

# 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

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

【共著】

Ph.D. (Mathematics) Siegfried M. Rump

コロンナ社

# 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行う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

- $C$  : 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
- $u$  : 単位相対丸め (IEEE 754 binary64 では,  $u = 2^{-53}$ )
- $F_{\max}$  : 浮動小数点数の最大値 (binary64 では,  $F_{\max} = 2^{1024}(1 - 2^{-53})$ )
- $F_{\min}$  : 正規化浮動小数点数の正の最小値 (binary64 では,  $F_{\min} = 2^{-1022}$ )
- $S_{\min}$  : 浮動小数点数の正の最小値 (binary64 では,  $S_{\min} = 2^{-1074}$ )

# 目 次

## 序 論

### 1. 浮動小数点演算と区間演算

1.1 浮動小数点演算 .....	11
1.1.1 浮動小数点数 .....	12
1.1.2 浮動小数点演算 .....	16
1.2 区 間 演 算 .....	19
1.2.1 区 間 .....	19
1.2.2 区 間 演 算 .....	22
1.2.3 機 械 区 間 演 算 .....	27
1.2.4 無 限 区 間 に お け る 例 外 処 理 .....	31
章 末 問 題 .....	31

### 2. 丸め誤差解析と高精度計算

2.1 丸め誤差解析 .....	33
2.1.1 総和に対する誤差解析 .....	33
2.1.2 内積に対する誤差解析 .....	37
2.1.3 後退誤差解析 .....	39
2.2 エラーフリー変換 .....	41
2.2.1 和と差に関するエラーフリー変換 .....	41

2.2.2	浮動小数点数の積	43
2.3	ベクトルの総和や内積の高精度計算	45
2.3.1	高精度演算を実現するアルゴリズム	45
2.3.2	計算結果が高精度になるアルゴリズム	50
	章末問題	54

### 3. 数値線形代数における精度保証

3.1	準備	56
3.1.1	ベクトルノルムと行列ノルム	56
3.1.2	特別な行列	58
3.2	区間行列積	59
3.2.1	高速な区間行列積	60
3.2.2	区間行列積のさらなる高速化	61
3.3	連立1次方程式	63
3.3.1	ガウスの消去法とLU分解	64
3.3.2	コレスキー分解	66
3.3.3	反復改良法	67
3.3.4	区間ガウスの消去法	67
3.3.5	密行列に対する精度保証法	69
3.3.6	疎行列に対する精度保証法	73
3.3.7	区間連立1次方程式	76
3.4	行列固有値問題	78
3.4.1	密行列に対する精度保証法	82
3.4.2	非線形方程式を利用した精度保証法	85
3.4.3	大規模疎行列の場合	87
	章末問題	88

## 4. 数学関数の精度保証

4.1 指数関数	92
4.1.1 指数関数	92
4.1.2 $\expm1$	93
4.2 対数関数	93
4.2.1 対数関数	93
4.2.2 $\log1p$	94
4.3 三角関数	95
4.3.1 $\sin, \cos$	95
4.3.2 $\tan$	97
4.4 逆三角関数	97
4.4.1 $\arctan$	97
4.4.2 $\arcsin$	98
4.4.3 $\arccos$	99
4.4.4 $\operatorname{atan2}$	100
4.5 双曲線関数	101
4.5.1 $\sinh$	101
4.5.2 $\cosh$	103
4.5.3 $\tanh$	103
4.6 逆双曲線関数	104
4.6.1 $\sinh^{-1}$	104
4.6.2 $\cosh^{-1}$	105
4.6.3 $\tanh^{-1}$	105
章末問題	106



## 5. 数値積分の精度保証

5.1 準備	108
5.1.1 積分とは	108
5.1.2 ラグランジュ補間多項式	109
5.1.3 コーシーの積分公式と高階微分	110
5.2 近似積分公式と誤差	111
5.2.1 台形則と中点則	113
5.2.2 ニュートン-コーツの公式	114
5.2.3 Steffensen 公式 (開いたニュートン-コーツの公式)	117
5.2.4 ガウス-ルジャンドル公式	119
5.2.5 Lobatto 積分と Radau 積分	120
5.2.6 複合則	121
5.2.7 Romberg 積分法	123
5.2.8 二重指数関数型数値積分公式	125
5.3 精度保証付き数値積分法の例	128
5.3.1 高階微分を用いた精度保証付き数値積分法	128
5.3.2 複素領域上の値を用いた精度保証付き数値積分法	130
5.3.3 被積分関数の関数値計算における丸め誤差の高速計算	131
章末問題	134

