになる。このことは、 U を数値的に精度良く構成できれば、(15) の解 u が精度保証付きで求められることを意味している。問題はそのような U を計算機の中でどうやって構成するかであるが、与えられた関数 $\phi \in H_0^1$ に対して、 $\psi = F(\phi)$ は次のポアソン方程式の解として定まるものであり、直接計算することはできない。

$$\begin{cases} \Delta \psi = f(x, \phi, \nabla \phi) & x \in \Omega \\ \psi = 0 & x \in \partial\Omega \end{cases} \quad (17)$$

そこで ψ の近似解 ψ_h とその誤差 $\alpha = \psi - \psi_h$ を評価

することによって、(17)の解を包み込むことを考える。実際には、 H_0^1 の有限次元部分空間 S_h (h は $0 < h < 1$ なるパラメータで通常は領域 Ω を有限要素に分割したときの要素のサイズを表す) を設定し、そこでの近似解を ϕ_h とする。このとき S_h のもつ近似性を用いて誤差の限界 $|\phi - \phi_h|$ は H_0^1 におけるノルムとして数値的に評価できる。よって、 $F(\phi)$ の S_h への丸め (Rounding) を $R[F(\phi)] := \phi_h$ で定めるとき、丸め誤差 (Rounding Error) $RE[F(\phi)] \subset H_0^1$ を

$$\phi = F(\phi) \in R[F(\phi)] + RE[F(\phi)]$$

となるように数値として計算することができる。このことは ϕ が関数の集合のときも同様であり、その場合 ϕ_h は S_h の基底に関する区間係数の1次結合で表現される。こうして、不動点定理の成立条件は

$$R[F(U)] + RE[F(U)] \subset U \tag{18}$$

と書くことができ、左辺は与えられた集合 U に対して計算機内で求められる。(18)を満たす U を実際に構成するためには概念的に次式で表される反復法が用いられる。

$$U_n = R[F(U_{n-1})] + RE[F(U_{n-1})] \quad n=1, 2, \dots$$

ここで通常 U_0 は問題(15)の近似解にとられる。文献36)では次の非線型方程式に対する解の検証数値例が与えられている：

$$-\Delta u = bu^2 + g$$

(b, g は矩形領域 Ω 上の有界関数)。

特に(15)が次の形の線型方程式

$$-\Delta u = b \cdot \nabla u + cu + g$$

(b, c, g は既知関数) の場合には上記の各計算手順は単純化され^{34), 35)}、さらに区間法の効用として、たとえば

$$-\Delta u = [-5, 5]u + [2, 3] \tag{19}$$

のような区間を係数とする方程式 (の集団) も扱うことができる。ここに(19)の右辺の区間は前項のようにグラフの意味で解釈したものである。また、発展方程式に対しても同じ原理が適用できることが明らかになり、現在その具体的手順の検討が進められている。

このほかに Moore-Shen³³⁾ は偏微分作用素の2次項までの Taylor 展開を用いて、非線型方程式 $\Delta u = u^2$ の解を区間法により包み込む方法を述べているが、その方法は computational なものとは言い難い。ま

た単調作用素の性質を利用した楕円型及び放物型方程式の解の区間による精度保証の例²⁹⁾ などもあるがいずれも特殊な場合のみ適用可能な方法である。前項にも述べたように区間法により微分方程式の解を包み込むためには、等価な積分方程式を用いる必要があるが、たとえば楕円型方程式(15)をグリーン関数を用いて積分方程式になおすことは、理論上は可能であっても常微分方程式の場合のように数値的に簡単に扱えるとはとても考えられない。同じ理由で区間法は、変分原理による偏微分方程式の定式化の自然な離散化版として広く普及し定着している有限要素法とも馴染みにくいものがある。いずれにしても偏微分方程式に対する実用的な精度保証付き計算法の開発ははまだこれからの課題といえよう。

