

10-NA01

精度保証付き多倍長並列演算環境の構築と計算機援用解析への展開

山本 野人（電気通信大学・研究課題責任者）

藤原 宏志（京都大学） 渡部 善隆（九州大学）

松田 望（電気通信大学） 木下 武彦（京都大学）

概要: 既存のものより高速でメモリ効率が良く使いやすい精度保証付き多倍長並列演算ライブラリを作成し、数学的未解決問題に対する計算機援用証明への応用を目指すことを目的とする。現在、区間と丸め方向の制御に基づくC++クラスライブラリを開発中であり、これまでに、加減算・乗算・除算・平方根に対する実装と理論的評価を完了した。

1 研究の目的と意義

1.1 研究の目的

本共同研究は、数学的に厳密な意味で丸め誤差を制御することのできる精度保証付き多倍長並列演算環境を設計・実装し、これまで解析的な解の存在証明の達成が困難とされてきた生物科学・流体力学・電磁気学分野の方程式に対する計算機援用証明に適用することを目的とする。

精度保証付き多倍長演算環境は、拡張精度浮動小数点演算ライブラリ `exflib` の丸め誤差制御機能を援用した区間演算を基盤とする。また、各種数学関数・線形計算ライブラリを整備する。適用を目指す具体的な問題は、

- 2次元FitzHugh-Nagumo型反応拡散方程式系に対するLegendre/Chebyshev多項式基底展開による解の包含
- 3次元Maxwell方程式に関するスペクトル・ギャップの存在検証
- Navier-Stokes方程式の線形安定性理論から導かれる非自己共役固有値問題に対する計算機援用証明

であり、通常の浮動小数点演算を用いた数値シミュレーションによって得られる近似解の周りで、数学的な厳密解の存在を検証するとともに、定量的な誤差限界を与えることを最終的な目標とする。

1.2 研究の意義

現在の多くの科学技術計算で実行される実数値・複素数値の計算は、IEEE754標準規格に代表される有限桁の浮動小数点数による近似計算であり、実数型・複素数型変数に対して実行される四則演算結果には、丸め誤差と呼ばれる近似誤差が不可避免的に混入する。また、マルチコア・分散並列におけるコーディングを行う場合には、問題によってはプロセス／スレッドに対する演算の配置・集約の際の同期の違いなどにより丸め誤差の累積が大きく異なることがある。そのような計算結果が得られた際に、プログラミングレベルあるいは丸め誤差レベルのどちらで切り分けを行うべきか判断に迷う状況も生じる。その意味で、累積丸め誤差が計算結果を破綻へと導く非適切問題に限らず、経験的に安定であることが知られている計算過程においても、丸め誤差の影響を実用的な時間で確認できる「検算」としての多倍長計算環境への期待が高まっている。

一方、近年、IEEE754標準倍精度の浮動小数点演算における丸め誤差を含む演算結果の保証が理論的にも実用的にも高い精度で効率よく実現できることが明らかにされ、計算結果の信頼性（品質保証）の問題が計算理工学の分野で広く取り上げられることとなった。また、計算結果の信頼性の問題は数値解法アルゴリズムそのものにも影響を与え、様々な数

理科学上に現れる問題の解それ自体を数学的な厳密さで検証するという方向にまで進展しつつある。この種の数値計算法は計算機援用証明または精度保証付き数値計算法と呼ばれ、科学技術計算のあるべき一つの方向として考えられている。

以上の背景より、数値シミュレーションの結果に対し、丸め誤差の影響も考慮した数学的に厳密な検証が任意の桁数で可能となる精度保証付き多倍長並列演算環境の構築とその精度保証への適用を目指すものである。

2 当拠点公募型共同研究として実施した意義

(1) 共同研究を実施した大学名

九州大学

(2) 共同研究分野

超大規模数値計算系応用分野

(3) 当公募型共同研究ならではの事項など

共同研究を実施している構成拠点である九州大学情報基盤研究開発センターでは、過去に二度(2008年・2009年)「多倍長・高精度計算フォーラム」を企画・開催した実績があり、専門的知識を持つ教員によるコーディネートによって、精度保証付き多倍長演算環境が必要となる未解決問題を持つ計算科学分野の研究者の抱える問題点や要望をライブラリの設計段階から反映することができた。

