

複素数円板演算システムの構築

M2006MM036 油科 亮太

指導教員 杉浦 洋

1 はじめに

多くの電子計算機は IEEE754 という規格に従い実数を 2 進有限桁の浮動小数点数で近似して(丸めて)扱う。そのおかげで計算機は高速な計算を可能にしている。しかし、近似値で計算をするため、特別なシステムを除けば数値計算結果は厳密な正しさを保証していない。したがって数値計算結果がどの程度正しいのか検算することが重要である。厳密な検算に裏付けされ、精度が保障された数値計算を精度保証付き数値計算という。

数値計算で本来得られるべき真の値を x , 実際に計算機が求めた近似値を \hat{x} としたとき, その誤差は $x - \hat{x}$ である。精度保証付き数値計算の原点は

$$|x - \hat{x}| \leq \varepsilon, \quad (1)$$

となる絶対誤差の上界 $\varepsilon \geq 0$ を計算機で求めることである。対象が複素数でも同様であり, またベクトルや行列ならばノルムによる評価になる。このように精度保証付き数値計算では数学的に真となる命題を得ることができる。

本研究では計算機の丸めモードを制御することで, 高速な計算能力を生かした「拡張倍精度型精度保証付き円板演算システム」を C++ で構築する(これは [1][2] による区間演算システムの拡張になる)。さらに非正則フラグという機能を搭載することで, 与えられた円板上で関数が正則かどうかを判別できるようにした。このようなシステム構築ができるという根拠は 2 つある。

- 数値計算アルゴリズム内の個々の演算で精度保証すれば, 最終的な結果においても精度保証される(理論的根拠)。
- 計算機は丸めモードを任意に切り替えることができる(道具がそろっている)。

これにより C++ という汎用プログラミング環境で複素数問題を精度保証付きで解くことが可能になる。実際, 数値実験では周期 2π の周期関数の積分近似の精度保証を実現することができた。

具体的には実数問題については実区間

$$[\underline{x}, \bar{x}] = \{x \in \mathbb{R} \mid \underline{x} \leq x \leq \bar{x}\}, \quad \underline{x} \leq \bar{x}, \underline{x}, \bar{x} \in \mathbb{R}$$

を数の拡張とした区間解析理論を, 複素数問題には中心 $c \in \mathbb{C}$ 半径 $r \in \mathbb{R}, r \geq 0$ で

$$\langle c; r \rangle = \{z \in \mathbb{C} \mid |z - c| \leq r\}$$

となる複素閉円板を数の拡張とした円板解析理論 [3] を計算機へ応用する以降それぞれを区間, 円板と呼び, 区

間全体を \mathbb{IR} , 円板全体を \mathbb{KC} とする。 \mathbb{IR}, \mathbb{KC} それぞれ n 個による直積集合を $\mathbb{IR}^n, \mathbb{KC}^n$ とする。なお区間の両端点一致したとき, 円板の半径が 0 のときをそれぞれ点区間, 点円板といい実数, 複素数とみなす。

2 区間演算

$X \in \mathbb{IR}^n$ の実関数 $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ による像を $f(X)$ と表すことにする(複素関数も同様)。

関数

$$F: \mathbb{IR}^n \rightarrow \mathbb{IR}$$

を区間関数と呼び, 特に

$$f(X) \subseteq F(X)$$

となる区間関数 F を f の(包囲)区間関数といい, F が f を区間包囲したという。等号が成立したとき F は f の厳密な包み込みであるという。また,

$$A_k, B_k \in \mathbb{IR}, (k = 1, 2, \dots, n), A_k \subseteq B_k \\ \implies F(A_1, A_2, \dots, A_n) \subseteq F(B_1, B_2, \dots, B_n)$$

を満たすとき, F は包含単調性を持つという(後述する円板関数でも同様)。

定理 1 (システム構築の理論的根拠) 関数 f をいくつかの実関数が有限回現れる合成関数だとする。このとき f に現れる実関数をそれぞれの区間関数で置き換えたものは f の区間関数になる。