4.3 その他の応用例

精度保証付き数値計算の係わる問題の一つに、計算幾何学²⁾ における形状認識の問題がある。ここではその中で直線の交差判定問題を取りあげてみよう⁴⁴⁾。いま平面上の直線が

$$f(x, y) := 1934.5x - 656.38y - 2.9236 = 0$$

と表されているとする。このとき、与えられた点 p_i ($i=1, 2, 3$) のこの直線に対する位置を、仮に有効数字5桁の浮動小数点計算によって決定するという問題 (point-line-location) を考えてみよう。その結果は図-6 に示すとおり全て誤った判定となってしまふ。このような事実が原因となって、直線の交差判定に誤った結果をもたらす。すなわち、いま線分 A, B, C が非常に小さな領域で交差している場合を考える (図-7)。計算機の丸め誤差に起因する point-line-location の判定誤りによって、たとえば図-7 で交点 $B \cap C$ を最も左にある (すなわち、交点の x 座標が最も小さい) と誤って判断してしまう。文献44)では、“もともとの直線の式自体は計算機で正確に表現できる数により規定されている” という仮定の下に、このような誤りを回避できるアルゴリズムが与えられてい

点の位置		p_1	p_2	p_3
			(2269.2, 6687.8)	(2269.3, 6688.1)
点の直線 に対する 位置	真の位置 計算結果	直線 上	直線より上	直線より下
		直線より下	直線より下	直線 上

図-6 point-line-location の判定誤りの例

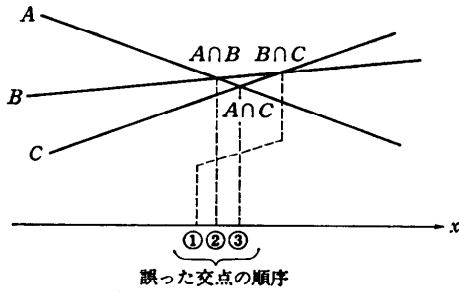


図-7 計算誤差による交点順序の判定誤り

る。この手順は基本的にはすでに 3. で述べた内積の完全精度演算と、算術式の lsba 評価を前提とすれば、point-line-location をはじめとするテスト処理が正しく実行できるという事実にもとづいている。

また、杉原、伊理⁵²⁾は、同じく計算幾何学上の問題である、平面上に分布する点の勢力圏を示すポロノイ図の構成において、数値誤差は前提とした上で位相構造を数値計算結果よりも優先させるという手法を用いて、数値的に安定なアルゴリズムを与えている。このような技法も数値計算の品質保証法の一つとみなされるが、精度保証付き浮動小数点方式を併用すればさらに精度と効率の両面で改良される可能性がある。

このほかに文献 53) では ESPRIT の研究報告として、行列の特性を考慮した固有値の計算、連立 1 次方程式の解、数値積分など問題別の精度保証付き計算の実現例が詳しく述べられている。また文献 28) には丸め誤差の確率的扱いや精度保証に関連した数式処理の話題などもとりあげられている。

5. 品質保証用ソフトウェア

これまでに述べた精度保証付き数値計算を計算機上で実現するため、すでにいくつかのソフトウェア・パッケージやプログラム言語が開発されているのでその概要を述べよう。

IBM 社では、1980 年初頭より始まるカールスルーエ大学との共同研究のもとに、線型計算をはじめとする広い範囲の数値計算に精度保証を与えるソフトウェアとして ACRITH (High-Accuracy Arithmetic Subroutine Library) と称するサブルーチン・ライブラリの集合体を開発している⁵²⁾。これは中～大型機の FORTRAN ユーザがサブルーチンコールとして利用できる形で提供されており、およそ次のような精度保証付き計算機能をもっている。

- 完全精度の内積計算
- 区間四則演算
- 算術式の区間評価
- 連立方程式をはじめとする線型代数的問題の区間解
- 初等関数の区間評価

なお、このソフトウェアについては本特集の別稿で解説されると思うので詳細はそちらに譲ることにする。また GIEMENS 社の提供するパッケージ ARITHMOS も ACRITH と同じ方向と原理にもとづき開発されたものである。

さて、区間演算をはじめとする種々の精度保証付き科学計算を実行するために、プログラム言語仕様自体にそれらの機能の記述法をとり入れることは自然な考えであろう。この方向に沿って開発されたものが FORTRAN-SC (FORTRAN for Scientific Computation) と呼ばれる言語である⁵³⁾。これは従来の FORTRAN 77 をベースとして、それに精度保証機能を付け加えたものであるが、最新の ISO 勧告原案である FORTRAN 8x における多くの新機能も包含する形で設計されている。この言語の主な特徴は次のとおりである。

