精度保証付き数値計算の基礎

工学博士　大石　進一　【編著】

博士（情報科学）　荻田　武史
博士（工学）　柏木　雅英
博士（数理科学）　劉　雪峰
博士（工学）　尾崎　克久
博士（工学）　山中　脩也
博士（理学）　高安　亮紀　【共著】
博士（工学）　関根　晃太
博士（理学）　木村　拓馬
博士（理学）　市原　一裕
博士（理学）　正井　秀俊
博士（工学）　森倉　悠介
Ph.D. (Mathematics)　Siegfried M. Rump

コロナ社

まえがき

数値計算は，コンピュータがなかった時代の数値による計算の工夫から始まって，フォン・ノイマンの流体計算を目指したプログラム方式の計算機の発想を一つの始まりとする，現代のコンピュータを前提とする数値計算に至る長い歴史がある。この中で，ノイマンやチューリングのような大家の指摘などによって数値計算で得られた解の近くに真の解が存在することを示すのは多くの場合難しいとの認識が形成され，このような事後誤差評価を実際に実行することなしにコンピュータによる数値計算が行われることが，現代では日常化している。

しかし，非線形問題の解の存在など数学の問題を数値計算で証明する場合には，数値計算の誤差をさらに計算し，すべての数値計算誤差を明らかにして数値解の近くに真の解が存在することを証明しなければならないことは明白である。それ以外の場面であっても，計算が大規模化したり，安全性への要求が高くなったりすることによって，数値解析の誤差を厳密に把握することが重要となる局面は，非常に多くなりつつある。編著者は数値計算の誤差を完全に把握する数値計算（「精度保証付き数値計算」と呼ぶ）が非常に重要であると考え，この分野で 30 年近く研究を行ってきた。本書はその成果をもとに，現在における精度保証付き数値計算の基礎となる事項を体系的にまとめたものである。

精度保証付き数値計算の最も重要な点の一つは，数値解析の誤差を厳密に把握する計算に要するコストと近似計算のコストをほぼ同程度になるようにバランスさせることであり，ここに数値解析の理論と現代コンピュータのアーキテクチャに関わる技術的な知見を総動員して研究する必要性が生じる。また，解くべきは数学の問題であるので，数学の理論も必要となる。

本書は，コンピュータによる基本演算を議論することから始める（1 章，2 章）。これを抽象的に始めることもできるが，現代の数値計算における基本演算の標

準が浮動小数点演算であること，および技術的には IEEE 754 規格が用いられることが多いことから，それを前提として議論を開始する。ここで展開されている議論は基礎であるが，他書にはない，最新の成果に基づく記述がなされている。区間演算（1.2 節）も含め，基本演算の誤差を厳密に把握しようとすることによって，基本演算に潜む数値計算の難しさや勘所が数理的に体系化されて浮き彫りになる。続いて，3 章では数値計算全般で基礎となる数値線形代数の問題の精度保証理論が展開される。ここでも，連立 1 次方程式と固有値問題の精度保証付き数値計算法の基礎が最新の成果を踏まえて記述されている。4 章で取り扱う初等関数に対する精度保証法は多様な発展があるが，基礎的な記述に留めている。5 章では，数値積分について，二重指数関数公式の厳密な誤差公式を含む各種の誤差公式と精度保証の実例が示されている。6 章では，非線形方程式に対する標準的な精度保証法が示されている。7 章では，常微分方程式について，独自の有効な積分法が示され，標準的な手法との比較がなされる。8 章では，偏微分方程式について，有界領域における楕円型作用素の固有値の厳密な下限の精度保証付き数値計算法を含む，本分野の最新成果に基づく有限要素法を用いた基礎理論が展開されている。9 章では，まず，線形計画問題の精度保証法，計算幾何学問題の精度保証法が論じられる。そして，数学問題に対する計算機援用証明の例として，3 次元多様体の双曲性判定の問題への応用が述べられる。続いて，GPGPU やスーパーコンピュータなどの HPC 環境における精度保証法の展開の仕方，および MATLAB や Octave 上での精度保証法ツールである INTLAB の紹介がされる。INTLAB には，本書の 6 章までに示す多くのアルゴリズムが実装されている。

