

精度保証付き科学技術計算用ソフトの現状と動向

中尾 充宏 (九州大学数理学研究院), 渡部 善隆 (九州大学情報基盤センター),
皆本 晃弥 *(佐賀大学理工学部)

minamoto@is.saga-u.ac.jp

1 はじめに

本講演では, 基本的演算 (区間演算, 関数値の精度保証), 線形・非線形方程式の解法, 無限次元問題 (微分方程式) などに現れる, 精度保証の実現技術 (数学的原理) を概観し, そのために必要で, 現在サポートされている主なソフトウェア (PROFIL, INTLAB, Fortran-90 と INTLIB etc.) の特徴を概説し, その使用例をあげる. 精度保証の有効性とその適応領域をなるべく広い範囲 (産業界から純粋数学まで) の聴衆にわかりやすく解説し, 今後の動向を探る.

2 精度保証付き数値計算のアイデア

ここでは IEEE754 規格に基づいた浮動小数点基本演算ができるコンピュータを仮定し, その上での精度保証という立場で話を進める. 一般に精度保証付き数値計算を実現する場合の基本的なアプローチを簡単に述べると次のようになる.

関数値評価 近似値+誤差評価

線形問題 近似解+丸めモード操作

非線形問題 近似解+縮小定式化*+区間演算+不動点定理

ここで, 縮小定式化とは, 問題の解がその近傍で縮小写像の不動点となるような形に変換すること (たとえば Newton-type に変形することなど). なお, 微分方程式の解など無限次元問題の解の精度保証には, 無限次元と有限次元の間のギャップを埋めるための操作 (何らかの打ち切り誤差評価) が必要となる. また, 精度保証付き数値計算には不動点定理が重要な役割を果たすことが多く, その定理の仮定を満たす集合を構成する形で精度保証がなされる場合が多い.

3 区間演算ソフトウェア

精度保証付き数値計算で必要となる区間演算をサポートする代表的なソフトウェアとしては次のようなものがある.

INTLAB Matlab ツールボックス

<http://www.ti3.tu-harburg.de/~rump/intlab/index.html>

INTLIB Fortran90 用モジュール

ftp://interval.louisiana.edu/pub/interval_math/Fortran_90_software/

PROFIL C++クラスライブラリ



<http://www.ti3.tu-harburg.de/Software/PROFILEnglisch.html>

Sun Forte Developer 区間演算をサポートした C++, Fortran95 コンパイラ

<http://www.sun.co.jp/forte/>

これらのソフトウェアを使うと、算術式・行列計算・初等関数の精度保証付き数値計算などは、通常の倍精度型演算と同じ感覚でプログラミングが可能である。特に、PROFIL および INTLAB を使うと連立 1 次方程式の解も精度保証付きで求めることができる。

INTLAB の使用例

```
>> n=10;A=2*rand(n)-1;b=rand(n,1);X=verifylss(A,b);   
>> format long; [X.inf, X.sup]   
ans =  
-5.52828098734908 -5.52828098734888  
-11.83086434894861 -11.83086434894818  
-14.28903769808848 -14.28903769808798  
-3.86471674499362 -3.86471674499349  
-7.57711928215988 -7.57711928215962  
1.76924434376284 1.76924434376290  
-12.90097723641489 -12.90097723641443  
1.60691802643779 1.60691802643784  
6.96041980652485 6.96041980652508  
0.09405582793844 0.09405582793844
```

なお、浮動小数点規格 IEEE754 では数学関数に関する規定がないため、上記ソフトウェアでは基本的な数学関数は独自に実装しており、その結果、数学関数を使用すると実行速度が低下する。

4 今後の動向

有限次元線形問題に現れる問題に対する精度保証付き数値計算は誤差評価と丸め制御により高速に行えることが明らかになってきた。これらの問題については、実用段階に入ったといえ、未公開ではあるが早稲田大学の石進一先生による Slab を使えば、簡単に数値線形代数に現れる問題の精度保証を行うことができる。

とはいえ、精度保証付き数値計算が実用的になるには初等関数に関する高速精度保証といった基本的な問題から解決しなければならないというのも事実である。また、非線形問題、特に、非線形偏微分方程式に対しては統一的な解法がないため、それぞれの問題に対して各個撃破というアプローチを取らざるをえない。そのような状況を反映してか、今のところ多くのソフトウェアは単に区間演算をサポートしているというだけに留まっている状態といえ、実用的なアルゴリズムを多く実装したソフトウェアを開発する必要があるといえる。

参考文献

- [1] 皆本晃弥, IEEE754 と数値計算-浮動小数点演算の特徴とは?-, 九州大学情報基盤センター広報, Vol.2, No.1, 2002年, pp.63-84.
- [2] 大石 進一, 数値計算インタプリタを作ろう, <http://www.oishi.info.waseda.ac.jp/~oishi/interpreter/interpreter.htm>