- ベクトルや行列の扱いが自然な数学表現に近い形で可能
- 動的な配列確保機能によるメモリ使用効率の向上
- 演算子のユーザ定義機能による記述性とプログラムの読みやすさの向上
- 区間演算の記述が可能
- ドットプロダクト表現による完全精度内積演算の実行が可能

図-8 は関数 $f(x) := x^2(x^2/3 + \sqrt{2} \sin x) - \sqrt{3}/9$ に対し、 $f(x)=0$ の根を区間ニュートン法により、できるだけ狭い区間 Y の中に包み込むアルゴリズムの FORTRAN-SC によるプログラム例である。

一方、FORTRAN-SC が中～大型機での実現を想定しているのに対して、マイコン上での精度保証付き計算をサポートすることをねらった言語として PASCAL-SC がある⁵⁴⁾。これは文字どおり従来の PASCAL に区間演算をはじめとする精度保証機能を付加したものであるが、この言語については別稿で詳しく解説されるであろう。このほか、精度保証付き数値計算をインタラクティブに行うためのプログラミング環境システムも開発されつつある⁵⁵⁾。

```

00000***TOP OF FILE***
00001  P R O G R A M I N E W T
00002  INTERVAL X,Y,M,DERIV,F
00003  LOGICAL CRITER
00004
00005 1  WRITE(*,*)'Please enter starting interval'
00006  READ(*,*,END=999)Y
00007  IF(CRITER(Y)) THEN
00008 10  X=Y
00009      WRITE(*,*) X
00010      Y=(M(X)-F(M(X)))/DERIV(X)).IS. X
00011      IF=(X.EQ.Y) GOTO 1
00012      GOTO 10
00013  ELSE
00014      WRITE(*,*)'Criterion not satisfied'
00015  END IF
00016  GOTO 1
00017 999 STOP
00018  END
00019
00020
00021  F U N C T I O N  F ( X )
00022  INTERVAL F, X
00023  F=X*X*(X*X*3+SQRT((<2>))*SIN(X))-SQRT((<3>))/19
00024  RETURN
00025  END
00026
00027  F U N C T I O N  D E R I V ( X )
00028  INTERVAL DERIV, X
00029  DERIV=X*(4./3*X*X+SQRT((<2>))*(2*SIN(X)+X*COS(X)))
00030  RETURN
00031  END
00032
00033  F U N C T I O N  M ( X )
00034  INTERVAL M, X
00035  M=IVAL(INF(X)+(SUP(X)-<INF(X)>/<2>))
00036  RETURN
00037  END
00038
00039  F U N C T I O N  C R I T E R ( X )
00040  LOGICAL CRITER
00041  INTERVAL X,F,DERIV
00042  CRITER=(O..IN.F(X)).AND..NOT.(O..IN.DERIV(X))
00043  RETURN
00044  END
00045***END OF FILE***

```

F, M, X, O, O, O

区間の共通部分

区間表示 e.g. (<2.0, 2.02>)

区間の上限

区間の下限

丸め方法の指定

O ∈ F(X) のテスト

図-8 FORTRAN-SC によるプログラム例

6. あとがき

以上、精度保証付き数値計算法について、その意義と実現方法そして数値計算のいくつかの分野の現状を概観したが、区間解析に係わる技法を中心に扱ったので内容的に幾分偏ったものにみえるかもしれない。

しかしながら、現在この分野において大きな“ブレークスルー”が進行しつつあることを分かって欲しいという筆者の意図をご理解いただければ幸いです。

筆者はもともと微分方程式の近似解に対する誤差評価に興味をもっていたが、この分野に深入り(?)するようになった動機は Kaucher-Miranker の文献¹⁴⁾との出会いであった。その後 Kaucher 氏との個人的交流やカールスルーエ大学の訪問などにより、彼らの

