

# 博士論文概要

## 論文題目

高信頼・高精度・高可搬な数値計算法の研究  
Studies on numerical algorithms  
retaining high reliability, high accuracy  
and high portability

申請者

山中	脩也
YAMANAKA	Naoya

数学応用数理専攻 数値解析研究

2010 年 12 月

本論文は高信頼・高精度・高可搬な数値計算法に関する研究成果をまとめたものである。本論文において高信頼な数値計算法とは、数値計算結果に対して数学的に厳密な誤差上限が与えられる計算手法を指す。また、本論文における高精度な数値計算法とは、環境によらず精度のよい結果を返す手法を指す。本論文における高可搬な手法とは様々な環境で所望の値を得る手法を指す。本論文ではこれらの三つの特徴を持つ数値計算法について述べ、特にそれらの特徴を持つ区間演算法について詳細に述べる。またこれらに関連する内容として、高精度な内積計算手法の並列化手法と、高信頼かつ高速な数値積分法についても言及する。

本論文は、現在の電子計算機による数値計算の主流である、IEEE 754 標準規格の浮動小数点数を基礎としている。IEEE 754 標準規格は浮動小数点規格の一つであり、「電子計算機の中における数の表現」や「四則演算と平方根の演算結果精度」、「丸め」、「例外」などを定めている。数値計算では実数を直接扱えない代わりに浮動小数点数を扱っているため、多くの計算において誤差が伴い、電子計算機の誕生当初から問題点として認識されてきた。その結果、計算法の安定性等について多くの知見が得られ、多くの優れた計算法は誤差の影響がなるべく小さくなるように設計されている。しかし実際の計算において丸め誤差の影響を完全に把握することは難しく、既存の計算法の大半は、計算結果の精度について確実な保証を与えることはできない。

これらの現状を踏まえて、本論文の前半では、著者が提案した丸めの変更を用いない区間演算法について述べられている。浮動小数点数を利用した計算機の中では全ての実数を表すことはできないため、入力された値や計算結果は丸められることになる。そのため計算機の中で数学的な計算結果を正しく保持するために、区間の概念が自然に導入される。区間は数の集合を表し、その区間内の全ての数を表す。数学的な計算結果より大きい(または小さい)浮動小数点数の中で最も計算結果に近い値を得るのに、広く丸めの変更を用いた方法が利用されてきた。丸めとは IEEE 754 標準規格において規定されている浮動小数点数の演算の際のパラメータの一つで、数学的な計算結果に対して、どのような浮動小数点数を返すかということを定めている。IEEE 754 標準規格においては、最近点への丸め、上向き丸め、下向き丸め、ゼロへの丸めの4つの丸めが定義されており、浮動小数点数を用いた区間の四則演算においては、上向き丸めと下向き丸めを利用してそれぞれ計算を行えば、数学的な結果を含む最も区間幅の小さな区間を得ることが知られていた。一方で、丸めの変更はそれなりに実行時間がかかるだけでなく、利用しているプラットフォームやコンパイラによって利用命令が大きく異なり、計算環境によっては丸めの指定が無い物も多く存在する。これらの問題点に対し著者は、最近点への丸めのための計算を利用した区間演算法を提案した。提案手法は無誤差変換を用いて、計算誤差の部分まで計算し、計算誤差の値の正負を判定することで、数学的な結果がどの区間に含まれているのかを判定するものである。

提案手法を利用することにより,最近点への丸めのみを使う区間演算方式なので,従来のように丸めの方式を変更する必要がなく,かつ,最近点への丸めに基づく既存の高精度計算ルーチンを直接利用できることから,高精度な区間演算を構築することが容易となった.

本論文の後半では,区間演算に関連する二つの事柄について述べられている.ひとつは高精度な内積計算手法の並列化についてであり,もうひとつは高信頼かつ高速な数値積分法についてである.

著者は,荻田・Rump・大石が提案した高精度内積計算手法に対し,分散メモリ型クラスタ上においても,一台の計算機で計算した結果と同じ,または,より高精度な結果を得るような並列化手法を提案した.荻田・Rump・大石による高精度内積計算手法は,無誤差変換と呼ばれる和と積に関する誤差の無い変換を用いた高精度な内積計算手法で,倍精度浮動小数点数しか利用していないにも関わらず,それより長い仮数部を持つ浮動小数点数を利用し計算を行なったかのような結果を返すという特徴を持つ.一方でこの計算手法は,誤差無しで計算を行なうという性質上,データ依存性が非常に強く,分散メモリ型クラスタなどの並列計算機における並列計算は難しいと考えられていた.この問題点に対し著者は,各ノードでの内積計算結果を複数の倍精度浮動小数点数の形で保持する高精度形式を利用することで,データの情報を出来る限り失うことなく,また,各ノード間の通信情報量を大幅に増やすことなく,一台の計算機で計算した結果と同じ,または,より高精度な結果を得ることに成功した.また著者は,提案手法の数学的解析を行ない誤差上限を示し,数値実験においてもその特徴を示した.

