数理解析研究所講究録
1198 巻 2001 年 161-169

単調な疎行列における連立一次方程式の高速精度保証

早稲田大学大学院 理工学研究科　荻田 武史 (Takeshi Ogita)
Graduate School of Science and Engineering, Waseda University
日立製作所 エンタープライズサーバ事業部　後 保範 (Yasunori Ushiro)
Enterprise Server Division, Hitachi Ltd.
早稲田大学 理工学部　大石 進一 (Shin'ichi Oishi)
School of Science and Engineering, Waseda University

1 概要

本論文において，我々は連立一次方程式

$$Ax = b \tag{1}$$

に対し，その数値解の検証を考える。但し，A は $n \times n$ 実行列，x は n 次の実ベクトルである。近年，区間解析の成果として，式 (1) の厳密解（真の解）と計算機で計算した数値解の間に生じる厳密な誤差限界を計算するための様々な方法が開発されてきた。

本論文において，我々は係数行列 A が疎で単調な場合を取り扱う。この種の問題には，楕円型偏微分方程式の数値解法を含む，多様かつ重要な問題が残っていることがよく知られている。そこで，反復法に基づき，我々は，式 (1) の厳密解に対して丸め誤差も含めた数値解の厳密な誤差限界を計算する新しい方法を提案する。

本論文の主目的は，係数行列 A の疎性を保つ高速な検証方法を開発することである。したがって，逆行列 A^{-1} や A の LU 分解を計算すべきではない。そのため，反復解法を使用することを前提とした精度保証用アルゴリズムを考えたい。本論文の主結果は，A の単調性および本著の一人である大石とドイツの研究者 Rump 教授によって提案された浮動小数点数の丸め制御演算方式に基づく新しい検証方法 [1] を利用すれば，上記のような検証が可能となることを示している。

我々は，数値実験を行い，係数行列 A が単調であれば，連立一次方程式 (1) の数値解の計算よりも少ない計算コストでその精度保証が可能であることを示す。さらに，A の条件数を高速かつ非常にシャープに精度保証付きで求められることも示す。

2 浮動小数点数の丸め制御演算方式

この章では，要素が浮動小数点数である実（列）ベクトル p と q に対し，その内積のシャープな包み込みを，丸め制御演算方式を用いることにより丸め誤差も含めて厳密に計算できることを示す。内積 $p^T q$ の包み込みを求めるアルゴリズムを図 1 に示す。ここで，命令 **setround**(*down*) と命令 **setround**(*up*) はそれぞれ下への丸めモードと上への丸めモードを指定することを意味する。このとき，丸めモードを一度変更したら，次の命令 **setround** が

$$
\begin{array}{ll}
\textbf{function}\ \ [\underline{c}, \overline{c}] = \textbf{iprod}(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{q}); & \\
\textbf{setround}(\mathit{down}); & \text{\% rounding downward} \\
\underline{c} = \boldsymbol{p}^T \boldsymbol{q}; & \text{\% lower bound of } \boldsymbol{p}^T \boldsymbol{q} \\
\textbf{setround}(\mathit{up}); & \text{\% rounding upward} \\
\overline{c} = \boldsymbol{p}^T \boldsymbol{q}; & \text{\% upper bound of } \boldsymbol{p}^T \boldsymbol{q}
\end{array}
$$

図 1: 内積の厳密な包み込みアルゴリズム

指定されるまでは変更した丸めモードで計算し続けるものとする。したがって，丸め誤差も含めて，$\underline{c}$ は内積 $\boldsymbol{p}^T\boldsymbol{q}$ の下界，$\overline{c}$ はその上界となる。かくして，以下の不等式が成立する：

$$\underline{c} \le \boldsymbol{p}^T \boldsymbol{q} \le \overline{c}$$

3 行列ノルムの包み込み

この章では，$A^{-1} \ge O$ である $n \times n$ の実行列 A に対し，逆行列 A^{-1} の最大値ノルム $||A^{-1}||_\infty$ の非常にシャープな包み込みが，丸め制御演算方式を用いて計算可能であることを示す。以下では，$A \ge O$ という表記は行列 A のすべての要素が非負であることを意味する。

行列 A が正則で $A^{-1} \ge O$ であるとき，A を単調（monotone）と呼ぶ。以下に，単調な行列に対し，その逆行列の最大値ノルムを包み込むためのキーポイントとなる定理を示す。