また、九州大学情報基盤研究開発センターは、スーパーコンピュータシステムと高性能アプリケーションサーバシステムを時期をずらして更新しており、最新かつ様々なソフトウェア環境を汎用的な多倍長演算ライブラリ開発のために活用できることも構成拠点(九州大学)の特長のひとつだといえる。

3 研究成果の詳細

これまでに得られた研究成果について、特に、研究成果リスト(5章)記載の学術論文: “On the basic operations of interval multiple-precision arithmetic with center-radius form” に発表された内容について詳述する。

3.1 精度保証付き多倍長演算ライブラリ

以下のような特徴を持った C++ のクラスライブラリを開発中である。

- 多倍長実数クラス LongFloat を提供する。
- 精度保証付き多倍長区間クラス LongInterval を提供する。
- 区間値を整数の中心値・半径形式で保持する。
- 多倍長演算の精度を任意に設定できる。
- 多倍長クラスはプログラム上、通常の「数」とほぼ同じように扱える。
- LongFloat および LongInterval の中心値に対する四則演算および平方根の計算が、correct rounding である。
- 実数だけでなく、複素数についても対応する。また、大規模並列環境への実装も行う。

3.2 クラス構造

ライブラリは、以下の三つのクラスから成る。

3.2.1 多倍長実数クラス LongFloat

```
class LongFloat{
    int sign;           // 符号
    uint32 *mantissa;   // 仮数部配列への
                        // ポインタ
    int exponent;       // 指数部
};
```

ここで, `sign` の値は ± 1 , `uint32` は 32 ビット符号なし整数である.

`LongFloat x` は, 以下の値を持つ $32n$ ビットの浮動小数点数である.

$$x = x.\text{sign} \sum_{k=0}^{n-1} (x.\text{mantissa}[k] \times 2^{-32k}) \times 2^{32x.\text{exponent}}$$

3.2.2 精度保証付き多倍長区間クラス LongInterval

```
class LongInterval{
    LongFloat center;   // 中心値
    Radius radius;      // 半径
};
```

`LongInterval x` は, 以下の中心値と半径を持つ実数区間である.

$$x = \langle x.\text{center}, \quad x.\text{radius} \rangle$$

3.2.3 区間半径クラス Radius

```
class Radius{
    uint32 mantissa;    // 仮数部
    int exponent;       // 指数部
};
```

`Radius` は `LongInterval` の内部で使うためのクラスであり, `Radius x` は, 以下の正の値を持つ 32 ビットの浮動小数点数である.

$$x = x.\text{mantissa} \times 2^{x.\text{exponent}}$$

基本演算の実装

乗算・除算・平方根の計算の具体的な実装法を紹介し, 発生する誤差を評価する.

3.3 乗算

区間

$$A = \langle a, \delta \rangle$$

$$B = \langle b, \varepsilon \rangle$$

の積 AB を考える.

3.3.1 従来の方法

AB を区間包囲する最も簡単な方法は, 以下の式を用いることである.

$$AB \subseteq \langle ab, |a|\varepsilon + |b|\delta + \delta\varepsilon \rangle$$

実装が簡単だが, 区間半径が最大で理論値の 1.5 倍に拡大するという欠点がある.

3.3.2 提案する方法

以下に, 丸め誤差以外に区間半径の拡大が起きない方法を示す. ここでは $a \geq 0, b \geq 0$ の場合のみ扱うが, 以下の議論は, 符号の操作を行うだけで他の場合にも適用できる.