次に,著者は高橋・森が提案した二重指数関数型積分公式を利用した,一変数関数に対する高速な精度保証付き自動積分法を提案した.一般に,数値積分の実行時間の多くは,必要とする分点数の関数値計算時間が占める.しかしユーザが指定した要求精度を満たすような分点数を事前に把握することは容易ではないため,多くの数値積分法では得られた結果を見て,要求精度を満たしているか否かの判定を繰り返している.その結果実際に必要な分点数より多くの関数値計算を行なっていることが多く,結果的に実行時間にも直接的な影響を与えていた.この問題点に対し,著者の提案手法は,一変数関数の数値積分を行なう過程で発生する全ての誤差を事前に把握するよう試み,ユーザが指定した要求精度を満たすような分点数を事前に把握することで,二重指数関数型積分公式の数値計算で,従来の計算法に比べて,精度保証付き計算で,かつ,同程度かより高速な計算手法を作成した.

第1章では,本研究が行われた背景として高信頼・高精度・高可搬な数値計算法に関する事柄が記述され,本論文の目的,概要,成果,構成が述べられている.

第2章では,高信頼・高精度・高可搬な区間演算法について説明される.まず,倍精度浮動小数点を複数使って表される多重倍精度形式が導入される.本論文で

提案する区間演算法は要素として、IEEE 754 標準規格で定められている浮動小数点数を一般化した多重倍精度形式を用いる。これにより倍精度形式を利用した区間演算より高精度な区間演算を実装することができる。ここでは多重倍精度形式についてその用語とともに表現形式、四則演算などが定義される。また、定義に従う電子計算機上での実装手法についても議論される。次に多重倍精度形式を元として区間演算手法が提案される。ここで、表現形式、四則演算などが定義される。特に表現形式では、下限上限型と中心半径型の二つの方法が広く知られているが、本論文で提案する区間演算手法におけるそれぞれの特徴についても述べられる。また、提案される区間演算の特徴である最近点への丸めを用いた電子計算機上での実装方法についても説明される。

第3章では、高精度内積計算手法の並列化について議論される。本章は大きく二つに分けられ、一つ目にベクトルの要素の総和に対する高精度な計算法の並列化について述べられ、続いて高精度な内積計算法の並列化について述べられる。それぞれの項目において、まず荻田・Rump・大石によって提案された高精度な計算手法について述べられる。それらの計算手法は倍精度形式のみを用いた計算手法にもかかわらず、あたかも内部で多倍長計算を行なったかのような結果を返すという特徴を持つ。続いて、それらの計算法に対応する並列化手法について詳細な計算手法が述べられる。さらに数学的解析に基づき、並列化手法を用いることで並列化しない手法と精度的に同等、またはより高精度な結果が得られることが示される。また数値実験において、その特徴が表れていることや、提案された並列化手法の並列化効率について述べられる。

第4章では、高信頼かつ高速な結果を返す数値積分法について述べられる。具体的には、高橋・森が提案した二重指数関数型積分公式を利用し、一変数関数に対する高速な精度保証付き自動積分法について述べられている。この自動積分法を構築するに当たって主に二つの事柄が述べられる。一つ目は二重指数関数型積分公式の適切な分点数と区間幅を計算する定理であり、二つ目は関数値計算の際の丸め誤差の事前誤差計算法である。本章でははじめに、二重指数関数型積分公式についての基礎的な事実が述べられている。続いて、岡山・松尾・杉原による誤差解析が説明される。次に、この誤差解析を改良し、二重指数関数型積分公式のより適切な分点数と区間幅を計算する、山中・岡山・荻田・大石による定理が示され、その有効性についても説明される。また、高速化を達成するための手法として、二重指数関数型積分公式に対する丸め誤差の事前誤差計算法の詳細と有効性が述べられる。最後にこれらを組み合わせた自動積分法が詳細に述べられ、従来の計算法に比べて、精度保証付き計算で、かつ、同程度かより高速に計算が行なえることが数値実験によって示される。

第5章では、本論文の結論として、まとめと今後の展望が述べられている。

## 早稲田大学 博士（工学） 学位申請 研究業績書

氏名 山中 脩也 印

(2010年12月 現在)

