

博 士 論 文 概 要

論 文 題 目

高精度計算を用いたポータブルな精度保証付き数値計
算法の研究

Studies on Portable Self-validating Methods with
Accurate Computations

申 請 者	
氏 名	尾崎 克久
	Katsuhisa Ozaki

専攻・研究指導
(課程内のみ)

情報・ネットワーク専攻 情報数理工学研究

科学技術計算を行う際、ハードウェアによって高速に実行可能な浮動小数点演算がよく用いられる。ただし浮動小数点数を用いた計算では丸め誤差・桁落ち等の誤差が発生し、解析的な解からほど遠い計算結果を得ることがある。そこで真の解と数値解の距離である誤差を知ることは非常に大切な問題である。そのために誤差解析という分野が発展し、アルゴリズムが導く数値解に対する誤差の上限を式で与え、数値解の持つ精度の良し悪しや、アルゴリズム自身の良し悪しを推測し、議論が行われてきた。例えば連立一次方程式に関しては、条件数や **growth factor** という概念を用いて、誤差の上限を式で抑えることは可能である。しかし、真の条件数は数値計算では求められず、**growth factor** は非常に大きな値であるために誤差は過大評価され、誤差の上限を実用的かつ定量的な評価で得ることは難解なことだと考えられてきた。誤差を定量的に求める手段としてよく用いられる区間演算を連立一次方程式に対して適用すると近似計算に要する時間の数 10 倍の時間を要し、また誤差の上限が計算ごとに膨れ上がるために問題があった。近年、Oishi・Rump らにより連立一次方程式の精度保証については求解に要する時間の数倍の時間をかければ、実用的かつ定量的な誤差の上限値を得ることが可能になった。数値計算は精度が保証されていない結果を返すために学問的には未成立とも思われていたが、精度保証付き数値計算は実用的な時間で実装されることから確立した研究として評価されている。現在実用的な精度保証付き数値計算は連立一次方程式、行列の固有値問題、偏微分方程式、数値積分等の様々な分野で達成され、今も高速化や高精度化の議論が行われ、進歩し続けている。

その背景の中で本論文では「高精度計算を用いたポータブルな精度保証付き数値計算法の研究」として、計算機環境に依存しない高精度かつ高速な精度保証付き数値計算を行う手法について述べられている。特に「Java による連立一次方程式の数値解に対する精度保証法」と「計算幾何学に現れる行列式の精度保証付き数値計算法」について書かれている。

Java は多くのユーザを持つプログラミング言語であり、近年は高速化の技術が発達して、数値計算やシミュレーションにも用いられる。そこで精度保証付き数値計算を Java で行う際には、Java は IEEE 754 が定める有向丸めの変更をサポートしていないことが問題となる（JNI を用いて他の言語で作成された有向丸めの変更を実装したライブラリを用いれば可能であるが、ポータビリティは失われる）。そこで有向丸めの変更を用いない精度保証法が必要となり、デフォルトの最近点への丸めの計算モードのみを用いて事前誤差評価を用いる手法が有効であるが、この手法は起こりうる最大の誤差を考慮するために、誤差の上限が過大評価されることがある。そこで従来手法と計算量がほぼ同等でかつ誤差を過大評価せずに Java で実装できる連立一次方程式の数値解に対する精度保証法を提案する。精度保証の基本式に対して最終的な誤差上限に大きく影響する部分のみに高速かつ高精度な内積計算法を適用して誤差の過大評価を防ぎ、有向丸めを使用しない

事前誤差評価を用いることで **Java** のポータビリティが保たれる。その結果としてノルムによる過大評価のない誤差上限、数値解の成分それぞれに対する過大評価のない誤差上限を得る手法の開発に成功している。