1. $a \geq \delta, b \geq \varepsilon$ のとき

AB は以下の式で表わされる.

$$\begin{aligned} AB &= [(a - \delta)(b - \varepsilon), (a + \delta)(b + \varepsilon)] \\ &= [ab - a\varepsilon - b\delta + \delta\varepsilon, \\ &\quad ab + a\varepsilon + b\delta + \delta\varepsilon] \\ &= \langle ab + \delta\varepsilon, \quad a\varepsilon + b\delta \rangle \end{aligned}$$

2. $a\varepsilon \geq b\delta$ のとき

$a < \delta, b \geq \varepsilon$ ならば,

$$AB = [(a + \delta)(b - \varepsilon), (a + \delta)(b + \varepsilon)]$$

となり, $a < \delta, b < \varepsilon$ ならば,

$$(a - \delta)(b + \varepsilon) - (a + \delta)(b - \varepsilon) \\ = 2(a\varepsilon - b\delta) > 0$$

より,

$$(a + \delta)(b - \varepsilon) < (a - \delta)(b + \varepsilon)$$

なので,

$$AB = [(a + \delta)(b - \varepsilon), (a + \delta)(b + \varepsilon)]$$

となる.

どちらの場合も, AB は以下の式で表わされる.

$$\begin{aligned} AB &= [(a + \delta)(b - \varepsilon), (a + \delta)(b + \varepsilon)] \\ &= [ab - a\varepsilon + b\delta - \delta\varepsilon, \\ &\quad ab + a\varepsilon + b\delta + \delta\varepsilon] \\ &= \langle ab + b\delta, a\varepsilon + b\varepsilon \rangle \end{aligned}$$

3. $a\varepsilon < b\delta$ のとき

2. と同様にして, AB は以下の式で表わされる.

$$\begin{aligned} AB &= [(a - \delta)(b + \varepsilon), (a + \delta)(b + \varepsilon)] \\ &= [ab + a\varepsilon - b\delta - \delta\varepsilon, \\ &\quad ab + a\varepsilon + b\delta + \delta\varepsilon] \\ &= \langle ab + a\varepsilon, b\delta + \delta\varepsilon \rangle \end{aligned}$$

3.4 除算

区間同士の除算は, mid を区間の中点を返す関数, rad を区間の半径を返す関数だとすれば,

$$\begin{aligned} \frac{A}{B} &= A \left[\frac{1}{\text{mid}(B) + \text{rad}(B)}, \frac{1}{\text{mid}(B) - \text{rad}(B)} \right] \\ &= A \frac{[\text{mid}(B) - \text{rad}(B), \text{mid}(B) + \text{rad}(B)]}{\text{mid}(B)^2 - \text{rad}(B)^2} \\ &= \frac{AB}{\text{mid}(B)^2 - \text{rad}(B)^2} \end{aligned}$$

と変形できる. 区間同士の乗算の精度保証は既にできているので,

$$\frac{1}{\text{mid}(B)^2 - \text{rad}(B)^2}$$

の精度保証ができれば, 除算の精度保証ができる.

初めに,

$$w = \text{mid}(B)^2 - \text{rad}(B)^2$$

を計算する. w の近似値を z , 誤差を ε_1 とする.

$$z = w + \varepsilon_1$$

次に,

$$\bar{z}_{k+1} = (2 - z\bar{z}_k)\bar{z}_k$$

の反復計算によって, $1/z$ の近似値 $\bar{z}$ を求める.

$$z\bar{z} = 1 + \varepsilon_2$$

以上より, $\bar{z}$ の $1/w$ に対する誤差 δ は以下の式で表わされる.

$$\begin{aligned} \delta &= \frac{1}{w} - \bar{z} \\ &= \frac{1}{z - \varepsilon_1} - \frac{1 + \varepsilon_2}{z} \\ &= \frac{\varepsilon_1 - (z - \varepsilon_1)\varepsilon_2}{z(z - \varepsilon_1)} \end{aligned}$$

実際の計算では, 誤差は

$$\begin{aligned} \varepsilon_1 &\in [-e_1, e_1], \quad e_1 > 0 \\ \varepsilon_2 &\in [-e_2, e_2], \quad e_2 > 0 \end{aligned}$$

のように区間包囲されるので, δ は以下の式で区間包囲される.

$$\delta \in \frac{[-e_1, e_1] - (z - [-e_1, e_1])[-e_2, e_2]}{z(z - [-e_1, e_1])}$$

δ の計算に除算が必要になるが, ここではそれほど高い精度は必要ないので, 倍精度での精度保証付き計算を行えば十分である.