定理 1 A を単調な $n \times n$ 実行列，$\boldsymbol{e}$ を n 次の実ベクトルとする（但し，$\boldsymbol{e} = (1, 1, ..., 1)^T$ ）。さらに，$\widetilde{\boldsymbol{y}}$ を連立一次方程式 $A\boldsymbol{y} = \boldsymbol{e}$ の数値解とし，$\boldsymbol{s} = A\widetilde{\boldsymbol{y}} - \boldsymbol{e}$ をその残差ベクトルとする。そのとき，不等式

$$\frac{||\widetilde{\boldsymbol{y}}||_\infty}{1 + ||\boldsymbol{s}||_\infty} \le ||A^{-1}||_\infty \tag{2}$$

が成立し，さらに，$||\boldsymbol{s}||_\infty < 1$ ならば，不等式

$$||A^{-1}||_\infty \le \frac{||\widetilde{\boldsymbol{y}}||_\infty}{1 - ||\boldsymbol{s}||_\infty} \tag{3}$$

が成立する。

証明 $n \times n$ 実行列 A が単調ならば $A^{-1} = (\widetilde{a}_{ij}) \ge O$ であるから，$\boldsymbol{e} = (1, 1, ..., 1)^T$ とすると

$$||A^{-1}||_\infty = \max_{1 \le i \le n} \sum_{j=1}^{n} |\widetilde{a}_{ij}| = \max_{1 \le i \le n} \sum_{j=1}^{n} \widetilde{a}_{ij} = ||A^{-1}\boldsymbol{e}||_\infty \tag{4}$$

が成り立つ。$\boldsymbol{y}^* = A^{-1}\boldsymbol{e}$ とすると，式 (4) から

$$||A^{-1}||_\infty = ||A^{-1}\boldsymbol{e}||_\infty = ||\boldsymbol{y}^*||_\infty \tag{5}$$

である。$\widetilde{\boldsymbol{y}}$ を連立一次方程式 $A\boldsymbol{y}=\boldsymbol{e}$ の数値解，$\boldsymbol{s}=A\widetilde{\boldsymbol{y}}-\boldsymbol{e}$ をその残差ベクトルとすると，そのとき

$$\begin{aligned}||\widetilde{\boldsymbol{y}}||_\infty &= ||(\widetilde{\boldsymbol{y}}-\boldsymbol{y}^*)+\boldsymbol{y}^*||_\infty \\ &\leq ||\widetilde{\boldsymbol{y}}-\boldsymbol{y}^*||_\infty+||\boldsymbol{y}^*||_\infty = ||A^{-1}(A\widetilde{\boldsymbol{y}}-\boldsymbol{e})||_\infty+||\boldsymbol{y}^*||_\infty \\ &\leq ||A^{-1}||_\infty\cdot||\boldsymbol{s}||_\infty+||\boldsymbol{y}^*||_\infty \end{aligned} \tag{6}$$

となるので，式 (5), (6) より

$$||\widetilde{\boldsymbol{y}}||_\infty \leq ||A^{-1}||_\infty\cdot||\boldsymbol{s}||_\infty+||A^{-1}||_\infty \tag{7}$$

を得る。すなわち，

$$||\widetilde{\boldsymbol{y}}||_\infty \leq (1+||\boldsymbol{s}||_\infty)||A^{-1}||_\infty \tag{8}$$

なので，これから式 (2) が導かれる。

同様の議論で，

$$\begin{aligned}||\boldsymbol{y}^*||_\infty &= ||(\boldsymbol{y}^*-\widetilde{\boldsymbol{y}})+\widetilde{\boldsymbol{y}}||_\infty \\ &\leq ||A^{-1}||_\infty\cdot||\boldsymbol{s}||_\infty+||\widetilde{\boldsymbol{y}}||_\infty\end{aligned} \tag{9}$$

が成り立つので，式 (5), (9) から，

$$||A^{-1}||_\infty \leq ||A^{-1}||_\infty\cdot||\boldsymbol{s}||_\infty+||\widetilde{\boldsymbol{y}}||_\infty \tag{10}$$

を得る。すなわち，

$$(1-||\boldsymbol{s}||_\infty)||A^{-1}||_\infty \leq ||\widetilde{\boldsymbol{y}}||_\infty \tag{11}$$