## 6. 非線形方程式の精度保証付き数値解法

6.1 ニュートン-カントロヴィッチの定理	136
6.1.1 ニュートン法	136
6.1.2 半局所的収束定理	137

6.1.3	検 証 例	141
6.1.4	ニュートン-カントロヴィッチの定理の応用について	145
6.2	Krawczyk による解の検証法	145
6.2.1	平均値形式と Krawczyk 写像	145
6.2.2	Krawczyk 写像による解の検証定理	147
6.2.3	非線形方程式の全解探索アルゴリズム	149
6.3	Krawczyk の方法による検証例	152
6.3.1	自動微分を使ったヤコビ行列の計算	153
6.3.2	検 証 例	156
6.4	区間ニュートン法	159
	章 末 問 題	162

## 7. 常微分方程式の精度保証付き数値解法

7.1	ベキ級数演算	165
7.1.1	Type-I PSA	166
7.1.2	Type-I PSA の例	167
7.1.3	Type-II PSA	169
7.1.4	Type-II PSA の例	171
7.2	ピカール型の不動点形式への変換	175
7.3	解のテイラー展開の生成	176
7.4	解の精度保証	177
7.5	Lohner 法	179
7.6	初期値問題の精度保証の例	180
7.6.1	PSA 法	180
7.6.2	Lohner 法	182
7.7	長い区間における初期値問題の精度保証	183

7.7.1	推進写像の微分	183
7.7.2	推進写像の書き直し	186
7.7.3	解の接続	187
7.8	縮小写像原理による解の一意性	189
7.9	射撃法による境界値問題の精度保証	191
7.10	ベキ級数演算の無駄の削減	192
	章末問題	194

## 8. 偏微分方程式の精度保証付き数値解法

8.1	偏微分方程式のモデル問題	197
8.1.1	ポアソン方程式の境界値問題	197
8.1.2	ラプラス作用素の固有値問題	199
8.1.3	非線形偏微分方程式の境界値問題	201
8.2	関数空間の設定と記号	201
8.3	補間関数の誤差定数	204
8.4	ポアソン方程式の境界値問題と有限要素法	209
8.4.1	有限要素法	209
8.4.2	正則な解の場合	210
8.4.3	解に特異性のある場合	212
8.4.4	計算例	216
8.5	微分作用素の固有値評価	217
8.5.1	固有値の下界評価	220
8.5.2	ラプラス作用素の固有値問題	222
8.5.3	固有値評価の計算例	225
8.6	半線形楕円型偏微分方程式問題の解の存在検証	228
8.6.1	対象とする問題と準備	228

8.6.2	フレームワーク	230
8.6.3	ソボレフの埋め込み定理と線形化作用素の局所連続性	233
8.6.4	線形化作用素 $\mathcal{F}'[u]$ の正則性とその逆作用素のノルム評価	236
8.6.5	残差ノルムの評価方法	240
8.6.6	解の検証例	241
章末問題		243

## 9. 精度保証付き数値計算の応用

9.1	線形計画法の精度保証	247
9.1.1	線形計画問題の基礎	247
9.1.2	単体法における解の条件と精度保証付き数値計算法	252
9.1.3	最適値（最適目的関数値）の精度保証付き数値計算法	255
9.1.4	内点法を基礎とした解の精度保証付き数値計算法	257
9.2	計算幾何の精度保証	262
9.2.1	位置関係の判定問題	263
9.2.2	浮動小数点フィルタ	264
9.2.3	ロバスト計算	266
9.2.4	精度保証を用いた反復アルゴリズム	267
9.3	3次元多様体の双曲性判定	271
9.3.1	背景	271
9.3.2	Gluing equation ～解が双曲性を証明する～	273
9.3.3	HIKMOT ～Gluing equation を精度保証付き計算で解く～	274
9.3.4	応用	276
9.4	HPC 環境における精度保証	278
9.4.1	GPU における区間演算	278
9.4.2	最近点丸めのみを用いた計算例	280

