精度保証と HPC

渡部 善隆*1

1. 精度保証付き数値計算とは

「精度保証付き数値計算」とは,

> 与えられた問題（数学モデル）の解の存在範囲もしくは一意存在の範囲を丸め誤差の厳密評価を含めて特定する算法
>
> （現代数理科学事典・第 2 版, 丸善）

です．つまり，高性能計算科学を支える数理技術としての精度保証付き数値計算（計算の品質保証）には，解の存在が未知な問題に対する計算機援用証明という数学的要素も含まれます．例えば，非線形偏微分方程式に代表される連続問題に対して数値計算を適用する過程では，離散化誤差，打ち切り誤差，丸め誤差と呼ばれるレベルの異なる誤差の混入が避けられません [2]．解の存在証明やその存在範囲を特定するためには，これらの誤差それぞれを数学的に厳密な意味で見積もるための理論・算法・実装技術を動員する必要があります．したがって，精度保証付き数値計算の守備範囲は，関数解析，微積分，線形代数，丸め誤差の制御技術，効率的なプログラミングなどの幅広い領域にわたり，しかも，各分野とも独立した研究テーマとなる深みを持っています．

2. 基盤となる技術 1: 区間演算

故・須永照雄氏により初めて導入され，R.E. Moore により体系的な萌芽をみた区間演算の手法は，精度保証付き数値計算の基礎演算となっています [1]．実数の区間 $[a,b]$ を $[a,b] \equiv \{x \in \mathbb{R} \mid a \le x \le b\}$ で定義される閉集合とします．区間 $X=[a,b]$, $Y=[c,d]$ に対し，2 項演算 $* \in \{+,\ -,\ \cdot,\ /\}$ を

$$X * Y \equiv \{x * y \mid x \in X,\ y \in Y\} \qquad (1)$$

で定義すると，式 (1) で定義される実数の集合は再び区間となり，具体的には次の形で表現されます．

$$\begin{aligned} X+Y &= [a+c, b+d], \\ X-Y &= [a-d, b-c], \\ X \cdot Y &= [\min\{ac,ad,bc,bd\}, \max\{ac,ad,bc,bd\}], \\ X/Y &= [a,b]\cdot[1/d, 1/c] \qquad (0 \notin Y). \end{aligned}$$

区間演算を実装する際には，区間の上端・下端を計算機で表現可能な有限桁の数で保持する必要があります．代表的な実装方法に，IEEE 754 規格が定める浮動小数点数と演算および丸めモードの切り替えを用いた区間演算環境がありります [4], [5]．また，無誤差変換と最近点の丸めによる区間演算の構成や，中心・半径型の区間表現・演算も提案されています [6]．

3. 基盤となる技術 2: 不動点定理

任意の Cauchy 列が収束列となるノルム空間を Banach 空間と呼びます．Banach 空間は，長さの概念の入った関数解析学の基盤空間です．Banach 空間 X, Y の作用素 $T: X \to Y$ が連続であり，かつ X の任意の有界点列 $\{u_n\}_{n=1}^{\infty}$ に対し $\{T(u_n)\}_{n=1}^{\infty}$ が収束する部分列を含むときに，T はコンパクトであるといいます．計算機援用証明では，次の定理がよく使われます．

> **Schauder の不動点定理**
> U を Banach 空間 X の空でない有界凸閉集合とする．$F: U \to U$ がコンパクト作用素であるとき，F は U に不動点を持つ．

Banach 空間 X を N 次元ユークリッド空間 $\mathbb{R}^N$ に制限したものが Brouwer の不動点定理です．定理の成立条件は，Banach 空間 X の有界凸閉集合 U に対する

$$F(U) = \{F(u) \in X \mid u \in U\} \subset U$$

の確認になります．具体的な適用例として，有限次元では連立 1 次方程式，固有値問題，非線形方程式，無限次元では常・偏微分方程式の境界値問題，常微分方程式の初期値問題，積分方程式をあげることができます [2], [3], [4], [5]．また，Schauder の不動点定理の他に，Banach の不動点定理，Newton-Kantrovich の定理も用いられます．

4. HPC への期待

特に，偏微分方程式の解に対する精度保証付き計算を遂行するためには，大規模な区間行列に対する線形問題を（近似ではなく）数学的な正しさを保証しながら解く必要があり，精度保証アルゴリズムだけでなく，高速化技術の格段の進化が待たれます．発表を通じて，精度保証と HPC を巡る双方向の活発な議論が巻き起こればと思います．

参考文献

[1] Moore, R. E., Kearfott, R. B., and Cloud, M. J.: *Introduction to Interval Analysis*, SIAM (2009).
[2] 中尾充宏，山本野人：精度保証付き数値計算，日本評論社 (1998).
[3] 中尾充宏，渡部善隆：実例で学ぶ精度保証付き計算—理論と実装—，サイエンス社 (2011).
[4] 大石進一：精度保証付き数値計算，コロナ社 (2000).
[5] Rump S. M.: Verification methods: Rigorous results using floating-point arithmetic, *Acta Numerica*, Volume 19, pp. 287–449 (2010).
[6] 山中脩也：最近点への丸めによる区間演算, 数学セミナー 10 月号, pp. 16–20 (2012).

*1 九州大学情報基盤研究開発センター 812-8581 福岡市東区箱崎 6-10-1 watanabe@cc.kyushu-u.ac.jp