定理 1 は複素関数でも同様であるし, より一般的な条件でも成立するが, ここでは記述の流れから区間(および円板)に限定しておく。

$X = (X_1, X_2, \dots, X_n)$ として

$$F(X) = [\inf_{x_i \in X_i} f(x_1, x_2, \dots, x_n), \sup_{x_i \in X_i} f(x_1, x_2, \dots, x_n)] \quad (2)$$

となる F を f の厳密な区間関数という。 F は f に対して一意に決まり, もし f が連続ならば F は厳密な包み込みになる。

2.1 区間四則計算

定義 1 (区間四則計算) $X, Y \in \mathbb{IR}$ として四則演算を 2 変数関数とみなすと, (2) により区間四則計算は

$$X * Y = [\inf_{x \in X, y \in Y} x * y, \sup_{x \in X, y \in Y} x * y], \quad * \in \{+, -, \cdot, /\}$$

である。ただし, 除算のときは $0 \notin Y$ とする。

区間四則計算には無限回の四則計算が必要に見えるが, 実際には次が成立する。

定理 2 $X = [\underline{x}, \bar{x}], Y = [\underline{y}, \bar{y}] \in \mathbb{IR}$ について,

$$\begin{aligned} X + Y &= [\underline{x} + \underline{y}, \bar{x} + \bar{y}], & X - Y &= [\underline{x} - \bar{y}, \bar{x} - \underline{y}], \\ X \cdot Y &= [\min\{\underline{x}\underline{y}, \underline{x}\bar{y}, \bar{x}\underline{y}, \bar{x}\bar{y}\}, \max\{\underline{x}\underline{y}, \underline{x}\bar{y}, \bar{x}\underline{y}, \bar{x}\bar{y}\}], \\ X/Y &= X \cdot [1/\bar{y}, 1/\underline{y}], & 0 &\notin Y \end{aligned}$$

が成立する.

区間四則計算は包含単調性を持ち, 加算乗算の結合法則, 交換法則と劣分配法則 ($X, Y, Z \in \mathbb{IR}$ または \mathbb{KC} に対して $XY + XZ \subseteq X(Y + Z)$ となる性質) を持つ.

以上の議論は点区間でも同様である. したがって, 実数と区間が混合した計算は実数を点区間とみなすことで定義されたことになる.

2.2 区間初等関数

初等関数のように性質がよく分かっている関数 f の厳密な区間関数 F は求めやすい. 例えば単調増加, 単調減少関数ならば

$$f(X) = F(X) = [f(\underline{x}), f(\bar{x})], \quad f(X) = F(X) = [f(\bar{x}), f(\underline{x})]$$

である.

2.3 合成関数

f の定義式が四則演算および初等関数で構成されていると, f の厳密な区間関数を求めることは非常な計算を要する. そこで, f に現れる四則演算, 初等関数をそれぞれの区間関数で置き換えてできる f の包囲区間関数 F で代用することがある ([1][2][4] では区間拡張と言っている).

ただし, このようにして得る F は一意的に定まるわけではなく, f を定義する数式を数学的に同等な他の表現形式に書き直したとき, それらの表現に基づいて区間関数に置き換え新たに区間関数をつくると, 一般に異なる評価を与えることに注意する.

例えば $x \in X \in \mathbb{IR}$ で

$$-x \cdot x \cdot x + x \cdot x - x + 1 \equiv ((-x + 1)x - 1)x + 1$$

は数学的に同等である. しかし, それぞれに登場する四則計算を区間四則計算に置き換えて区間関数をつくると

$$-X \cdot X \cdot X + X \cdot X - X + 1 \supseteq ((-X + 1)X - 1)X + 1$$

となる. これは区間乗算の劣分配法則のためである.

3 円板演算理論

実数における区間演算理論の複素数への一つの拡張は, 実部虚部をそれぞれ区間で表した, 複素数平面上の長方形領域になる. しかし, (1) に立ち返ると, 円領域を扱う方が自然である. さらに, 複素解析になじみやすい形状であること, 表現に必要なパラメータが実数 3 つでよいという利点もある.