次に計算幾何学に現れる行列式に対する高速な精度保証付き数値計算法の開発について議論されている。計算幾何学における初等的な判定問題は低次元の行列式の符号を判定する問題に帰着されることが知られているが、本論文では点と平面の位置関係を判定する問題が扱われている。数値計算により行列式を求めた場合は浮動小数点演算による誤差のために正しい判定結果を返さない場合があり、問題視されている。この問題点に対して従来の手法では多倍長精度計算を用いて、なるべく正しい結果を得るように対処していたが、多倍長精度演算はソフトウェアにより仮想的に指数部・仮数部を拡張して実行されるために低速であるが、近年浮動小数点数演算のみを用いて高精度計算を行う手法を **Shewchuk** が開発し、従来の多倍長精度計算よりも高速であることを示した。数年後に **Demmel** と **Hida** により、行列式の計算は浮動小数点数の和に誤差なく変換し、高精度にベクトルの総和を計算するアルゴリズムを適用すれば、問題が悪条件な場合にはより高速に実行可能であることが示された。近年 **Rump**・**Ogita**・**Oishi** らにより開発されたベクトルの総和に対する計算結果が実数で計算した真の値の必ず隣の浮動小数点数を返す (**faithful** と呼ばれる) 高速かつ高精度なアルゴリズムが開発された。ここで行列式を浮動小数点数の和に誤差なく展開し、**faithful** な結果を返すアルゴリズムを適用すれば問題に必要な行列式の符号は保証されるが、ここで行列式から生成されるベクトルの持つ特殊な構造を考慮した計算を行い、また符号が正しいことが保証されるように終了条件を緩和することで、より高速なアルゴリズムを開発することに成功した。また **Shewchuk** による適応的な手法と合わせると、簡単な問題は高速に精度保証でき、悪条件な問題は提案手法を用いてより高速に行列式の符号が保証されることが示されている。

以下は、各章の構成に基づき、本論文の概要を述べる。本論文は5章からなっている。

第1章「序論」では本論文で用いる浮動小数点数、最近点への丸めモードのみを用いた浮動小数点数演算による事前誤差評価について述べ、連立一次方程式の数値解の精度保証法・高精度計算を紹介し、次章以降の準備を行っている。

第2章「**Java** による連立一次方程式の数値解の高精度な精度保証法」では **Java** が **IEEE 754** が定める浮動小数点数演算における有向丸めを実装していない点を考慮しても、連立一次方程式の数値解が持つ誤差を過大評価しない手法を構築している。有向丸めを用いずに誤差の上限を求めるには事前誤差評価という手法を

用いるが、事前誤差評価は起こりうる最大の誤差を常に考慮するために、誤差の過大評価は避けられない。特に **Java** を用いる場合には事前誤差評価をさらに有向丸めを用いずに、最近点への丸めモードのみで評価する形式を用いるので誤差はより過大評価となる。この問題点を解決するために浮動小数点演算のみを使用した高精度計算を用いるが、最終的な誤差上限に直接関連する残差の計算のみに適宜高精度計算を用いたことにより、コストの増加を抑えることに成功し、計算時間は先行研究による手法とほぼ同じ時間で実行できることが示されている。

第 3 章「**Java** による連立一次方程式の数値解に対し成分毎に高精度な誤差限界を与える精度保証法」では連立一次方程式の数値解の成分それぞれに対して誤差評価を与える手法が構築されている。第 2 章で述べた手法は連立一次方程式の数値解が持つ誤差に対してノルムによる高精度な誤差限界を与える手法であるが、解の絶対値の大きさに差があるときには、ノルムによる誤差限界は絶対値の大きな解の誤差に依存してしまうために、絶対値の小さな解に対しては良い誤差限界を与えることはできない。またスケール処理もある程度以上の絶対値の差があるときには有効でないために、精度保証式を拡張し、適宜高精度計算を適用して、数値解の成分それぞれに対して過大評価を起こさない精度保証法を開発することに成功している。

第 4 章「計算幾何学に現れる行列式の高速かつロバストな計算法」については、計算幾何学の初等的な問題である点と平面の位置関係を判定する問題に対して難しさに比例したコストをかける手法が構築されている。通常の浮動小数点数を用いた数値計算では丸め誤差・桁落ち等の誤差が発生するために、点と平面の位置関係が間違えられて判定されることがある。この問題を解決するために、最近開発された **Rump・Ogita・Oishi** らによるベクトルの総和を高精度に計算する方法を用いる。行列式の計算は誤差なくベクトルの総和に変換することができるために、直に高精度計算を用いることも可能であるが、行列式から生成されるベクトルの総和は特別な構造を持ち、絶対値の差が大きく離れていることに着目し、高精度計算の計算手法との関連を整理し、必要な部分のみを計算するようにアルゴリズムを組むことにより高速なアルゴリズムの開発に成功している。また前半部分は **Shewchuk** の適応的な手法をそのまま継続して用い、問題が簡単なときには現在最高の手法を適用し、問題が悪条件な場合には最も高速な提案手法を用いるバランスの良い形式で構築されている。