9.4.3	高精度な行列積計算法	282
9.4.4	GPU を用いた数値計算例	286
9.4.5	分散メモリマシンを用いた数値計算例	288
9.5	INTLAB の紹介	290
9.5.1	区間の入力	290
9.5.2	区間の出力	291
9.5.3	区間演算	292
9.5.4	区間ベクトル・区間行列	295
9.5.5	残差の高精度計算	296
9.5.6	固有値問題	298
9.5.7	MATLAB による固有値の不正確な近似	299
9.5.8	自動微分：勾配とヘッセ行列	301
9.5.9	局所的最適化	303
9.5.10	関数のすべての根	303
9.5.11	大域的最適化	304
9.5.12	その他のデモ	305
章末問題		305
索引		309

# 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<sup>1)†</sup> (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<sup>2),3)</sup> (約 400 年間の未解決問題)
- Double Bubble 予想の肯定的解決<sup>4)</sup> (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  $\pi$  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  $P_{2N} = \frac{2P_N Q_N}{P_N + Q_N}$ 、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  $\pi$  の範囲を特定することを考えてみよう<sup>†</sup>。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なると、 $\sqrt{3} \in [1.73205, 1.73206]$  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、 $P_{12} = \frac{2P_6 Q_6}{P_6 + Q_6} \in [3.21537, 3.21541]$ 、 $Q_{12} = \sqrt{P_{12} Q_6} \in [3.10581, 3.10584]$  より  $\pi \in [Q_{12}, \overline{P_{12}}] = [3.10581, 3.21541]$  を得る。同様に作業を続けていくと、 $\pi \in [Q_{96}, \overline{P_{96}}] = [3.14076, 3.14313]$  を得る。よって、 $\pi$  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<sup>5)</sup>。

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

<sup>†</sup> 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<sup>6)</sup>。

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

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<sup>†1</sup>。

単精度 (有効桁数: 10 進約 8 桁) :  $f(a, b) \approx 1.172603 \dots$

倍精度 (有効桁数: 10 進約 17 桁) :  $f(a, b) \approx 1.1726039400531 \dots$

拡張精度 (有効桁数: 10 進約 34 桁) :  $f(a, b) \approx 1.172603940053178 \dots$

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  $f(a, b) = -0.827386 \dots$  であり、符号も合っていない間違った結果となっている<sup>†2</sup>。このように、経験則では対処できない問題もある。

<sup>†1</sup> 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<sup>7)</sup>。

<sup>†2</sup> 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  $f(a, b) = \frac{a}{2b} - 2 = -\frac{54767}{66192}$  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ので、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  $\hat{x}$  とすると、その残差は  $r := b - A\hat{x}$  と定義される。もし  $A$  が正則で  $r = \mathbf{0}$  であれば、 $\hat{x}$  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、 $\hat{x}$  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<sup>8)</sup>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

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

のように1桁も合っていない結果が得られる<sup>†1</sup>。ところが、この  $\hat{x}$  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  $\hat{r} = (0, 0)^T$  となり、一見  $\hat{x}$  は正しい解のように見えてしまう<sup>†2</sup>。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。

<sup>†1</sup> 演算の順序によっては計算結果が異なる場合がある。

<sup>†2</sup> 真の残差は  $r = (0.616 \dots, 0.085 \dots)^T$  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<sup>9)</sup>。

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

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

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

を用いて、 $\sin \frac{\pi}{6}$  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。 $x = \frac{\pi}{6}$  として  $S\left(\frac{\pi}{6}\right)$  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 ( $\frac{\pi}{6}$  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)

$$S\left(\frac{\pi}{6}\right) \in [0.50000000002027, 0.50000000002029]$$

# 索引

## 【あ】

アフィン演算 187  
アンダーフロー 16

## 【い】

一般化固有値問題 78

## 【う】

打ち切り誤差 5

## 【え】

エラーフリー変換 41  
円板演算 26

## 【お】

オーバーフロー 14

## 【か】

ガウスの消去法 64  
ガウスルジャンドル公式 119  
仮数部 12  
下端・上端型表現 20  
簡易ニュートン写像 145

## 【き】

機械区間演算 27, 152  
幾何化予想 272  
基底解 252  
基底変数 252  
基本解行列 183  
逆三角関数 97  
逆双曲線関数 104  
狭義優対角行列 58