研究が ESPRIT におけるプロジェクトの一つとして進行しており、その中核となっているのが Kulisch 教授の率いるカールスルーエ大学数学学部応用数学教室であることを知った。約 20 名に及ぶ研究スタッフが同一目的の実用化研究に従事している有様は、純粋な真理探求を中心とする我が国の理学部数学教室ではとても考えられないことであり、非常に大きな驚きであった。区間解析研究の草分けの 1 人である Alefeld 教授も同教室のメンバであり研究者層の厚さをあらためて感じさせるものがある。計算機演算の数学的に厳密なモデル化を行い、位相数学におけるプロウエル不動点定理にもとづき精度保証を図るという着想もそのような環境なればこそ生まれたのではあるまいか。また、とかくの批判はあるものの¹⁵⁾、すでに世界的な大手メインフレーム・メーカによりその研究成果は実用

に供せられつつあり、我が国はこの分野に関して完全に立ち遅れの形となっている。さらに注意すべきことは、そのような研究実用化が決して従来方式の延長線上でなされたものではないという点である。この点、世界中に研究所を有する計算機メーカーがその有効性に気付き、いち早く大学との共同研究をスタートさせ実用化を図ったことは卓見というべきか。がそれと同時に、こういった萌芽的研究開発に対する我が国における層の薄さあるいは幅の狭さといったものを痛感せざるをえない。筆者は近年、米国オハイオ州立大学での計算の信頼性に関する国際研究集会(1987年9月)、スイス・バーゼル大学における自己検証の数値計算法に関するシンポジウム(1989年10月)、そして西ドイツ・オーベルヴォルフファッハ数学研究所で行われた区間解析の研究集会(1990年3月)に出席する機会を得た。これらの会議に参加した印象では、種々の品質保証用ソフトウェアの実用化により、丸めの誤差の影響は高い精度で除去できることが常識となっており、その意味では浮動小数点演算はすでに整数計算と同様の信頼性を与えられたといえよう。これにともない有限次元の問題に対する精度保証は完全な実用段階に入っており、無限次元の場合も常微分方程式についてはそれに近づきつつあるが、偏微分方程式となるとまだまだこれからという感じである。いずれにせよ、これまで我が国では科学計算の高信頼化としては、せいぜい多倍長演算を行うことくらいしか考えなかったように思うが、今後そのような認識を大いに改める必要がある。

参 考 文 献

- 1) Alefeld, G. and Herzberger, J.: Introduction to Interval Computations, Academic Press, New York (1983).
- 2) 浅野: 計算幾何学とその応用, 情報処理, Vol. 25, No. 3, pp. 208-221 (1984).
- 3) Bleher, J. H. et al.: FORTRAN-SC: A Study of a FORTRAN Extension for Engineering/Scientific Computation with Access to AC-RITH, Computing, 39, pp. 93-110 (1987).
- 4) Bohlender, G. et al.: PASCAL-SC: A Computer Language for Scientific Computation, Academic Press, Orlando (1987).
- 5) Böhm, H.: Evaluation of Arithmetic Expressions with Maximum Accuracy, A New Approach to Scientific Computation (eds. Kulisch, U. & Miranker, W. L.), Academic Press, New York, pp. 121-137 (1983).
- 6) Corliss, G. F.: Application of Differentiation Arithmetic, Reliability in Computing (ed. Moore, R. E.), Academic Press, San Diego (1988).
- 7) Fujii, Y., Ichida, K. and Ozawa, M.: Maximization of Multivariable Functions Using Interval Analysis, in Interval Mathematics 1985 (ed. Nickel, K.), Lec. Notes in Comp. Sci., No. 212, pp. 17-26 (1986).
- 8) Gregory, R. T. and Krishnamurthy, E. V.: Methods and Applications of Error-Free Computation, Springer-Verlag, New York (1984).
- 9) Hansen, E.: An Overview of Global Optimization Using Interval Analysis, Reliability in Computing (ed. Moore, R. E.), Academic Press, New York, pp. 289-307 (1988).
- 10) —: Global Optimization Using Interval Analysis—the Multidimensional Case, Numer. Math., 34, pp. 247-280 (1980).
- 11) 一松 信, 戸川隼人編: 数値計算における誤差, 共立出版 (1975).
- 12) IBM High-Accuracy Arithmetic Subroutine Library (ACRITH), Program Description and User's Guide, SC 33-6164-02, 3rd edition (1986).
- 13) Jansen, P. and Weindner, P.: High-Accuracy Arithmetic Software—Some Test of the ACRITH Problem-Solving Routines, ACM Transactions on Mathematical Software, 12, pp. 62-70 (1986).
- 14) Kaucher, E. and Miranker, W. L.: Self-Validating Numerics for Function Space Problems, Academic Press, New York (1984).
- 15) —: Self-Validating Computation Ordinary and Partial Differential Equations, Computer-arithmetic (eds. Kaucher, E. et al.), B. C. Teubner Stuttgart, pp. 221-254 (1987).
- 16) —: Validating Computation in a Function Space, Reliability in Computing (ed. Moore, R. E.), Academic Press, San Diego, pp. 403-425 (1988).
- 17) Kedem, G.: A posteriori Error Bounds for Two-Point Boundary Value Problems, SIAM J. Numer. Anal., 18, pp. 431-448 (1981).
- 18) Krawczyk, R.: Newton-Algorithmen zur Bestimmung von Nullstellen mit Fehlerschranken, Computing, 4, pp. 187-201 (1969).
- 19) 久保田, 伊理: 高速自動微分法と区間解析とを用いた丸め誤差推定, 情報処理学会論文誌, Vol. 30, No. 7, pp. 807-815 (1989).
- 20) Kulisch, U. and Miranker, W. L.: Computer Arithmetic in Theory and Practice, Academic Press, New York (1981).
- 21) — (eds.): A New Approach to Scientific Computation, Academic Press, New York (1983).