各章には章末問題が用意されている。解答例などについては，以下の本書のサポート Web ページに順次掲載する予定である。

`http://www.oishi.info.waseda.ac.jp/vncbook`

本書は編著者の研究グループと共同研究者によって執筆されている。それは以下のとおりである。

序論　荻田武史（東京女子大学），柏木雅英（早稲田大学），劉雪峰（新潟大学）
1 章　浮動小数点演算と区間演算：尾崎克久（芝浦工業大学），荻田武史
2 章　丸め誤差解析と高精度計算：尾崎克久，荻田武史
3 章　数値線形代数における精度保証：荻田武史，尾崎克久
4 章　数学関数の精度保証：柏木雅英
5 章　数値積分の精度保証：山中脩也（明星大学）
6 章　非線形方程式の精度保証付き数値解法：高安亮紀（筑波大学）
7 章　常微分方程式の精度保証付き数値解法：柏木雅英
8 章　偏微分方程式の精度保証付き数値解法：劉雪峰，関根晃太（東洋大学）
9 章　精度保証付き数値計算の応用
　9.1 節　線形計画法の精度保証：木村拓馬（佐賀大学）
　9.2 節　計算幾何の精度保証：尾崎克久
　9.3 節　3 次元多様体の双曲性判定：市原一裕（日本大学），正井秀俊（東北大学）
　9.4 節　HPC 環境における精度保証：森倉悠介（帝京平成大学）
　9.5 節　INTLAB の紹介：Siegfried M. Rump（ハンブルク工科大学），訳：荻田武史

本研究グループの形成にあたって，文科省科研費の特別推進研究や，三度にわたる JST CREST の研究費をはじめとして，国から大きな支援をいただいていることに感謝したい。本書の執筆も研究グループで行わなければ不可能であったように，この支援が，ここまで研究を進展できたことの絶対的基盤になっている。1 章から 3 章までの執筆にあたっては，9.5 節担当のハンブルク工科大学教授の Siegfried M. Rump 氏から多くのコメントをいただいた。8 章の執筆にあたっては，東京大学名誉教授の菊地文雄氏に草稿を細かく読んでいただき，たくさんのご指摘を頂戴するなど，たいへんお世話になった。カバーと挿絵には，早稲田大学栄誉フェロー・名誉教授の藪野健氏に素敵なイラストを頂戴した。この場を借りて謝意を表したい。また，とりまとめにあたり，荻田氏と尾崎氏の編集幹事としてのご尽力に深く感謝する。最後に，出版にあたり，コロナ社の温かいご配慮に感謝したい。

本書を恩師，堀内和夫先生に捧ぐ

2018 年 4 月

編著者　大石 進一

本書で用いる表記一覧

- $\subset$：部分集合
- $\subsetneq$：真部分集合
- $\mathbb{N}$：自然数全体の集合
- $\mathbb{Z}$：整数全体の集合
- $\mathbb{R}$：実数全体の集合
- $\mathbb{C}$：複素数全体の集合
- $\mathbb{F}$：浮動小数点数全体の集合
- $\mathbb{F}_*$：正負の無限大を含む浮動小数点数全体の集合
- $\mathbb{IR}$：実区間全体の集合
- $\mathbb{IR}_*$：無限区間を含む実区間全体の集合
- $\mathbb{IC}$：複素円板領域全体の集合
- $\mathbb{IF}$：浮動小数点区間全体の集合
- $\mathbb{IF}_*$：無限区間を含む浮動小数点区間全体の集合
- O：零行列（要素がすべて 0 の行列）
- I：単位行列
- $\mathtt{u}$：単位相対丸め（IEEE 754 binary64 では，$\mathtt{u} = 2^{-53}$）
- $\mathtt{F}_{\mathtt{max}}$：浮動小数点数の最大値（binary64 では，$\mathtt{F}_{\mathtt{max}} = 2^{1024}(1 - 2^{-53})$）
- $\mathtt{F}_{\mathtt{min}}$：正規化浮動小数点数の正の最小値（binary64 では，$\mathtt{F}_{\mathtt{min}} = 2^{-1022}$）
- $\mathtt{S}_{\mathtt{min}}$：浮動小数点数の正の最小値（binary64 では，$\mathtt{S}_{\mathtt{min}} = 2^{-1074}$）

目　　　　次

序　　　　論

1.　浮動小数点演算と区間演算

2.　丸め誤差解析と高精度計算

3. 数値線形代数における精度保証

4.　数学関数の精度保証

5.　数値積分の精度保証

6.　非線形方程式の精度保証付き数値解法

7.　常微分方程式の精度保証付き数値解法

8.　偏微分方程式の精度保証付き数値解法

9. 精度保証付き数値計算の応用

序　　　論

数値計算は，解析的に解くことが困難な問題を数値的に解く計算手法であるが，これは実数演算のような厳密な計算ではなく近似計算であり，計算途中でさまざまな誤差が発生するため，最終的に得られた結果がどれくらい正しいかは問題に依存する。数値計算によって得られた結果に対して，数学的に厳密な誤差限界を与える手法が，精度保証付き数値計算である。