種 類 別	題名、 発表・発行掲載誌名、 発表・発行年月、 連名者（申請者含む）
論文 (査読有)	<p>[1] <u>Naoya Yamanaka</u>, Tomoaki Okayama, Shin'ichi Oishi, Takeshi Ogita  <i>"A fast verified automatic integration algorithm using double exponential formula"</i>,  NOLTA, IEICE, <b>1:1</b> (2010) 119-132.</p> <p>[2] <u>Naoya Yamanaka</u>, Takeshi Ogita, Siegfried M. Rump, Shin'ichi Oishi:  <i>"A Parallel Algorithm for Accurate Dot Product"</i>, Parallel Computing, <b>34</b> (2008) 392-410.</p>
国際会議 論文 (査読有)	<p>[1] <u>Naoya Yamanaka</u>, Shin'ichi Oishi, Takeshi Ogita:  <i>"A Verified Automatic Repeated Integration Algorithm based on Double Exponential Formula"</i>, Proceedings of NOLTA2009, Hokkaido, 2009, 210-213.</p> <p>[2] <u>Naoya Yamanaka</u>, Tomoaki Okayama, Shin'ichi Oishi, Takeshi Ogita:  <i>"A fast automatic integration algorithm using double exponential formula based on verification theory"</i>, Proceedings of ITC-CSCC, Korea, 2009, 161-164.</p> <p>[3] <u>Naoya Yamanaka</u>, Takeshi Ogita, Masahide Kashiwagi, Shin'ichi Oishi:  <i>"Fast Verified Automatic Integration Algorithm Using Complex Analysis"</i>,  Proceedings of NOLTA2008, Hungary, 2008, 512-515.</p>
国際会議 講演	<p>[1] <u>Naoya Yamanaka</u>, Shin'ichi Oishi, Takeshi Ogita  <i>"A Verified Automatic Contour Integration Algorithm"</i>  The 4th International Workshop on Reliable Engineering Computing (REC2010)  -2010年3月3日 Singapore</p> <p>[2] <u>Naoya Yamanaka</u>, Tomoaki Okayama, Shin'ichi Oishi, Takeshi Ogita  <i>"A fast automatic integration algorithm using double exponential formula"</i>  The 2nd International Conference on Mathematical Modelling and Computation and The  5th East Asia SIAM Conference, 2009年6月8日 University Brunei Darussalam, Brunei.</p> <p>[3] <u>Naoya Yamanaka</u>, Takeshi Ogita, Masahide Kashiwagi, Nobito Yamamoto, Shin'ichi Oishi  <i>"Fast Verified Automatic Integration over Finite Interval"</i> The NIMS 2008 Conference &amp;  The 4th East Asia SIAM Conference, 2008年10月10日 Hotel Riviera, Daejeon, Korea</p> <p>[4] <u>Naoya Yamanaka</u>, Takeshi Ogita, Masahide Kashiwagi, Nobito Yamamoto, and  Shin'ichi Oishi,  <i>"Fast Verified Automatic Integration using Double Exponential Formula"</i>  The 13th GAMM - IMACS International Symposium on Scientific Computing, Computer  Arithmetic and Verified Numerical Computations (SCAN2008)  2008年9月29日 The University of Texas at El Paso (UTEP), Texas, USA</p>