3.5 平方根

3.5.1 引数が点のとき

点 $x \geq 0$ の平方根を区間包囲するには、以下のような操作を行う。

最初に、Newton 法によって $\sqrt{x}$ の近似値を求める。ただし、「 $\sqrt{x}$ を求める Newton 法」ではなく、「 $1/\sqrt{x}$ を求める Newton 法」を用いる。これは、後者の漸化式には時間のかかる除算が現れないため、前者より計算が高速であるためである。

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= \frac{1}{2}y_n(3 - xy_n^2) \\ y_n &\simeq \frac{1}{\sqrt{x}} \\ xy_n &\simeq \sqrt{x} \end{aligned}$$

ここで、

$$z = xy_n$$

とおくと、 z の $\sqrt{x}$ に対する誤差 δ は、

$$\begin{aligned} \delta &= z - \sqrt{x} \\ &= \frac{z^2 - x}{z + \sqrt{x}} \end{aligned}$$

となる。

δ の計算に除算と平方根が必要になるが、ここではそれほど高い精度は必要ないので、倍精度での精度保証付き計算を行えば十分である。

3.5.2 引数が区間のとき

区間

$$X = \langle c, r \rangle \quad (0 \leq r \leq c)$$

の平方根は、以下の式で区間包囲できる。

$$\begin{aligned} \sqrt{X} &\subseteq \langle \sqrt{c}, \sqrt{c} - \sqrt{c-r} \rangle \\ &= \left\langle \sqrt{c}, \frac{r}{\sqrt{c} + \sqrt{c-r}} \right\rangle \end{aligned}$$

ここで、中心値は 3.5.1 の方法で多倍長で計算する。一方、半径の計算に除算と平方根

が必要になるが、ここではそれほど高い精度は必要ないので、倍精度での精度保証付き計算を行えば十分である。

4 これまでの進捗状況と今後の展望

4.1 進捗状況

山本・松田は、前章で詳述した C++ クラスライブラリを設計し、四則演算および平方根の実装と理論的評価を与えた。区間演算を中心値・半径形式で実装するにおいては、演算方法によっては半径の拡大を引き起こすことがよく知られていたが、乗算・除算の計算において区間半径拡大が起きない手法を提案した。また、多倍長演算においては半径を低精度にすることによってメモリを節約でき、計算速度も速くなるという知見を国内外で発表した。

藤原は exflib の丸め制御技術を応用した区間演算技術を開発し、基本線形代数演算の精度保証付き数値計算環境の構築を進めた。また、特に丸め誤差の影響が深刻に現れる数値的に不安定な問題に exflib の区間演算を適用し、丸め誤差の増大の定量的評価および必要な計算桁数の見積りが可能となることを示した。

渡部・木下は、計算機援用証明の過程で倍精度区間演算では証明達成が困難な問題を精査し、Legendre/Chebyshev 多項式基底展開による解の包含の過程と Orr-Sommerfeld 方程式に対する解の包み込みおよび複素固有値の除外では多倍長区間演算が必須となることを明らかにした。また、理論的な定式化と検証アルゴリズムを構築し実装のための下準備をほぼ終えた。

課題申し込み時に設定した研究計画は、複数年度の共同研究を想定したものであり、今年度中に最終目標までを達成することは難しいと思われる。しかしながら、実問題への適用性を視野に入れた協調的・相補的な研究は、