ここでは，いくつかの例を交えながら，精度保証付き数値計算の有用性や必要性について述べる。

計算機援用証明

計算機を用いて数学的な定理を証明することを計算機援用証明（computer-assisted proof）と呼ぶ。精度保証付き数値計算は，従来の数値計算に数学的な厳密性を付加するものであり，計算機援用証明のための新しい強力なツールとなりうる。以下は，実際に精度保証付き数値計算によって計算機援用証明に成功した代表的な例である。

- ローレンツアトラクタの存在検証[1)†]（スメイルの第 14 番目の問題）
- ケプラー予想 (球充填問題) の肯定的解決[2),3)] (約 400 年間の未解決問題)
- Double Bubble 予想の肯定的解決[4)]（100 年間以上の未解決問題）

計算機を用いた証明については賛否両論があると思われるが，それを受け入れることができるならば，解くことができる問題の幅が広がることは確かである。

区 間 演 算

連続した数の集合は閉区間によって表現できる。区間演算は，通常の実数演算を区間による演算に置き換えたものである。すなわち，なんらかの計算を実

† 肩付き番号は章末の引用・参考文献を示す。

数演算の代わりに区間演算で実行すると，得られた結果は必ず実数演算による結果を含む区間となる。

アルキメデスが円に接する正多角形の挟み込みによって円周率 π を計算したことは有名である。これは，直径 1 の円に外接する正 N 角形の周の長さを P_N，内接する正 N 角形の周の長さを Q_N とすると，$Q_N < \pi < P_N$ であり，同じ円に外接する正 $2N$ 角形の周の長さは $P_{2N} = \dfrac{2P_N Q_N}{P_N + Q_N}$，内接する正 $2N$ 角形の周の長さは $Q_{2N} = \sqrt{P_{2N} Q_N}$ となる性質を利用する。この方法を採用して，さらに区間演算を用いて π の範囲を特定することを考えてみよう†。直径 1 の円に外接する正六角形の周の長さは $P_6 = 2\sqrt{3}$，内接する正六角形の周の長さは $Q_6 = 3$ である。10 進 6 桁の有効桁数で計算することにすると，$\sqrt{3} \in [1.73205, 1.73206]$ より $P_6 \in [3.46410, 3.46412]$ となり，$\pi \in [Q_6, \overline{P_6}] = [3, 3.46412]$ を得る。つぎに，$P_{12} = \dfrac{2P_6 Q_6}{P_6 + Q_6} \in [3.21537, 3.21541]$，$Q_{12} = \sqrt{P_{12} Q_6} \in [3.10581, 3.10584]$ より $\pi \in [\underline{Q_{12}}, \overline{P_{12}}] = [3.10581, 3.21541]$ を得る。同様に作業を続けていくと，$\pi \in [\underline{Q_{96}}, \overline{P_{96}}] = [3.14076, 3.14313]$ を得る。よって，π の近似値として，3.14 までは正確であることが区間演算によって「証明」された。

残念ながら，実際には，実数演算を単純に区間演算で置き換えただけでは，意味のある結果を得られないことが多いことがわかっている。例えば，連立 1 次方程式に対する区間ガウスの消去法は，その典型的な例である（3 章を参照）。このような区間演算の振る舞いについて，丸め誤差解析で著名な J・H・ウィルキンソンは以下のように述べている[5)]。

> 区間演算は役に立たないわけではないが，適用可能な状況に至るまでに深刻な制限がある。一般に，代数的な計算に対して区間演算を有効な手段とするためには，その使用をできる限り後回しにすることが最良である。

すなわち，通常の数値計算によって近似解を得た後に，区間演算によってその近似解の精度を保証する，という考え方が重要である。本書では，この思想に

† もちろん，円周率の計算については，もっと効率の良い方式が知られている。ここでは，手計算でも確認できる例として採用している。

基づいた精度保証法を多く紹介する。

丸め誤差の影響

前述のように，浮動小数点演算は有限桁の計算であるため丸め誤差が発生する。実際にどのような影響があるか，いくつかの例を挙げる。

（1） **Rumpの例題**　一般に，数値計算では演算精度が高いほど結果の精度も高くなる傾向がある。そこで，「ある演算精度でなんらかの計算をして，つぎにそれよりも高い演算精度で同じ計算をしたときに，双方の結果が近ければ，ある程度は結果の正しさが確認できる」と考えるかもしれない。この経験則は，確かに有効な場合もあるが，残念ながらつねに正しいわけではない。1980年代に，S. M. Rumpはつぎのような例題を考案した[6)]。

$$f(x,y) = 333.75y^6 + x^2(11x^2y^2 - y^6 - 121y^4 - 2) + 5.5y^8 + \frac{x}{2y}$$