行列の絶対値 56  
行列ノルム 56  
局所的最適化 303

## 【く】

区間 19  
区間演算 1, 19, 22, 292  
区間ガウスの消去法 67  
区間拡張 24, 145, 151  
区間行列 21, 295  
区間ニュートン法 159, 302  
区間ベクトル 21, 295  
区間包囲 151  
矩形複素区間 22  
区分定数関数空間 213

## 【け】

計算機イプシロン 13  
計算機援用証明 1  
計算幾何 262  
ゲルシュゴリンの包含定理 80  
幻影解 7  
減次 170

## 【こ】

後退誤差 39  
後退誤差解析 39  
交代結び目 277  
勾配 301  
候補区間 152  
誤差定数 205  
コーシーの積分公式 110  
固有値の重複度 79  
固有値問題 298

固有対 78  
コレスキー分解 66  
根 303

## 【さ】

最適解 248  
最適化問題 247  
最適目的関数値 248  
三角関数 95  
三角形要素 205

## 【し】

指数関数 92  
事前誤差評価 212  
実行可能解 248  
実行可能基底解 252  
自動微分 153, 301  
射影作用素 209  
弱形式 198  
弱双対性 256  
射撃法 191  
縮小写像原理 189  
主双対内点法 257  
主問題 256  
条件数 57  
シルベスターの慣性則 87

## 【す】

推進写像 183  
数値計算 1  
数値積分 108  
スケリング最大ノルム 148  
スーパーコンピュータ 278  
スペクトル分解定理 236

		デーモン手術	276	複素円板領域	22
<b>【せ】</b>		<b>【と】</b>		不等式制約条件	248
正規化数	11	等式制約条件	248	不等式標準形	248
正定値行列	59	等式標準形	248	浮動小数点演算	16
精度	12	凸包	151, 262	浮動小数点数	12
精度保証付き数値計算	1	トポロジー	271	浮動小数点フィルタ	264
精度保証付き数値計算		<b>【な】</b>		フレシェ微分	138
ライブラリ	151	内積	37	分枝限定法	150
成分毎評価	63	内点法	251	<b>【へ】</b>	
絶対値	20	中尾の方法	232	平均値形式	146
摂動定理	81	<b>【に】</b>		ベキ級数演算	165
セミノルム	202	二重指数関数型数値積分公式		ベクトルノルム	56
全解探索アルゴリズム	149		125	ヘッセ行列	301
線形計画法	247	ニュートン法	136	<b>【ほ】</b>	
前進誤差	39	ニュートン-カントロヴィッチ		ポアソン方程式	197
		の定理	139, 231	ポアンカレ予想	271
<b>【そ】</b>		ニュートン-コーツの公式	114	補間関数	206
双曲幾何構造	272	<b>【の】</b>		補間誤差定数の公式	207
双曲線関数	101	ノルム	202	補間作用素	206
双曲多様体	272	ノルム評価	63	<b>【ま】</b>	
双対性	256	<b>【は】</b>		丸め誤差	3
双対問題	256	倍精度	11	丸め誤差解析	33
総和	33	バナッハ空間	138	丸めモード	27
ソボレフ関数空間	197	判定問題	263	<b>【む】</b>	
ソボレフの埋め込み定理	234	反復改良法	67	無限区間	20
		反復の停止条件	137	結び目	276
<b>【た】</b>		<b>【ひ】</b>		<b>【も】</b>	
大域的最適化	304	比較行列	58	目的関数	248
台形則	113	ピカル型の不動点形式	176	<b>【や】</b>	
対数関数	93	非基底変数	252	ヤコビ行列	137
単精度	11	非正規化数	11	<b>【ゆ】</b>	
単体法	251	微積分学の基本定理	159	有限要素解	209
単調行列	58	標準固有値問題	78	有限要素空間	203
<b>【ち】</b>		ヒルベルト空間	202	有限要素法	209
逐次添加法	267	<b>【ふ】</b>			
忠実丸め	54	複合則	121		
中心・半径型表現	20				
中点則	113				
直交射影	209				
<b>【て】</b>					
適合有限要素空間	204				