- 22) —: The Arithmetic of the Digital Computer: A New Approach, *SIAM Review* 28, pp. 1-40 (1986).
- 23) Lohner, R.: Computing Enclosures for the Solutions of Nonlinear Parameter Dependent Systems and Ordinary Boundary Value Problems, 計算機演算と自己検証の数値計算法に関する国際シンポジウム(バーゼル)講演アブストラクト(1989).
- 24) —: Enclosing the Solutions of Ordinary Initial and Boundary Value Problems, *Computerarithmetics* (eds. Kaucher, E. et al.), B. G. Teubner, Stuttgart, pp. 255-286 (1987).
- 25) 増田久弥: 非線型数学, 朝倉書店(1985).
- 26) Mayer, G.: Enclosing the Solutions of Linear Equations by Interval Iterative Processes, *Computing Suppl.* 6, pp. 47-58 (1988).
- 27) McCarthy, M. A. and Tapia, R. A.: Computable a posteriori L-Error Bounds for the Approximate Solution of Two-Point Boundary Value Problems, *SIAM J. Numer. Anal.*, 12, pp. 919-937 (1975).
- 28) Miranker, W. L. and Toupin, R. A. eds.: *Accurate Scientific Computations*, Springer Lec. Notes Comp. Sci., No. 235 (1985).
- 29) Moore, R. E.: *Interval Analysis*, Prentice-hall, Englewood Cliffs, New Jersey (1966).
- 30) —: A Test for Existence of Solutions to Nonlinear Systems, *SIAM J. Numer. Anal.*, 14, pp. 611-615 (1977).
- 31) —: *Methods and Applications of Interval Analysis*, SIAM, Philadelphia (1979).
- 32) Moore, R. E. and Jones, S. T.: Safe Starting Regions for Iterative Methods, *SIAM J. Numer. Anal.*, 14, pp. 1051-1064 (1977).
- 33) Moore, R. E. and Shen, Z.: Interval Methods for Operator Equations, Reliability in Computing (ed. Moore, R. E.), Academic Press, San Diego, pp. 379-389 (1988).
- 34) Nakao, M. T.: A Numerical Approach to the Proof of Existence of Solutions for Elliptic Problems, *Japan Journal of Applied Mathematics*, 5, pp. 313-332 (1988).
- 35) —: A Numerical Approach to the Proof of Existence of Solutions for Elliptic Problems Part II: to appear in *Japan Journal of Applied Mathematics*, 7 (1990).
- 36) —: A Computational Verification Method of Existence of Solutions for Nonlinear Elliptic Equations, *Lec. Notes in Num. Appl. Anal.*, 10, pp. 101-120 (1989).
- 37) —: A Numerical Verification Method for the Existence of Solutions for Nonlinear Boundary Value Problems, to appear in *Pro. International Symposium on Computer Arithmetic and Self-validating Numerical Methods*, Academic Press (1990).
- 38) 中尾: 関数方程式の解の存在に対する数値的検証法, *数学*, 42, pp. 16-31 (1990).
- 39) Neumaier, A.: Linear Interval Equations, in *Interval Mathematics 1985* (ed. Nickel, K.), *Lec. Notes in Comp. Sci.*, No. 212, pp. 195-120 (1986).
- 40) —: The Enclosure of Solutions of Parameter-Dependent Systems of Equations, Reliability in Computing (ed. Moore, R. E.), Academic Press, San Diego, pp. 269-286 (1988).
- 41) Nickel, K.: The Construction of a priori Bounds for the Solution of a Two-point Boundary Value Problem with Finite Elements I, *Computing*, 23, pp. 247-265 (1979).
- 42) 大柳, 大内: 有理数演算を用いた線形方程式の解法の振舞い, *情報処理学会数値解析研究会資料* 31-3 (1989).
- 43) 奥村, 佐伯, 木嶋: 区間解析による非線形回路方程式の求解アルゴリズムに関する一考察, *信学論(A)*, Vol. J 69-A, No. 4, pp. 489-496 (1986).
- 44) Ottman, Th. et al.: On Arithmetical Problems of Geometric Algorithms in the Plane, *Computing Suppl.* 6, pp. 123-136 (1988).
- 45) Rall, L. B.: Differentiation and Generation of Taylor Coefficients in PASCAL-SC, A New Approach to Scientific Computation (eds. Kulisch, U & Miranker, W. L.), Academic Press, New York, pp. 291-309 (1983).
- 46) —: Validation of Numerical Computation, *京都大学数理解析研究所講究録* 673, pp. 1-16 (1988).
- 47) Rohn, J.: Solving Systems of Linear Interval Equations, Reliability in Computing (ed. Moore, R. E.), Academic Press, San Diego, pp. 171-182 (1988).
- 48) Rump, S. M.: Solving Nonlinear Systems with Least Significant Bit Accuracy, *Computing*, 29, pp. 183-200 (1982).
- 49) —: Solving Algebraic Problems with High Accuracy, A New Approach to Scientific Computation (eds. Kulisch, U & Miranker, W. L.), Academic Press, New York, pp. 51-120 (1983).
- 50) —: Algorithms for Verified Inclusions—Theory and Practice, Reliability in Computing (ed. Moore, R. E.), Academic Press, San Diego, pp. 199-126 (1988).
- 51) Schröder, J.: A Method for Producing Verified Results for Two-Point Boundary Value Problems, *Computing, Suppl.* 6, pp. 9-22 (1988).