である。これより，$||\boldsymbol{s}||_\infty<1$ が満たされていれば

$$||A^{-1}||_\infty \leq \frac{||\widetilde{\boldsymbol{y}}||_\infty}{1-||\boldsymbol{s}||_\infty} \tag{12}$$

となり，これは所望の結果である。 □

行列 A が単調のときに $||A^{-1}||_\infty$ の包み込みを求めるアルゴリズムを図 2 に示す。ここで，n 次の実ベクトルに対し，命令 $\mathbf{max}(\mathbf{abs}(\underline{\boldsymbol{v}}),\mathbf{abs}(\overline{\boldsymbol{v}}))$ は第 i 番目の要素 $\widehat{v}_i=\max\{|\underline{v}_i|,|\overline{v}_i|\}$ であるベクトル $\widehat{\boldsymbol{v}}$ を生成する。また，命令 $\mathbf{norm}(\boldsymbol{v},\infty)$ は $||\boldsymbol{v}||_\infty$ を計算する。かくして，図 2 に示すアルゴリズムが成功裏（$\underline{d}>0$）に終了したとすると，以下の不等式が成立する：

$$\underline{a_{\mathrm{invinf}}} \leq ||A^{-1}||_\infty \leq \overline{a_{\mathrm{invinf}}}$$

4 数値解の精度保証

この章では，$A^{-1}\geq O$ であるような $n\times n$ 実行列に対し，丸め誤差も含めた $||\widetilde{\boldsymbol{x}}-\boldsymbol{x}^*||_\infty$ の厳密な上界が反復解法と丸め制御演算方式を用いて計算可能であることを示す。ここで，$||\widetilde{\boldsymbol{x}}-\boldsymbol{x}^*||_\infty$ は式 (1) の厳密解 $\boldsymbol{x}^*$ と数値解 $\widetilde{\boldsymbol{x}}$ の差の最大値ノルムである。

```
function [a_invinf(lower), a_invinf(upper)] = ainvinf(A, ỹ);
setround(down);
s_lower = Aỹ − e;                              % lower bound for Aỹ − e
setround(up);
s_upper = Aỹ − e;                              % upper bound for Aỹ − e
ŝ = max(abs(s_lower), abs(s_upper));           % ŝ_i = max{|s_lower_i|, |s_upper_i|}
y_norm = norm(ỹ, ∞);                           % ||ỹ||_∞
s_norm(upper) = norm(ŝ, ∞);                    % upper bound of ||Aỹ − e||_∞
d_upper = 1 + s_norm(upper);
setround(down);
a_invinf(lower) = y_norm / d_upper;            % lower bound of ||A^{-1}||_∞
d_lower = 1 − s_norm(upper);
if d_lower > 0;                                % ||s||_∞ < 1 ?
   setround(up);
   a_invinf(upper) = y_norm / d_lower;         % upper bound of ||A^{-1}||_∞
else;
   print('inclusion failed');
end;
```

図 2: $||A^{-1}||_\infty$ の厳密な包み込みアルゴリズム

4.1 精度保証の方法

以下は，単調な行列における連立一次方程式の解の精度保証の基礎となる定理である。

定理 2 A を単調な $n \times n$ 実行列， $\boldsymbol{x}$, $\boldsymbol{y}$, $\boldsymbol{b}$ および $\boldsymbol{e}$ を n 次の実ベクトルとする（但し，$\boldsymbol{e} = (1, 1, ..., 1)^T$ ）。連立一次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ の厳密解を $\boldsymbol{x}^*$ ，数値解を $\widetilde{\boldsymbol{x}}$ とする。また，$A\boldsymbol{y} = \boldsymbol{e}$ の数値解を $\widetilde{\boldsymbol{y}}$ とする。さらに， $\boldsymbol{r} = A\widetilde{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{b}$ および $\boldsymbol{s} = A\widetilde{\boldsymbol{y}} - \boldsymbol{e}$ をそれぞれの連立一次方程式の残差ベクトルとする。もし， $||\boldsymbol{s}||_\infty < 1$ ならば，不等式

$$||\widetilde{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{x}^*||_\infty \le \frac{||\widetilde{\boldsymbol{y}}||_\infty \cdot ||\boldsymbol{r}||_\infty}{1 - ||\boldsymbol{s}||_\infty} \tag{13}$$