区間演算理論との一番違いは, 一般に複素関数は円板を円板に写さないという点である. そのため区間演算の

場合に定義した実関数 f の厳密な区間関数 F のようなものは, 円板演算理論ではほとんど定義されない. その代わりに, 乗算や初等関数に対して与えられるのはそれら関数の包囲円板関数である. したがって, 複素関数に対しどのように包囲円板関数を構成するかが議論の焦点になる.

3.1 包囲円板関数

$$F: \mathbb{KC}^n \rightarrow \mathbb{KC}$$

を円板関数と呼び, 複素関数 $f: \mathbb{C}^n \rightarrow \mathbb{C}, Z \in \mathbb{KC}^n$ に対して

$$f(Z) \subseteq F(Z)$$

となる円板関数 F を f の (包囲) 円板関数 (または単に包囲円板) といい, F が f を円板包囲したという. 等号が成立したとき F は f の厳密な包み込みであるという.

円板関数についても定理 1 同様の定理が得られる. 特に円板演算理論においては, 先述したとおり一般の f は円板を円板に写さないで, 包囲円板関数で代用することになる. f の円板関数は一意には決まらないのでその選び方で性質が異なるが, $f(Z)$ を含んでいることだけは保証される.

3.2 最小円板

ある領域の包囲円板のうち, 半径が最小のものを最小円板という. 最小円板については以下の最低限の性質のみ述べておく (証明は本稿参照).

定理 3 任意の有界閉領域 $G \subset \mathbb{C}$ について最小円板がただひとつ存在する.

系 1 複素関数 f が連続ならば $f(Z)$ の最小円板がただひとつ存在する.

3.3 円板四則計算

円板どうしの加減算および逆数演算は像が円板になるので, 像の厳密な包み込みが可能である.

定義 2 (円板加減算, 逆数演算) $Z_1, Z_2 \in \mathbb{KC}$ として, 円板の加減算および逆数演算は

$$\begin{aligned} Z_1 \pm Z_2 &= \{z_1 \pm z_2 \mid z_1 \in Z_1, z_2 \in Z_2\} \\ 1/Z_2 &= \{1/z_2 \mid z_2 \in Z_2\} \end{aligned}$$

である. ただし, 逆数演算のときは $0 \notin Z_2$ とする.

区間四則計算でもそうであったように, 無限回の演算は必要なく実際には次が成立する.

定理 4 $Z_1 = \langle c_1; r_1 \rangle, Z_2 = \langle c_2; r_2 \rangle \in \mathbb{KC}$ について,

$$Z_1 + Z_2 = \langle c_1 + c_2; r_1 + r_2 \rangle, \quad Z_1 - Z_2 = \langle c_1 - c_2; r_1 + r_2 \rangle$$

$$1/Z_2 = \left\langle \frac{\bar{c}_2}{|c_2|^2 - r_2^2}; \frac{r_2}{|c_2|^2 - r_2^2} \right\rangle, \quad 0 \notin Z_2$$

が成立する.

もし乗算が定義されれば除算は逆数演算と乗算で定義できる。一般に乗算による像は円板にならないので乗算の円板関数で定義しなければならず、その選び方により、円板四則計算は3種類の定義がある [5]。

定義3 (Taylor 円板四則計算) 乗算を Taylor 円板乗算

$$Z_1 \cdot Z_2 = \langle c_1 c_2; |c_1| r_2 + |c_2| r_1 + r_1 r_2 \rangle$$

とした円板四則計算を Taylor 円板四則計算という。

定義4 (最適円板四則計算) 乗算を最適円板乗算

$$Z_1 \cdot Z_2 = \langle c_1 c_2 (1 + \rho); (|c_1| r_2 + |c_2| r_1) (1 + \rho) \rangle,$$

$$\rho = r_1 r_2 / (|c_1 c_2| + |c_1| r_2 + |c_2| r_1)$$

とした円板四則計算を最適円板四則計算という。

定義5 (最小円板四則計算) 乗算を最小円板で円板包囲する円板四則計算を最小円板四則計算という。

「Taylor 円板乗算」とは複素積 $z_1 z_2$ を $(z_1, z_2) = (c_1, c_2)$ まわりで Taylor 展開して得られるゆえの命名である。Taylor, 最適円板四則計算は包含単調性を持ち、加算乗算の結合法則、交換法則と劣分配法則を持つ。

