数理解析研究所講究録 1441 巻 2005 年 165-172

多倍長計算を適用した精度保証数値計算

徳島大学 工学部 坂口 秀雄 (Hideo Sakaguchi)
Faculty of Engineering, University of Tokushima
九州大学 情報基盤センター 渡部 善隆 (Yoshitaka Watanabe)
Computing and Communications Center, Kyushu University
徳島大学 工学部 今井 仁司 (Hitoshi IMAI)
Faculty of Engineering, University of Tokushima

1 はじめに

最近のコンピューターやネットワーク技術の発展によって，強力なコンピューター利用環境を容易に得ることができる．高速なネットワークに繋がった様々なPCで構成されるPCクラスターによって，それは実現される．PCにおいて一般的なオペレーティングシステムはLinuxである．このLinuxをインストールする際にPVM[4]は自動的にインストールされ，並列計算を行う環境を得られる．このような環境を使うことで，大規模な数値計算を簡単に行うことが可能である．

このような背景から，我々は,スペクトル選点法[2]と多倍長計算[11]を用いたある種の数値計算を行った．この数値計算は任意に誤差を小さくすることを可能とする[10]．一つの成功例として逆問題に対して直接的に数値計算を行ったものがある[7, 8, 9]．第一種積分方程式を正則化せずに二通りの方法で解いた．一つ目が，積分に対して離散化を行う．これは，一般的なアプローチであるが，数値解が厳密解にゆっくりと収束する[7, 8]．二つ目は，未知の解に対して離散化を行うが，このアプローチは一般的ではない．しかし，スペクトル精度が得られることは驚きである[9]．逆問題を離散化するとたちが悪くなることはよく知られている．それで，収束スピードの違いを調べるために精度保障付き数値計算が必要になる．このことが，我々の動機である．離散化された問題はテスト問題として後で述べる．

我々は精度保障付き数値計算をPCクラスターを用いた並列計算環境で行った．これは，多倍長計算が多くの計算機リソースを必要とするからである．多くの多倍長計算用のライブラリー（FMLIB[16], exflib[3]など）は，webサイトからダウンロードしたあと簡単利用することができる．いくつかのライブラリー（MPFI[5, 15]など）は多倍長精度で区間演算を実現している．並列計算はPVMやMPI[6]などを用いること行うことが可能である．いくつかのライブラリー（ScaLAPACK[1]など）はすでに, 並列計算が可能になっている．このように，並列化した精度保障付き数値計算を行うには多くの選択肢と組み合わせがある．しかしながら，簡単に利用できたり,PCクラスターでの利用には制限がある．もし，Linuxがインストールされていれば，PVMも自動的にインストールされている．FMLIBはソースファイルで公開されているので，インストールはとても簡単である．したがって，我々は連立一次方程式を解くための並列化した精度保障付き数値計算のための多倍長精度の区間演算ライブラリーをFMLIBとPVMを利用して開発した．連立一次方程式を解くことは，微分方程式

や積分方程式の数値計算において本質的なことである．さらに，これらの方程式が非線形であれば，ニュートン法を用いて繰り返し解くことになる．我々のライブラリーはPCクラスターに適しており，我々はライブラリーを逆問題や他の問題の離散化した問題に適用した．

2 テスト問題

我々はテスト問題として以下の連立一次方程式を考える．

$$Au = b,$$

$$A = (a_{i,j}),\ u = (u_i),\ b = (b_i), \quad i, j = 1, 2, \cdots, M.$$

テスト問題 1 典型的なたちが悪い例として A が以下の Hilbert 行列の場合．

$$a_{i,j} = \frac{1}{i+j-1}, \quad i, j = 1, 2, \cdots, M, \quad b = A(1, \cdots, 1)^T.$$