に，$a = 77617$，$b = 33096$ を代入した $f(a,b)$ の値を評価する。これをIBMのメインフレームS/370上で演算精度を変えて実行すると，以下のような結果となった[†1]。

$$\begin{aligned}
&\text{単精度（有効桁数：10進約8桁）：} && f(a,b) \approx 1.172603\cdots \\
&\text{倍精度（有効桁数：10進約17桁）：} && f(a,b) \approx 1.1726039400531\cdots \\
&\text{拡張精度（有効桁数：10進約34桁）：} && f(a,b) \approx 1.172603940053178\cdots
\end{aligned}$$

この結果から，それぞれの精度において，一見，途中の桁までは正しい値が得られているように思われるが，じつは真の値は $f(a,b) = -0.827386\cdots$ であり，符号も合っていない間違った結果となっている[†2]。このように，経験則では対処できない問題もある。

[†1] 現代のIEEE 754に従うコンピュータ上で試す場合は

$$(333.75 - x^2)y^6 + x^2(11x^2y^2 - 121y^4 - 2) + 5.5y^8 + \frac{x}{2y}$$

のように計算手順の修正が必要である[7)]。

[†2] 絶対値の大きな数字同士で打ち消し合いが起こり，最終的に $f(a,b) = \dfrac{a}{2b} - 2 = -\dfrac{54767}{66192}$ となる。

この問題に対して倍精度の区間演算を用いると，$[-5.91, 4.73] \times 10^{21}$ という結果を得る。これは，非常に区間幅が大きいため，あまり意味のある結果ではないが，少なくとも真の値を含んでいる。つまり，「区間演算は間違った答えをけっして出さない」ということが重要である。また，このように区間幅が大きい結果を得たことによって，深刻な丸め誤差が発生していることに気づくことができる。

（2） **2元連立1次方程式**　連立1次方程式 $Ax = b$ の近似解を $\widehat{x}$ とすると，その残差は $r := b - A\widehat{x}$ と定義される。もし A が正則で $r = \mathbf{0}$ であれば，$\widehat{x}$ は真の解であるが，例えば，r の要素の大きさが（相対的に）小さければ，$\widehat{x}$ の精度が良いといえるであろうか。そこで，以下のような例題[8)] を考えてみよう。

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

このとき，A は正則で真の解は

$$x = A^{-1}b = \begin{pmatrix} 205117922 \\ -83739041 \end{pmatrix}$$

である。これに対して，IEEE 754 の倍精度浮動小数点演算を用いてガウスの消去法で解を計算すると

$$\widehat{x} = \begin{pmatrix} 106018308.007133 \\ -43281793.0017831 \end{pmatrix}$$

のように1桁も合っていない結果が得られる[†1]。ところが，この $\widehat{x}$ に対して残差 r を倍精度演算を用いて計算すると，残差の近似は $\widehat{r} = (0, 0)^T$ となり，一見 $\widehat{x}$ は正しい解のように見えてしまう[†2]。すなわち，残差の計算からでは解が正しいかどうかを判定することができないことがわかる。

---

†1　演算の順序によっては計算結果が異なる場合がある。

†2　真の残差は $r = (0.616\cdots, 0.085\cdots)^T$ である。

この問題に対して倍精度の区間演算を用いてガウスの消去法で解を計算すると，$-\infty < x_i < \infty$（$i = 1, 2$）という区間としては無意味な結果が得られる。これは問題の方程式が解きづらいことを示唆している。

以上の例は，人工的に作成したものではあるが，少なくとも実際に起こりうるわけである。IEEE 754–1985 浮動小数点演算規格の制定に尽力した W・M・カハンは，以下のように述べている[9)]。

> 浮動小数点演算によって得られた結果と真値に大きな差が生じることは非常に稀であり，つねに心配するにはあまりにも稀であるが，だからといって無視できるほど稀なわけではない。

これは，じつに言い得て妙である。そして，絶対に間違ってはいけないような計算をする場合，丸め誤差を無視してはいけない。

また，精度保証付き数値計算では，丸め誤差だけでなく打ち切り誤差や離散化誤差も考慮に入れて計算する必要がある。

打ち切り誤差

例えば，$\sin x$ のテイラー展開

$$\sin x = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} + \cdots + (-1)^{n-1}\frac{x^{2n-1}}{(2n-1)!} + R_{2n+1}(x) \tag{1}$$

$$R_{2n+1}(x) = (-1)^{n+1}\frac{\cos \xi x}{(2n+1)!}x^{2n+1} \quad (0 < \xi < 1)$$