## 早稲田大学 博士（工学） 学位申請 研究業績書

種 類 別	題名、 発表・発行掲載誌名、 発表・発行年月、 連名者（申請者含む）
国内会議 講演	<p>[1] <u>山中脩也</u>, 大石進一 "境界要素法を用いた線形二点境界値問題の精度保証付き数値計算法" 日本応用数理学会 2010 年 研究部会 連合発表会, 2010 年 3 月 8 日 筑波大学</p> <p>[2] <u>山中脩也</u>・岡山友昭・大石進一・荻田武史 "精度保証理論を用いた DE 公式の高速数値積分計算" 第 38 回数値解析シンポジウム, 2009 年 6 月 15 日 熱川ハイツ</p> <p>[3] <u>山中脩也</u>・大石進一・荻田武史 "DE 公式を用いた精度保証付き多次元自動積分法" 日本応用数理学会 春の研究部会連合発表会, 2009 年 3 月 7 日 京都大学理学部</p> <p>[4] <u>山中脩也</u>・荻田武史・柏木雅英・山本野人・大石進一 "有限区間における高速精度保証付き自動積分法" 日本応用数理学会 2008 年度年会, 2008 年 9 月 17 日 東京大学柏キャンパス</p> <p>[5] <u>山中脩也</u>・荻田武史・柏木雅英・大石進一 "複素解析を用いた高速精度保証付き自動積分法" 第 27 回 日本シミュレーション学会大会, 2008 年 6 月 19 日 立命館大学</p> <p>[6] <u>山中脩也</u>・荻田武史・柏木雅英・山本野人・大石進一 "DE 公式を用いた高速精度保証付き自動積分法" 第 37 回数値解析シンポジウム, 2008 年 6 月 12 日 たざわこ芸術村</p> <p>[7] <u>山中脩也</u>・荻田武史・大石進一 "誤差項に多重階微分を含む数値積分則の複素解析を用いた精度保証付き自動積分法", 日本応用数理学会 2007 年度連合発表会, 2008 年 3 月 8 日 首都大学東京</p> <p>[8] <u>山中脩也</u>・荻田武史・大石進一・山本哲朗 "ロンバーク積分を利用した精度保証付き自動積分法" 第 36 回数値解析シンポジウム, 2007 年 6 月 19 日 ウェルシティ湯河原</p> <p>[9] <u>山中脩也</u>・荻田武史・大石進一・山本哲朗 "台形則と中点則を利用した数値積分の精度保証法" 日本応用数理学会 2006 年度連合発表会, 2007 年 3 月 3 日 名古屋大学</p> <p>[10] <u>山中脩也</u>・荻田武史・大石進一 "高精度内積演算の並列化について" 日本応用数理学会 2006 年度年会, 2006 年 9 月 16 日 筑波大学</p>
その他（ 講究録）	<p>[1] <u>Naoya Yamanaka</u>, Tomoaki Okayama, Shin'ichi Oishi, Takeshi Ogita: "A Fast Verified Automatic Integration Algorithm using Double Exponential Formula", 数理解析研究所講究録 「数値解析における理論・手法・応用」, No.1638, 146-158, 2009.</p>

## 早稲田大学 博士（工学） 学位申請 研究業績書

種 類 別	題名、 発表・発行掲載誌名、 発表・発行年月、 連名者（申請者含む）
その他（ポスター講演）	<p>[1] <u>Naoya Yamanaka</u>, Takeshi Ogita, Siegfried M. Rump, Shin'ichi Oishi: "<i>A Parallel Algorithm for Accurate Dot Product</i>" SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing (PP10) 2010 年 2 月 24 日 Grand Hyatt Seattle, Seattle, Washington</p>
その他（セミナー講演等）	<p>[1] <u>Naoya Yamanaka</u>, Shin'ichi Oishi "<i>Verification Method for Two-Point Boundary Value Problem using Boundary Element Method</i>", International Workshop on Numerical Verification and its Applications 2010 (INVA2010), 2010 年 3 月 10 日 ホテルリードアズーロ</p> <p>[2] <u>山中脩也</u>, 大石進一, 荻田武史 "高速な精度保証付き自動積分における丸め誤差の事前誤差評価アルゴリズムに関する考察", 応用数学に関する愛媛ワークショップ「数値計算の数理と精度保証」 2010 年 2 月 21 日 愛媛大学</p> <p>[3] <u>山中脩也</u>, 大石進一, 荻田武史 "数値積分の精度保証 高速な精度保証付き自動積分アルゴリズムの提案" 応用数理セミナー, 2009 年 12 月 7 日 国立情報学研究所</p> <p>[4] <u>山中脩也</u>, 大石進一, 荻田武史 "ロンバーグ積分法を利用した精度保証付き自動積分法" 加速法ワークショップ, 2009 年 11 月 27 日 東京女子大学</p> <p>[5] <u>Naoya Yamanaka</u>, Shin'ichi Oishi, Takeshi Ogita "<i>A Verified Automatic Contour Integration Algorithm</i>", Computer-assisted proofs - tools, methods and applications, 2009 年 11 月 15 日 Schloss Dagstuhl</p> <p>[6] <u>Naoya Yamanaka</u>, Shin'ichi Oishi, Takeshi Ogita "<i>A Verified Automatic Multiple Integration Algorithm using Double Exponential Formula for Low-Dimensional Problem</i>" 2009 International Workshop on Numerical Verification and its Applications (INVA2009), 2009 年 3 月 22 日 ホテルブリーズベイマリーナ</p> <p>[7] <u>山中脩也</u> "DE 公式を用いた高速精度保証付き自動積分法の改良" 第 14 回計算科学セミナー, 2008 年 9 月 16 日 電気通信大学</p> <p>[8] <u>Naoya Yamanaka</u>, Takeshi Ogita, Shin'ichi Oishi "<i>Verified Automatic Integration using Complex Analysis for Quadrature with High-Order Derivatives on Error Term</i>" 2008 International Workshop on Numerical Verification and its Applications (INVA2008) 2008 年 3 月 1 日 東京第一ホテル オキナワグランメールリゾート</p>