テスト問題 2 $M = N + 1$. たちの良い例として A が以下のように与えられる場合．

$$a_{1,1} = -a_{1,N+1} = \frac{2N^2+1}{6}, \quad a_{1,j+1} = \frac{(-1)^j}{\sin\frac{j\pi}{2N}\sin\frac{j\pi}{2N}}, \quad j = 1, 2, \cdots, N-1,$$

$$a_{i+1,j+1} = \begin{cases} \dfrac{2}{3Nc_j}\displaystyle\sum_{k=2}^{N}\frac{(-1)^k}{c_k}k^2(k^2-1)\cos\frac{kj\pi}{N}, & i = N,\ j = 1, 2, \cdots, N, \\ -\dfrac{(-1)^{i+j}}{2c_j\sin^2\frac{i\pi}{N}}\left\{\dfrac{\cos\frac{i\pi}{N}}{\sin\frac{(i+j)\pi}{2N}\sin\frac{(i-j)\pi}{2N}} + \dfrac{1}{\sin^2\frac{(i+j)\pi}{2N}} + \dfrac{1}{\sin^2\frac{(i-j)\pi}{2N}}\right\}, & \\ \qquad i \neq j,\ i = 1, 2, \cdots, N-1,\ j = 1, 2, \cdots, N, & \\ -\dfrac{1}{2\sin^2\frac{i\pi}{N}}\left\{\dfrac{1+\cos^2\frac{i\pi}{N}}{\sin^2\frac{i\pi}{N}} + \dfrac{2N^2+1}{3}\right\}, & i = j = 1, 2, \cdots, N-1, \end{cases}$$

$$c_0 = c_N = 2, \quad c_j = 1, \quad j = 1, 2, \cdots, N-1, \quad b = A(0, -2, \cdots, -2)^T,$$

ここで, N はスペクトル選点法の次数とする．A は次の境界値問題を Chebyshev-Gauss-Lobatto 選点 $x_i = \cos\frac{i\pi}{N}$, $i = 0, 1, \cdots, N$ を用いたスペクトル選点法によって離散化して得られる行列である．

$$u_{xx}(x) = -2 \qquad \text{in } (-1,\ 1), \quad u(-1) = 0, \quad u_x(1) = 0$$

厳密解は $u(x) = -(x+1)(x-3)$ である．$N \geqq 2$ の場合, 離散化問題には打切り誤差は含まれない．したがって、大きな N に対して $Au = b$ の厳密解 u^{exac} は

$$u_{i+1}^{exac} = -(x_i + 1)(x_i - 3), \ i = 0, 1, \cdots, N$$

となる．このような適切な境界値問題に対して，厳密解が多項式でない場合，数値誤差は 1.46×10^{-4995} になる [10].

テスト問題 3 $M = N + 1$. A が以下のように与えられる場合.

$$a_{i+1,j+1} = \sum_{\substack{k=0 \\ k\neq 1}}^{N} \frac{2}{Nc_k c_j} e^{x_i y_j} \cos\frac{jk\pi}{N} \cdot \frac{1+(-1)^k}{1-k^2}, \quad i,\ j = 0, 1, \cdots, N,$$

$$x_i = y_i = \cos\frac{i\pi}{N},\ \ i = 0, 1, \cdots, N, \qquad b = A(1, \cdots, 1)^T$$

A は次の第一種積分方程式 [7, 8] を Chebyshev-Gauss-Lobatto 選点を用いたスペクトル選点法によって離散化して得られる行列である.

$$\int_{-1}^{1} e^{xy} u(y) dy = f(x)$$

ここで，$f(x)$ は与えられた関数である．この非適切な問題に対して，数値計算は成功している [7, 8]．しかしながら，数値解の収束性はとても遅くなっている.

テスト問題 4 $M = N + 1$. A が以下のように与えられる場合.