第 5 章「結論」では本論文のまとめと結論が記されている。

研 究 業 績

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	点と平面の位置関係を判定する高速かつロバストなアルゴリズム、応用数理学会論文誌特集号 16 :4、pp. 195-204、尾崎克久・荻田武史・S. M. Rump・大石進一。
論文	A Method of Obtaining Verified Solutions for Linear Systems suited for Java, Journal of Computational and Applied Mathematics (special issue), 2007, pp. 337-344, K. Ozaki, T. Ogita, S. Miyajima, S. Oishi, S. M. Rump. (in press)
国際会議論文	Fast Adaptive Algorithm of Geometric Predicates using Floating-Point Arithmetic, 12th GAMM - IMACS International Symposium on Scientific Computing, Computer Arithmetic, and Validated Numerics (SCAN 2006), University of Duisburg-Essen, Duisburg, Germany, September, 2006, pp. 115-116, K. Ozaki, T. Ogita, S.M. Rump, S. Oishi.
国際会議論文	Componentwise Verified Solutions of Linear Systems suited for Java, Proc. of 2005 International Symposium on Nonlinear Theory and its Applications, Bruges, Belgium, October, 2005, pp. 749-752, K. Ozaki, T. Ogita, S. Miyajima, S. Oishi, S. M. Rump.
講演	点と平面の位置関係を判定する高速かつ適応的な手法について、数値解析シンポジウム 2006、パナヒルズ大阪、2006年6月、pp.5-8、尾崎克久・荻田武史・S.M. Rump・大石進一。
講演	入力誤差を含めた点と平面の位置関係を判定する高速なアルゴリズム、平成18年応用数理学会、研究部会連合発表会、早稲田大学、2006年3月、尾崎克久・荻田武史・S. M. Rump・大石進一。
講演	高精度な内積計算の計算幾何学への応用、第3回計算数学研究会、兵庫県立淡路夢舞台国際会議場、2006年1月、尾崎克久・荻田武史・大石進一。
講演	丸めモードを利用しない連立一次方程式の数値解の高速精度保証法、研究集会「21世紀における数値解の新展開」、京大数理解析研究所、2004年11月、荻田武史・尾崎克久・S. M. Rump・大石進一。
講演	Javaによる連立一次方程式のための精度保証法、日本応用数理学会年会、中央大学、2004年9月、講演予稿集、pp.324-325、尾崎克久・荻田武史・宮島信也・大石進一。
講究録	J a v a による連立一次方程式の数値解の精度保証法、京都大学数理解析研究所講究録1441(2005)、pp. 75-88、尾崎克久・荻田武史・宮島信也・大石進一。
国際会議	Adaptive Verification Method for Dense Linear Systems, International Symposium on Nonlinear Theory and its Applications (NOLTA2006), Bologna, Italy, September, 2006, pp. 323-326, K. Ozaki, T. Ogita, S. Oishi.

研 究 業 績

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）
国際会議	Fast Error Estimation for Eigenvalues of Symmetric Matrix without Directed Rounding, Proc. of 2004 International Symposium on Nonlinear Theory and its Application, Fukuoka, Japan, December, 2004, pp. 167-170, S. Miyajima, T. Ogita, K. Ozaki, S. Oishi.
紀要	Spherical Data and Ray Tracing in 4-dimensional Space, Proc. of The School of Science of Tokai University, March, 2004, pp.57-69, K. Ozaki, A. Koriyama.
紀要	球面法によるレイトレーシングとその応用、東海大学紀要理学部 第 38 巻、2003 年 3 月、pp. 81-95、尾崎克久・郡山彬。
講演	4 次元空間における 2 次元オブジェクトの可視化について、日本シミュレーション学会大会、中央大学、2006 年 6 月、pp. 73-76、尾崎克久・郡山彬・大石進一。
講演	ポータブルかつ高精度な初等関数の精度保証付き数値計算とその応用、日本シミュレーション学会大会、防衛大学校、2005 年 7 月、pp.193-196、発表論文集、尾崎克久・荻田武史・大石進一。
講演	交点判定簡略化レイトレーシング法による幾何学的授業について、教育システム情報学会全国大会、香川大学、2004 年 8 月、講演論文集、pp.193-194、郡山彬・峯崎俊哉・尾崎克久。
著書	Java ではじめるレイトレーシング入門、森北出版、2005 年 5 月、郡山彬・原正雄・峯崎俊哉・尾崎克久。

研 究 業 績

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）