が成り立つ。

証明 $\widetilde{\boldsymbol{x}}$ を $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ の数値解， $\boldsymbol{r} = A\widetilde{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{b}$ を残差ベクトルとする。そのとき，

$$\begin{aligned} ||\widetilde{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{x}^*||_\infty &= ||\widetilde{\boldsymbol{x}} - A^{-1}\boldsymbol{b}||_\infty = ||A^{-1}(A\widetilde{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{b})||_\infty \\ &\le ||A^{-1}||_\infty \cdot ||\boldsymbol{r}||_\infty \end{aligned} \tag{14}$$

であるから，式 (3), (14) より

$$||\widetilde{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{x}^*||_\infty \le ||A^{-1}||_\infty \cdot ||\boldsymbol{r}||_\infty \le \frac{||\widetilde{\boldsymbol{y}}||_\infty \cdot ||\boldsymbol{r}||_\infty}{1 - ||\boldsymbol{s}||_\infty} \tag{15}$$

が導かれ，これは所望の結果である。 □

定理 2 に基づき，数値解と厳密解の誤差 $||\widetilde{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{x}^*||_\infty$ の上界を求めるアルゴリズムを図 3 に示す。

```
function  e_abs = errabs(A, b, x~, overline(a_invinf));
setround(down);
underline(r) = A x~ - b;                      % lower bound for A x~ - b
setround(up);
overline(r) = A x~ - b;                       % upper bound for A x~ - b
r^ = max(abs(underline(r)), abs(overline(r)));  % r^_i = max{|underline(r)_i|, |overline(r)_i|}
overline(r_norm) = norm(r^, ∞);                % upper bound of ||A x~ - b||_∞
e_abs = overline(a_invinf) * overline(r_norm); % ||x~ - x*||_∞ <= e_abs
```

図 3: $||\widetilde{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{x}^*||_\infty$ の上界を求めるアルゴリズム

図 3 に示すアルゴリズムが終了したとき，以下の不等式が成立する：

$$||\widetilde{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{x}^*||_\infty \le e_{\text{abs}}$$

次に，数値解と厳密解の相対誤差の上界を求めるための定理を以下に示す（証明は省略する）。

定理 3 A を $n \times n$ 実行列， $\boldsymbol{x}$, $\boldsymbol{b}$ を n 次の実ベクトルとする。さらに，連立一次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ の厳密解を $\boldsymbol{x}^*$ ，数値解を $\widetilde{\boldsymbol{x}}$ とする。もし， $||\widetilde{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{x}^*||_\infty \le e_{\text{abs}} < ||\widetilde{\boldsymbol{x}}||_\infty$ ならば，不等式

$$\frac{||\widetilde{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{x}^*||_\infty}{||\boldsymbol{x}^*||_\infty} \le \frac{e_{\text{abs}}}{||\widetilde{\boldsymbol{x}}||_\infty - e_{\text{abs}}} \tag{16}$$

が成り立つ。

数値解と厳密解の相対誤差 $||\widetilde{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{x}^*||_\infty / ||\boldsymbol{x}^*||_\infty$ の上界を計算するアルゴリズムを図 4 に示す。このアルゴリズムが成功裏（$\underline{e} > 0$）に終了したとき，以下の不等式が成立する：

$$\frac{||\widetilde{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{x}^*||_\infty}{||\boldsymbol{x}^*||_\infty} \le e_{\text{rel}}$$

4.2 反復解法による高速精度保証

係数行列が疎である連立一次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ を， A の疎性を有効に使って解くために，反復解法がよく用いられる。ところで，式 (3)

$$||A^{-1}||_\infty \le \frac{||\widetilde{\boldsymbol{y}}||_\infty}{1 - ||\boldsymbol{s}||_\infty}$$

から， $||\boldsymbol{s}||_\infty$ は 1 より小さくなければならないが， $||\boldsymbol{r}||_\infty$ よりも相当大きくて良い（たとえば， $||\boldsymbol{r}||_\infty = 10^{-10}$ に対し $||\boldsymbol{s}||_\infty = 10^{-2}$ ）。なぜなら， $||\boldsymbol{s}||_\infty$ は $1/(1 - ||\boldsymbol{s}||_\infty)$ という

```
function  e_rel = errrel(x̃, e_abs);
x_norm = norm(x̃, ∞);                % ||x̃||_∞
setround(down);
e̲ = x_norm − e_abs;
if  e̲ > 0;                          % ||x̃||_∞ − e_abs > 0 ?
  setround(up);
  e_rel = e_abs/e̲;                  % ||x̃ − x*||_∞/||x*||_∞ ≤ e_rel
else;
  print('verification failed');
end;
```