$$a_{i+1,j+1} = \sum_{k=0}^{N} \frac{2}{Nc_k c_j} T_k(y_j) I_{ki}, \quad i, j = 0,\ 1, \cdots,\ N,$$

$$I_{ki} = \int_{-1}^{1} e^{x_i y} T_k(y) dy = \begin{cases} e^{x_i}(d_{k,0} + d_{k,1} + \cdots + d_{k,k}) \\ \quad -e^{-x_i}(d_{k,0} - d_{k,1} + \cdots + (-1)^k d_{k,k}), & x_i \neq 0, \\ \quad 0\,, \qquad\qquad k = 1, \qquad x_i = 0, \\ \dfrac{1+(-1)^k}{1-k^2}\,, \qquad k \neq 1, \qquad x_i = 0, \end{cases}$$

$$T_k(y) = C_{k,0} + C_{k,1} y + C_{k,2} y^2 + \cdots + C_{k,k} y^k : k \text{ 次の Chebyshev 多項式},$$

$$d_{k,k} = \frac{1}{x_i} C_{k,k}, \quad d_{k,j} = \frac{C_{k,j} - (j+1) d_{k,j+1}}{x_i}, \quad j = k-1, k-2, \cdots, 1, 0,$$

$$b = A(0, -2, \cdots, -2)^T.$$

A はテスト問題 3 と同じ積分方程式から得られる行列であるが，Chebyshev-Gauss-Lobatto 選点を用いたスペクトル選点法の $u(y)$ に対する積分への適用の仕方が異なる [9]．この離散化法によって得られる数値解はとても早く収束する.

3 我々のライブラリーと数値計算結果

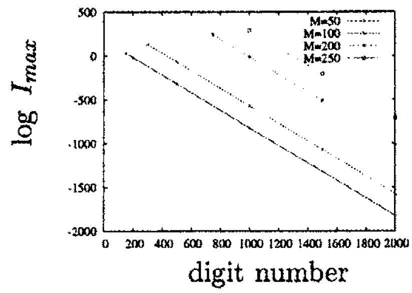
我々は連立一次方程式 ($Au = b$) を解くための精度保障付き数値計算に必要な区間演算ライブラリーを多倍長精度で開発した．我々のライブラリーはガウスの消去法を用いていて，反復法は用いていない．これは，行列 A の性質が分からなかったり，たちが悪かったりするためである．区間演算 [14] が我々のライブラリーの本質である．また，多倍長計算を行うために Fortran の多倍長パッケージである FMLIB を用いた．FMLIB では，浮動小数点数の丸めの方向を制御することが可能である．我々のライブラリーは適当な PC クラスターで並列計算を行えるように PVM を用いて並列化されている．

テスト問題 1-4 の我々のライブラリーを用いた数値計算結果はそれぞれ，図 1-4 で示す．ここで，I_{max}, err は次のように定義する．

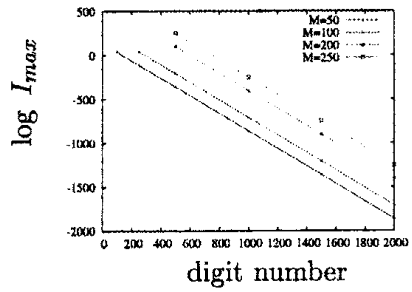
$$I_{max} = \max_{1 \le i \le M} |\underline{u}_i - \overline{u}_i|, \;\; \hat{u}_i = (\underline{u}_i,\ \overline{u}_i) \text{ in Figs. 1-4,}$$

$$err = \begin{cases} \displaystyle\max_{1 \le i \le M} |u_i - 1|, & \text{in Figs. 1, 2, 4,} \\ \displaystyle\max_{1 \le i \le M} |u_i - u_i^{exac}|, & \text{in Fig. 3,} \end{cases}$$

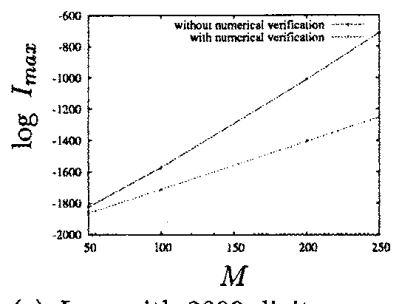
ここで，$\hat{u}_i$ は区間である．



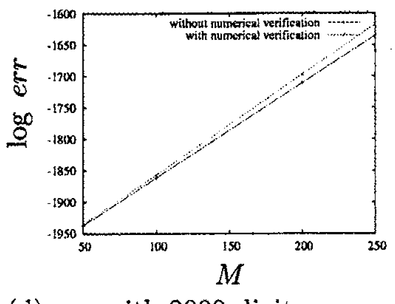
(a) I_{max} without numerical verification.