- 52) 杉原, 伊理: 形状処理における一つの数值誤差対策, 情報処理学会第 37 回全国大会講演論文集 pp. 1665-1666 (1988).
- 53) Ullrich, Ch. et al. eds.: *Accurate Numerical Algorithms*, Research Reports ESPRIT, Project 1072-DIAMOND-Vol. 1, Springer-Verlag, Berlin (1989).
- 54) Urabe, M.: Galerkin's Procedure for Non-linear Periodic Systems, *Arch. Rat. Mech. Anal.*, 20, pp. 120-152 (1965).
- 55) Wilkinson, J. H.: *Rounding Errors in Algebraic Processes*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1963. 一松, 四条共訳: 基本的演算における丸め誤差解析, 培風館 (1974).
- 56) 山口, 吉原, 西田: Duffing 方程式の周期解, 京都大学数理解析研究所講究録 673, pp. 80-95 (1988).
- 57) 山本: Newton 法とその周辺, *数学*, 37, pp. 1-15 (1985) (改訂英訳版: *Sugaku Exposition* 1, pp. 219-238 (1988)).
- 58) Yamamoto, T.: A Method for Finding Sharp Error Bounds for Newton's Method Under the Kantorovich Assumptions, *Numer. Math.* 49, pp. 203-220 (1986).

(平成 2 年 5 月 1 日受付)