図 4: $||\tilde{\boldsymbol{x}}-\boldsymbol{x}^*||_\infty/||\boldsymbol{x}^*||_\infty$ の上界を求めるアルゴリズム

形で $||A^{-1}||_\infty$ の推定に影響を与えるためである。したがって，定理 2 における連立一次方程式 $A\boldsymbol{y}=\boldsymbol{e}$ の数値解 $\tilde{\boldsymbol{y}}$ の精度が多少悪くても，$||A^{-1}||_\infty$ の推定への影響は少ない。かくして，連立一次方程式 $A\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ の数値解の計算よりも，その数値解の精度保証のほうが相当速いことを期待できる。

5 条件数の包み込み

この章では，単調な行列の条件数を保証するアルゴリズムを示す。実正方行列 A に対し，p-ノルム $(p=1,2,\cdots,\infty)$ での条件数は

$$\mathrm{cond}_p(A)=||A||_p\cdot||A^{-1}||_p \tag{17}$$

によって定義される。$||A||_1$ と $||A||_\infty$ の関係から，

$$||A||_1=||A^T||_\infty\ ,\quad ||A^{-1}||_1=||A^{-T}||_\infty \tag{18}$$

であり，すなわち

$$\mathrm{cond}_1(A)=\mathrm{cond}_\infty(A^T) \tag{19}$$

が成り立つことがよく知られている。

さて，丸め誤差も含めた非常にシャープな $\mathrm{cond}_\infty(A)$ の包み込みを計算するアルゴリズムを以下の図 5 に示す。

ここで，命令 $\mathbf{norm}(A,\infty)$ は $||A||_\infty$ を計算する。図 5 で示すアルゴリズムが成功裏に終了した場合，以下の不等式が成立する：

$$\underline{c_{\mathrm{inf}}}\le\mathrm{cond}_\infty(A)\le\overline{c_{\mathrm{inf}}}$$

式 (19) から，連立一次方程式 $A\boldsymbol{y}=\boldsymbol{e}$ （但し，$\boldsymbol{e}=(1,1,...,1)^T$ ）を解く代わりに $A^T\boldsymbol{y}=\boldsymbol{e}$ を解くことによって，$\mathrm{cond}_1(A)$ の包み込みも得られることは明らかである。

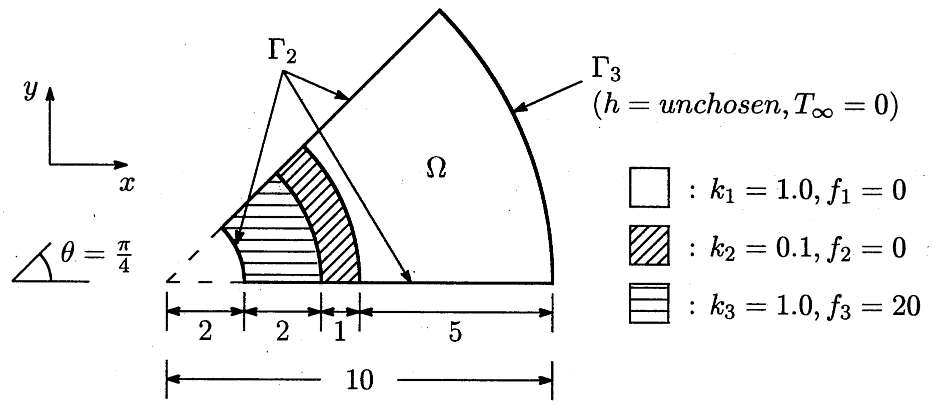
$\textbf{function} \;\; [\underline{c_{\mathrm{inf}}}, \overline{c_{\mathrm{inf}}}] = \textbf{condinf}(A, \widetilde{\boldsymbol{y}});$
$[\underline{a_{\mathrm{invinf}}}, \overline{a_{\mathrm{invinf}}}] = \textbf{ainvinf}(A, \widetilde{\boldsymbol{y}});$
$\textbf{setround}(down);$
$\underline{a_{\mathrm{inf}}} = \textbf{norm}(A, \infty);$ % lower bound of $||A||_\infty$
$\underline{c_{\mathrm{inf}}} = \underline{a_{\mathrm{inf}}} * \underline{a_{\mathrm{invinf}}};$ % lower bound of $\mathrm{cond}_\infty(A)$
$\textbf{setround}(up);$
$\overline{a_{\mathrm{inf}}} = \textbf{norm}(A, \infty);$ % upper bound of $||A||_\infty$
$\overline{c_{\mathrm{inf}}} = \overline{a_{\mathrm{inf}}} * \overline{a_{\mathrm{invinf}}};$ % upper bound of $\mathrm{cond}_\infty(A)$