<p style="text-align: center;"><b>【ら】</b></p> <p>ラグランジュ補間 205                  ラグランジュ補間多項式 109                  ラプラス作用素 197</p>	<p style="text-align: center;"><b>【り】</b></p> <p>離散化誤差 6                  リッツ-ガレルキン法 209</p>	<p style="text-align: center;"><b>【れ】</b></p> <p>例外的デーモン手術 277                  レイリー商 219                  レイリー-リッツの方法 200</p>
---	--	--

---

<p style="text-align: center;"><b>【A】</b></p> <p>Aubin-Nitsche の技巧 211</p> <p style="text-align: center;"><b>【B】</b></p> <p>binary32 11                  binary64 11</p> <p style="text-align: center;"><b>【C】</b></p> <p>Crouzeix-Raviart 要素法 223                  CUDA 278</p> <p style="text-align: center;"><b>【D】</b></p> <p>DKA 法 162                  Dot2 49</p> <p style="text-align: center;"><b>【E】</b></p> <p>Emden 方程式 7</p> <p style="text-align: center;"><b>【G】</b></p> <p>GPU 278</p> <p style="text-align: center;"><b>【H】</b></p> <p>H 行列 58                  HIKMOT 274                  HPC 278                  hull 21</p>	<p>Hypercircle 法 212  <math>H^2</math> 正則性 198</p> <p style="text-align: center;"><b>【I】</b></p> <p>IEEE 754 規格 11                  Inf 11                  INTLAB 290</p> <p style="text-align: center;"><b>【K】</b></p> <p>Krawczyk 145                  Krawczyk 写像 146</p> <p style="text-align: center;"><b>【L】</b></p> <p>Lobatto 積分 120                  Lohner 法 179                  LU 分解 64</p> <p style="text-align: center;"><b>【M】</b></p> <p>M 行列 58                  mag 20                  max-min 原理 219                  mid 21                  min-max 原理 200, 219</p> <p style="text-align: center;"><b>【N】</b></p> <p>NaN 11</p>	<p style="text-align: center;"><b>【P】</b></p> <p>Plum の方法 232                  PSA 165</p> <p style="text-align: center;"><b>【R】</b></p> <p>rad 21                  Radau 積分 120                  Raviart-Thomas 混合有限要素空間 213                  Raviart-Thomas 有限要素法 240                  Romberg 積分法 123</p> <p style="text-align: center;"><b>【S】</b></p> <p>Smith の定理 162                  Steffensen 公式 117</p> <p style="text-align: center;"><b>【U】</b></p> <p>ulp 12                  ulp 13</p> <p style="text-align: center;"><b>【W】</b></p> <p>wrapping effect 187</p> <p style="text-align: center;">~~~~~</p> <p style="text-align: center;"><b>【数字】</b></p> <p>3次元多様体 271</p>
---	---	---

—— 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

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 しゅうふおん)

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 (いちばら かずひろ)

2000年 東京工業大学大学院理工学研究科後  
期課程修了, 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

**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

## 精度保証付き数値計算の基礎

Principle of Verified Numerical Computations

© Shin'ichi Oishi et al. 2018

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



<出版者著作権管理機構 委託出版物>

本書の無断複製は著作権法上での例外を除き禁じられています。複製される場合は、そのつと事前に、出版者著作権管理機構（電話 03-3513-6969, FAX 03-3513-6979, e-mail: info@jcopy.or.jp）の許諾を得てください。

本書のコピー、スキャン、デジタル化等の無断複製・転載は著作権法上での例外を除き禁じられています。購入者以外の第三者による本書の電子データ化及び電子書籍化は、いかなる場合も認めていません。落丁・乱丁はお取替えいたします。