を用いて，$\sin\dfrac{\pi}{6}$ の値を計算することを考えよう。式 (1) の右辺を第 5 項までで打ち切り（$n = 5$），剰余項 $R_{11}(x)$ を無視して

$$S(x) := x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \frac{x^7}{7!} + \frac{x^9}{9!}$$

とする。$x = \dfrac{\pi}{6}$ として $S\left(\dfrac{\pi}{6}\right)$ を倍精度浮動小数点演算による区間演算で丸め誤差を考慮しながら計算すると（$\dfrac{\pi}{6}$ も倍精度浮動小数点数では厳密には表現できないため，これを含む区間として x に代入する）

$$S\left(\frac{\pi}{6}\right) \in [0.5000000002027, 0.5000000002029]$$

索　　引

—— 編著者・著者略歴 ——

大石　進一（おおいし　しんいち）
1981年　早稲田大学大学院理工学研究科博士後期課程修了，工学博士
1989年　早稲田大学教授
　　　　現在に至る

柏木　雅英（かしわぎ　まさひで）
1994年　早稲田大学大学院理工学研究科博士後期課程修了，博士（工学）
2009年　早稲田大学教授
　　　　現在に至る

尾崎　克久（おざき　かつひさ）
2007年　早稲田大学大学院理工学研究科博士後期課程修了，博士（工学）
2013年　芝浦工業大学准教授
　　　　現在に至る

高安　亮紀（たかやす　あきとし）
2012年　早稲田大学大学院基幹理工学研究科博士後期課程修了，博士（理学）
2016年　筑波大学助教
　　　　現在に至る

木村　拓馬（きむら　たくま）
2010年　弘前大学大学院理工学研究科博士後期課程修了，博士（理学）
2015年　佐賀大学准教授
　　　　現在に至る

正井　秀俊（まさい　ひでとし）
2014年　東京工業大学大学院情報理工学研究科博士後期課程修了，博士（理学）
2017年　東北大学助教
　　　　現在に至る

Siegfried M. Rump
（ジークフリード ミヒャエル ルンプ）
1980年　Ph.D. (Mathematics)
　　　　カールスルーエ大学
1987年　ハンブルク工科大学教授
　　　　現在に至る
2002年　早稲田大学訪問教授
　　　　現在に至る

荻田　武史（おぎた　たけし）
2003年　早稲田大学大学院理工学研究科博士後期課程修了，博士（情報科学）
2018年　東京女子大学教授
　　　　現在に至る

劉　雪峰（りゅう　しゅうふぉん）
2009年　東京大学大学院数理科学研究科博士後期課程修了，博士（数理科学）
2014年　新潟大学准教授
　　　　現在に至る

山中　脩也（やまなか　なおや）
2011年　早稲田大学大学院基幹理工学研究科博士後期課程修了，博士（工学）
2016年　明星大学准教授
　　　　現在に至る

関根　晃太（せきね　こうた）
2014年　早稲田大学大学院基幹理工学研究科博士後期課程修了，博士（工学）
2017年　東洋大学助教
　　　　現在に至る

市原　一裕（いちはら　かずひろ）
2000年　東京工業大学大学院理工学研究科後期博士課程修了，博士（理学）
2013年　日本大学教授
　　　　現在に至る

森倉　悠介（もりくら　ゆうすけ）
2014年　早稲田大学大学院基幹理工学研究科博士後期課程修了，博士（工学）
2017年　帝京平成大学助教
　　　　現在に至る

精度保証付き数値計算の基礎
Principle of Verified Numerical Computations

2018 年 7 月 26 日　初版第 1 刷発行 ★

検印省略

編 著 者　大　石　進　一
発 行 者　株式会社　コ ロ ナ 社
　　　　　代 表 者　牛 来 真 也
印 刷 所　三 美 印 刷 株 式 会 社
製 本 所　牧 製 本 印 刷 株 式 会 社

112–0011　東京都文京区千石 4–46–10
発 行 所　株式会社　コ ロ ナ 社
CORONA PUBLISHING CO., LTD.
Tokyo Japan
振替 00140–8–14844・電話(03)3941–3131(代)
ホームページ　http://www.coronasha.co.jp

ISBN 978–4–339–02887–4　C3041　Printed in Japan　（新宅）G