図 5: $\mathrm{cond}_\infty(A)$ の厳密な包み込みアルゴリズム

6 数値実験

この章では，提案する精度保証方式が一般的な反復解法を使ってインプリメントできることを示す。数値実験を行い，その結果についても報告する。

提案方式を評価するために，我々は物理学の熱伝導や電磁の問題においてよく現れる拡散方程式について考える。拡散方程式を差分法あるいは有限要素法によって連立一次方程式に離散化した場合，その係数行列は単調になることが知られている。特に，差分法を用いた場合，その係数行列は M-行列となることが知られている。単調な行列の集合は M-行列の集合を含むので，ここでは拡散方程式を有限要素法によって離散化して得られた，係数行列が単調である連立一次方程式を考えることにする。そこで，図 6 に示される 2 次元熱伝導モデルについて考える。



$$\begin{cases} \mathrm{div}\{-k \cdot \mathrm{grad}(u)\} = f & \text{in } \Omega \\ \{-k \cdot \mathrm{grad}(u)\} \times \boldsymbol{n} = 0 & \text{on } \Gamma_2 \\ \{-k \cdot \mathrm{grad}(u)\} \times \boldsymbol{n} = h(u - T_\infty) & \text{on } \Gamma_3 \end{cases}$$

図 6: 評価モデル

今回は，$k_1 = 1.0$, $f_1 = 0$, $k_2 = 0.1$, $f_2 = 0$, $k_3 = 1.0$, $f_3 = 20$ および $T_\infty = 0$ と決める。このモデルを有限要素法（三角形 1 次要素）により連立一次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ に離散化する。$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ と $A\boldsymbol{y} = \boldsymbol{e}$ に対する反復解法として両方に MICCG (Modified Incomplete Cholesky Conjugate Gradient) 法を採用し，反復停止条件はそれぞれ $\|A\tilde{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{b}\|_2/\|\boldsymbol{b}\|_2 < 10^{-12}$ ，$\|A\tilde{\boldsymbol{y}} - \boldsymbol{e}\|_2/\|\boldsymbol{e}\|_2 < 10^{-3}$ とする。計算には HITACHI SR8000（1 ノード; 8 プロセッサ, 12GFLOPS, 共有メモリ）を用い，コンパイラには最適化 C（丸め制御部分のみ）および最適化 FORTRAN77/90 を使った。また，浮動小数点演算は IEEE 754 の規格に従っており，倍精度で行った（確認のため，4 倍精度も用いた）。

次のような 2 つのケースを扱うことにする：

	節点数 (n)	熱伝達係数 (h)
Case 1:	40,000 ∼ 1,000,000	1.0（固定）
Case 2:	90,000（固定）	$1.0 \sim 1.0 \times 10^{-8}$

表 1, 2 に，$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ の数値解の保証相対精度と 4 倍精度を使用して求めた解を真の解とみなした場合の数値解の相対精度を示す。さらに，これらの表に，数値解の計算時間とその精度保証時間も示しておく。

表 1: 数値解の精度保証の結果 (**Case 1**)

節点数 (n)	数値解の計算時間 (sec)	精度保証時間 (sec)	保証相対精度	真の相対精度
40,000	1.0	0.6	2.2×10^{-9}	$8.8\cdots \times 10^{-14}$
160,000	6.8	3.5	1.5×10^{-8}	$5.7\cdots \times 10^{-14}$
360,000	21.6	10.6	4.3×10^{-8}	$8.4\cdots \times 10^{-15}$
640,000	55.3	24.8	8.0×10^{-8}	$2.7\cdots \times 10^{-14}$
1,000,000	106.2	47.5	1.5×10^{-7}	$5.4\cdots \times 10^{-14}$