(b) I_{max} with numerical verification.

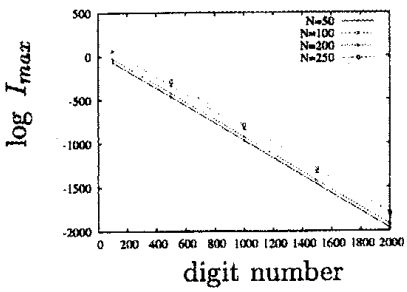


(c) I_{max} with 2000 digits.

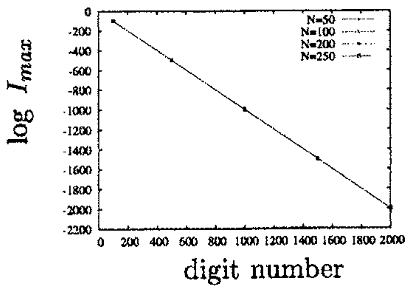


(d) err with 2000 digits.

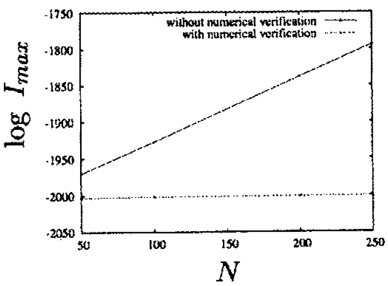
図 1. テスト問題 1 の数値計算結果



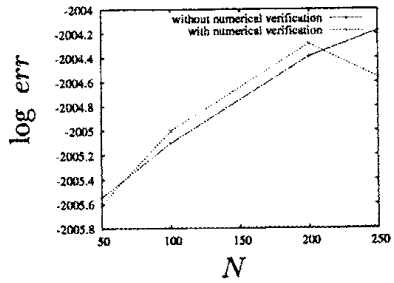
(a) I_{max} without numerical verification.



(b) I_{max} with numerical verification. (All lines coincide.)

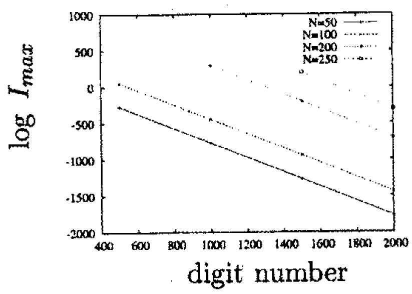


(c) I_{max} with 2000 digits.

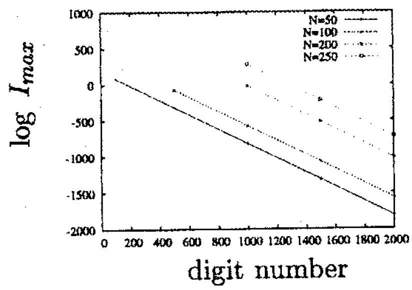


(d) err with 2000 digits.

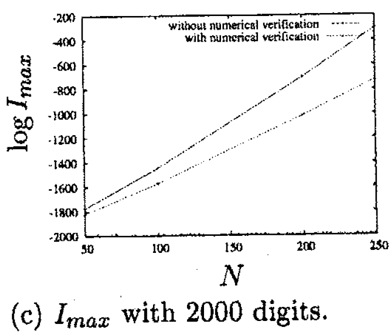
図 2. テスト問題２の数値計算結果



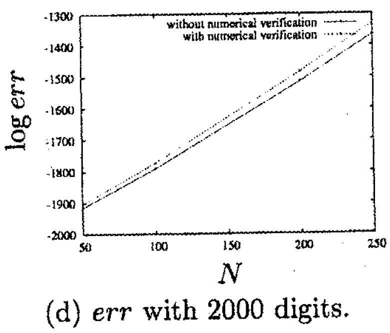
(a) I_{max} without numerical verification.



(b) I_{max} with numerical verification.