最適、最小円板四則計算についての詳細は証明も含め本稿にゆだねる。

3.4 Taylor 円板関数

定理5 (Taylor 円板関数) 複素関数 $f(z)$ が $Z = \langle c; r \rangle \in \mathbb{KC}$ 上で解析的ならば

$$f(Z) \subseteq \langle f(c); R_T \rangle, \quad R_T = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{|f^{(k)}(c)|}{k!} r^k$$

となる。

定理5によって作られる f の円板関数 F_T を Taylor 円板関数といい、 F_T は包含単調性を持つ。Taylor 円板関数は一般には最小円板関数にはならない。

本システムでは、指数関数を Taylor 円板関数で実装した。

4 IEEE754 による機械計算

計算機は実数を有限桁 2 進数浮動小数点数で近似してメモリに格納する。これを丸めという。そのため丸めは、2 進 p 桁浮動小数点数の集合を \mathbb{R}_p として、写像 $\mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}_p$ とみなせる。

4.1 丸めモード

IEEE754 では次の4つの丸めモードを指定できる。

- 丸め込み $\square: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}_p$
 $x \in \mathbb{R}$ を最も近い $\hat{x} \in \mathbb{R}_p$ に移す。最近点丸めともいう。
- 丸め上げ $\Delta: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}_p$
 $x \in \mathbb{R}$ を x 以上で最も小さい $\hat{x} \in \mathbb{R}_p$ に移す。
- 丸め下げ $\nabla: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}_p$
 $x \in \mathbb{R}$ を x 以下で最も大きい $\hat{x} \in \mathbb{R}_p$ に移す。

- 切り捨て $\diamond: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}_p$

$x \in \mathbb{R}$ が負ならば丸め上げ、正ならば丸め下げる。

よって、 $x \in \mathbb{R}$ は $x \in [\nabla(x), \Delta(x)]$ となる。

4.2 機械演算

IEEE754 では四則計算と開平計算を規格化している。これらの計算は、正確に計算したものを丸めモードに合わせて丸めてからメモリに格納する。

計算機の四則計算 \odot ($* \in \{+, -, \cdot, / \}$) および開平計算 $\sqrt{\cdot}$ は

$$x \odot y = \odot(x * y), \quad \sqrt{x} = \odot(\sqrt{x}), \quad x, y \in \mathbb{R}_p$$

となる。ただし $\odot \in \{\square, \Delta, \nabla, \diamond\}$ とする。したがって、

$$x * y \in [x \nabla y, x \Delta y], \quad \sqrt{x} \in [\sqrt{x} \nabla, \sqrt{x} \Delta] \quad (3)$$

となる。(3)を原理に、丸め上げ、丸め下げを使いこなすことで区間演算、円板演算理論を計算機上で展開していくことになる。

5 機械区間演算

区間の両端が浮動小数点数となる区間を機械区間という。 \mathbb{R}_p の機械区間全体の集合 $\mathbb{I}\mathbb{R}_p$ を

$$\mathbb{I}\mathbb{R}_p = \{[\underline{x}, \bar{x}] \in \mathbb{I}\mathbb{R} \mid \underline{x}, \bar{x} \in \mathbb{R}_p\}$$