表 2: 数値解の精度保証の結果 (**Case 2**)

熱伝達係数 (h)	数値解の計算時間 (sec)	精度保証時間 (sec)	保証相対精度	真の相対精度
1.0	3.1	1.6	6.4×10^{-9}	$5.5\cdots \times 10^{-14}$
1.0×10^{-2}	3.7	2.1	4.8×10^{-8}	$2.5\cdots \times 10^{-13}$
1.0×10^{-4}	4.7	2.5	3.4×10^{-6}	$2.8\cdots \times 10^{-11}$
1.0×10^{-6}	5.6	2.8	5.0×10^{-4}	$9.8\cdots \times 10^{-10}$
1.0×10^{-8}	7.0	3.1	5.7×10^{-2}	$4.6\cdots \times 10^{-7}$

これらの結果は，どの場合においても，数値解の計算時間よりもそれを精度保証する時間のほうが短い，つまり，数値解の計算よりも，その精度保証のほうが速いことを示している。また，数値解の保証相対精度が上限として真の相対精度を押さえ込めていることも分かる。

さらに，表 3, 4 に，条件数 $\mathrm{cond}_\infty(A)$ の包み込みの結果を示す（4 倍精度を使用して求めた条件数を真の条件数とする）。

これらの結果から，条件数 $\mathrm{cond}_\infty(A)$ の非常にシャープな包み込みを得られたことが分かる。同様に，$\mathrm{cond}_1(A)$ も非常にシャープに包み込むことができるであろう。

表 3: 条件数の包み込みの結果 (**Case 1**)

節点数 (n)	$\mathrm{cond}_\infty(A)$ の存在範囲	真の $\mathrm{cond}_\infty(A)$
40,000	$[2.49, 2.56] \times 10^6$	$2.52\cdots \times 10^6$
160,000	$[1.02, 1.06] \times 10^7$	$1.03\cdots \times 10^7$
360,000	$[2.31, 2.42] \times 10^7$	$2.36\cdots \times 10^7$
640,000	$[4.15, 4.29] \times 10^7$	$4.22\cdots \times 10^7$
1,000,000	$[6.45, 6.79] \times 10^7$	$6.61\cdots \times 10^7$

表 4: 条件数の包み込みの結果 (**Case 2**)

熱伝達係数 (h)	$\mathrm{cond}_\infty(A)$ の存在範囲	真の $\mathrm{cond}_\infty(A)$
1.0	$[5.93, 6.01] \times 10^5$	$5.97\cdots \times 10^5$
1.0×10^{-2}	$[3.40, 3.48] \times 10^7$	$3.43\cdots \times 10^7$
1.0×10^{-4}	$[2.87, 2.92] \times 10^9$	$2.89\cdots \times 10^9$
1.0×10^{-6}	$[2.86, 2.92] \times 10^{11}$	$2.88\cdots \times 10^{11}$
1.0×10^{-8}	$[2.74, 3.05] \times 10^{13}$	$2.88\cdots \times 10^{13}$

7 結言

我々は，係数行列が単調かつ疎であるような連立一次方程式に対し，その数値解の精度を検証する方法を提案した。提案方式では，反復解法を利用するので A^{-1} の計算やLU分解を必要としない。数値実験により，大規模な行列や条件数が大きいという意味で性質の悪い行列にも適用できることを示し，さらに，厳密解に対する数値解の誤差限界を，数値解の計算よりも高速に求めることができることも示した。さらに，高速なアルゴリズムによって，単調な行列の条件数を精度保証付きで求められることも報告した。数値解の保証精度を真の精度にできるだけ近づけることが，今後の課題である。

参考文献

[1] Shin'ichi Oishi and Siegfried M. Rump: Fast Verification of Solutions of Matrix Equations, submitted to *Numer. Math.*.

[2] Shin'ichi Oishi: Fast Enclosure of Matrix Eigenvalues and Singular Values via Rounding Mode Controlled Computation, to appear in *Linear Algebra and Its Applications*, 2000.

[3] 大石 進一: 精度保証付き数値計算, コロナ社, 東京, 2000.

[4] O. Axelsson: *Iterative Solution Methods*, Cambridge University Press, Cambridge, 1994.

[5] G. H. Golub and C. F. Van Loan: *Matrix Computations (Third Edition)*, The Johns Hopkins University Press, Baltimore and London, 1996.