設定した項目に沿って順調かつ着実に進行している。

4.2 今後の展望

以下を計画している。

1. 精度保証付き多倍長並列演算環境の実機における評価, 複素数型への拡張, BLASレベルの基本演算関数の作成, 各種数学関数の設計・実装.
2. 連立1次方程式, 固有値・特異値問題など精度保証付き線形計算ライブラリの整備
3. 丸め誤差累積の特質に着目し, 利用者が指定した所望の誤差限界に対して自動的に保証された結果を返却する動的適応的システムの設計・開発
4. Legendre/Chebyshev 高次多項式の零点を含む区間を多倍長で求め, そのデータを利用した精度保証付き数値積分への応用
5. 反応拡散方程式系の精度保証, 3次元Maxwell方程式に関するスペクトル・ギャップの存在検証, Navier-Stokes方程式の線形安定性理論から導かれる非自己共役固有値問題に対する計算機援用解析の遂行

5 研究成果リスト

(1) 学術論文

- Nozomu Matsuda, and Nobito Yamamoto: On the basic operations of interval multiple-precision arithmetic with center-radius form, NOLTA, Special Section on Recent Progress in Verified Numerical Computations, January, 2011 (to appear).
 - Yoshitaka Watanabe, Kaori Nagatou, Michael Plum, and Mitsuhiro T. Nakao: A computer-assisted stability proof for the Orr-Sommerfeld problem with Poiseuille flow, NOLTA, Special Section on Recent Progress in Verified Numerical Computations, January, 2011 (to appear).
 - 藤原 宏志, PC・クラスタ向き的高速多倍長計算環境の構築と科学技術計算への応用, 計算工学講演会論文集 15 (2010-05) pp.887-890, 2010.
- ### (2) 国際会議プロシーディングス
- Hiroshi Fujiwara, Numerical real inversion of the Laplace transform by reproducing kernel and multiple-precision arithmetic, Proceedings of the 7th International ISAAC Congress (2010, Aug) pp.289-295.
- ### (3) 国際会議発表
- Nobito Yamamoto, and Nozomu Matsuda: Interval multiple-precision arithmetic with center-radius form, 14th GAMM-IMACS International Symposium on Scientific Computing, Computer Arithmetic, and Validated Numerics (SCAN 2010), ENS de Lyon, France, 2010 September.
 - Hiroshi Fujiwara, Multiple-precision interval arithmetic and their applications, The Third China-Japan-Korea Joint Conference on Numerical Mathematics Gangneung-Wonju National University, Gangneung, 2010 August.
 - Yoshitaka Watanabe: Computer-assisted existence proofs with local uniqueness for the Orr-Sommerfeld problem, International Workshop on Numerical

Verification and its Applications 2010 (INVA2010), Hotel Lido Azzurro, Hachijyo Island, Tokyo, Japan, 2010 March.

- Yoshitaka Watanabe: A self-validating norm computation of inverse for infinite dimensional linear operators and its applications, 14th GAMM-IMACS International Symposium on Scientific Computing, Computer Arithmetic, and Validated Numerics (SCAN 2010), ENS de Lyon, France [invited talk], 2010 September.

(4) 国内会議発表

- 山本 野人, 松田 望: 精度保証付き多倍長演算の実装について, 日本応用数理学会 2010 年度年会, 明治大学, 2010 年 9 月.
- 山本 野人, 松田 望: 中心半径型区間多倍長演算について, 研究集会・科学技術計算アルゴリズムの数理的基盤と展開, 京都大学数理解析研究所, 2010 年 10 月.
- 藤原 宏志: 多倍長区間精度による数値的に不安定な問題の取り扱い, 研究集会・科学技術計算アルゴリズムの数理的基盤と展開, 京都大学数理解析研究所, 2010 年 10 月.
- 渡部 善隆, 木下 武彦: Legendre 多項式を用いた高精度品質保証—およびその課題—, 日本応用数理学会 2010 年研究部会連合発表会, 筑波大学, 2010 年 3 月.
- 渡部 善隆, 長藤 かおり, 中尾 充宏: 非自己共役作用素に対する固有値の除外法, 日本応用数理学会 2010 年度年会 [特別講演], 明治大学, 2010 年 9 月.

(5) その他 (特許, プレス発表, 著書等) (特にありません.)