とする。

5.1 機械区間四則計算

丸めモードを切り変えることで、区間四則計算に対して包囲区間関数を機械区間で実装できる。

定義6 $X = [\underline{x}, \bar{x}], Y = [\underline{y}, \bar{y}] \in \mathbb{I}\mathbb{R}$ として、機械区間四則計算を

$$X + Y = [\underline{x} \nabla \underline{y}, \bar{x} \Delta \bar{y}], \quad X - Y = [\underline{x} \nabla \bar{y}, \bar{x} \Delta \underline{y}]$$

$$X \cdot Y = [\min\{\underline{x} \nabla \underline{y}, \bar{x} \nabla \underline{y}, \underline{x} \nabla \bar{y}, \bar{x} \nabla \bar{y}\}, \max\{\underline{x} \Delta \underline{y}, \bar{x} \Delta \underline{y}, \underline{x} \Delta \bar{y}, \bar{x} \Delta \bar{y}\}],$$

$$X / Y = [\min\{\underline{x} \nabla \underline{y}, \bar{x} \nabla \underline{y}, \underline{x} \nabla \bar{y}, \bar{x} \nabla \bar{y}\}, \max\{\underline{x} \Delta \underline{y}, \bar{x} \Delta \underline{y}, \underline{x} \Delta \bar{y}, \bar{x} \Delta \bar{y}\}]$$

と定義する。ただし除算は $0 \notin Y$ とする。

5.2 機械区間初等関数

$X \in \mathbb{K}\mathbb{C}$ 上で定義された初等関数 $f(x)$ の近似関数を $p(x)$ としたとき、実際に計算機が $p(x)$ を計算して得られる値は $\hat{y} \in \mathbb{R}_p$ である。 $|f(x) - p(x)| \leq \varepsilon_t$ を理論誤差、 $|p(x) - \hat{y}| \leq \varepsilon_r$ を丸め誤差とすれば、

$$\forall x \in X, f(x) \in [\hat{y} \nabla \varepsilon, \hat{y} \Delta \varepsilon], \quad \varepsilon = \varepsilon_t \Delta \varepsilon_r$$

と区間包囲できる [2]。

5.3 中心と半径

区間 $X = [\underline{x}, \bar{x}]$ に対して、

$$c = \text{mid}(X) = \frac{\bar{x} \Delta \underline{x}}{2} \Delta \underline{x}, \quad r = \text{rad}(X) = c \Delta \underline{x}$$

とする。このとき $X \subseteq \langle c; r \rangle$ となる。

6 機械円板演算

機械区間演算を利用することで，機械円板演算は定義できる．中心と半径が浮動小数点数の円板を機械円板という． \mathbb{R}_p の機械円板全体の集合 \mathbb{KC}_p を

$$\mathbb{KC}_p = \{\langle c; r \rangle \mid c \in \mathbb{R}_p + i\mathbb{R}_p, r \in \mathbb{R}_p\}$$

とする．

6.1 機械円板による包圍円板関数

$X, Y \in \mathbb{IR}_p$ として，複素数の長方形領域を

$$X + iY \stackrel{\text{def}}{=} \{z \in \mathbb{C} \mid \text{Re}(z) \in X, \text{Im}(z) \in Y\}$$

とする．つづいて， $X + iY$ の中心と半径を

$$\text{mid}(X + iY) = \text{mid}(X) + i \text{mid}(Y),$$

$$\text{rad}(X + iY) = \sqrt{\text{rad}(X) \Delta \text{rad}(Y) \Delta \text{rad}(Y) \Delta \text{rad}(X)}$$

と定義する（右辺は機械区間の mid, rad であり，左辺は長方形領域の mid, rad である）．

定理 6 (機械円板の構成方法) 以下の手順で円板 $\langle c; r \rangle$ を包圍する機械円板を作る．

1. $c \in X + iY$ となる $X, Y \in \mathbb{IR}_p$ を計算する．
2. $r \leq \rho$ となる $\rho \in \mathbb{R}_p$ を計算する．
3. $c' = \text{mid}(X + iY), r' = \rho \Delta \text{rad}(X + iY)$ を計算する．

このとき $\langle c; r \rangle \subseteq \langle c'; r' \rangle \in \mathbb{KC}_p$ となる．

定理 6 を使うことで，各円板演算を機械円板で実装することができる．現在システムには，四則計算，指数関数（三角関数）を実装している．

6.2 非正則フラグ

本システムでは，個々の演算のたびにその円板内に特異点が無いかを検査して，特異点を見つけるとフラグを立てせるルーチンを組み込んだ．これにより，組み込まれた演算による合成関数が，与えられた円板上で正則かどうかを調べることができる．

7 数値実験

定理 7 周期 2π の周期関数 $f(z)$ が領域 $B_d = \{z \in \mathbb{C} \mid |\text{Im}(z)| \leq d, 0 \leq \text{Re}(z) \leq 2\pi\}$ で解析的で，実軸上で実とする．このとき近似積分

$$S_n = \frac{2\pi}{n} \sum_{l=0}^{n-1} f\left(\frac{(2l+1)\pi}{n}\right) \cong S = \int_0^{2\pi} f(x) dx$$

について， $r = e^d$ ， $M = \max_{0 \leq x \leq 2\pi} |f(x + id)|$ とすれば

$$|S_n - S| \leq \frac{4\pi M(r^n + 1 + r^{-n})}{(r^n - 1)^2} = M_n,$$

となる．

定理 7 をもとに $f(x) = \frac{2}{5+3\cos x}$ の S を精度保証する．

7.1 実験

円板演算システムを使い，以下のとおり実験を行う．

1. 非正則フラグを使い，領域 $B_1(d=1)$ における $f(z)$ の正則性を確保する．具体的には B_1 を包み込むように有限個の小さな円板を選び，それぞれにおいて $f(z)$ の正則性を調べていく．
2. $\max_{0 \leq x \leq 2\pi} |f(x + i)|$ の上界 M を円板演算で求める．
3. S_n を区間演算で計算して， $S_n \in [S_n, \overline{S_n}] \subseteq \langle c_n; \rho_n \rangle$ を求める（ S_n の丸め誤差を評価する）．
4. 理論誤差の上界 M_n を区間演算で求める（理論誤差の上界）．

以上のとおり実験を行った結果，分点数 n に対して c_n, ρ_n, M_n を求めることができた．よって，

$$|S - c_n| \leq |S - S_n| + |S_n - c_n| \leq M_n \Delta \rho_n = r_n$$

ゆえ，表 1 の $n = 50$ より，

$$|S - 3.141592653589793238513| \leq 5.002 \times 10^{-18}$$

が証明された（実際の誤差は約 5.0×10^{-20} になる）．

表 1 真値 S の包圍区間（円板表現）

分点数 n	中心 c_n	半径 r_n
10	3.141486249096868944202	3.412×10^{-3}
20	3.14159265178779329125	1.549×10^{-7}
30	3.141592653589762721691	7.032×10^{-12}
40	3.141592653589793237862	3.235×10^{-16}
50	3.141592653589793238513	5.002×10^{-18}
60	3.141592653589793238296	5.096×10^{-18}

下線はシステムが精度保証する正しい桁を示す

8 おわりに

本研究では拡張倍精度による円板演算システムを C++ で実装し，実際に数値積分の精度保証をすることができた．しかし，この円板演算システムはまだ実装された関数が乏しいことが課題である．Taylor 円板関数は多くの初等関数を実装可能にするが，そのためには区間演算システムの充実が必要である．また，Taylor 円板は包圍する像に比べてやや大きすぎる問題がある．半径を小さくするために，初等関数の最小円板の研究を進めたい．

参考文献

- [1] 大澤智宏: 区間演算システムの構築, 南山大学数理情報学部数理科学科卒業論文 (2006).
- [2] 青木啓介: 区間初等関数の作成, 南山大学数理情報学部数理科学科卒業論文 (2008).
- [3] Miodrag S.Petkovic, Ljiljana D.Petkovic: Complex Interval Arithmetic and Its Applications, Wiley-VCH, (1998).
- [4] 大石信一: 精度保証付き数値計算, コロナ社, (2000).
- [5] M.Hauenschild: Arithmetiken für komplexe Kreise, *Computing* 13 (1974), 299-312.