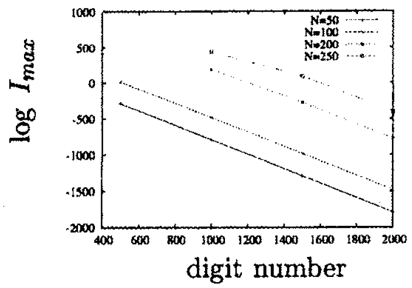


(c) I_{max} with 2000 digits.

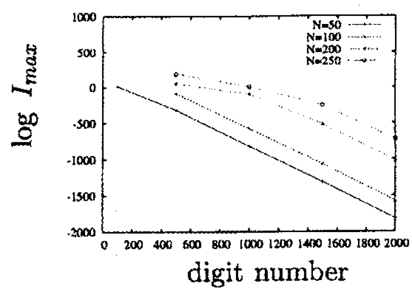


(d) err with 2000 digits.

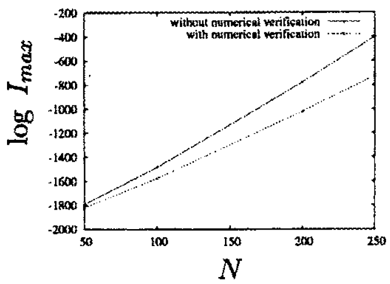
図 3. テスト問題３の数値計算結果



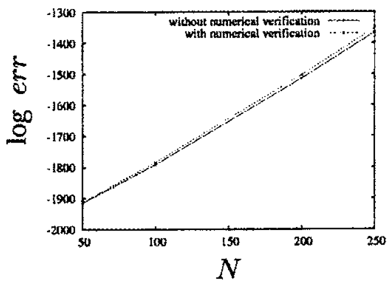
(a) I_{max} without numerical verification.



(b) I_{max} with numerical verification.



(c) I_{max} with 2000 digits.



(d) err with 2000 digits.

図 4．テスト問題 4 の数値計算結果

図 1(a),(b) は桁数を増やしたときに行列サイズに対して区間の幅 I_{max} は同じ指数で指数的に狭くなっていることを示している．図 1(a)-(c) は精度保障付き数値計算が正当であることを示している．図 1(d) は非区間の数値解の精度の振る舞いを示している．図 1(a)-(d) から行列がたちが悪いことがわかり，多倍長計算が必要であることがわかる．一方，図 2 はテスト問題 2 のたちの良さを示している．特に図 2(c) はこのことをよく表している．ここでもまた，精度保障す付き数値計算の正当性がわかる．図 3-4 は図 1 に似ている．このことは，テスト問題 3,4 がたちが悪いことと，精度保障付き数値計算の正当性も意味している．図 1(c), 2(c), 3(c), 4(c) は精度保障付き数値計算によって，行列のたちの悪さを測ることが可能であることを示している．図 3 と 4 はあまり異なってはいない．このことは，異なる離散化法がもとで数値解の収束スピードが異なることを意味している．もとの積分方程式の数値計算でスペクトル精度がでているにもかかわらず [9]，テスト問題 4 の行列がたちが悪いということは驚きである．行列の条件数を表 1-2 に示す．

表 1. Condition numbers with 2000 digits.

	M=50	M=100	M=200	M=250
Test problem 1	1.42×10^{74}	3.78×10^{150}	3.58×10^{303}	6.87×10^{380}

表 2. Condition numbers with 2000 digits.

	N=50	N=100	N=200	N=250
Test problem 2	3.26×10^{6}	7.24×10^{7}	1.62×10^{9}	4.42×10^{9}
Test problem 3	1.19×10^{95}	6.51×10^{218}	1.25×10^{496}	7.26×10^{643}
Test problem 4	4.59×10^{94}	1.82×10^{218}	2.51×10^{495}	1.31×10^{643}

並列計算の正当性を示すために数値実験を行った結果が図 5 である．ここで，time ratio = CPU time(non-PVM)/CPU time(PVM)．図 5 から並列計算が有効であることがわかる．しかしながら，利用した最大メモリーサイズが 1GB では，大きなサイズとはいえない．

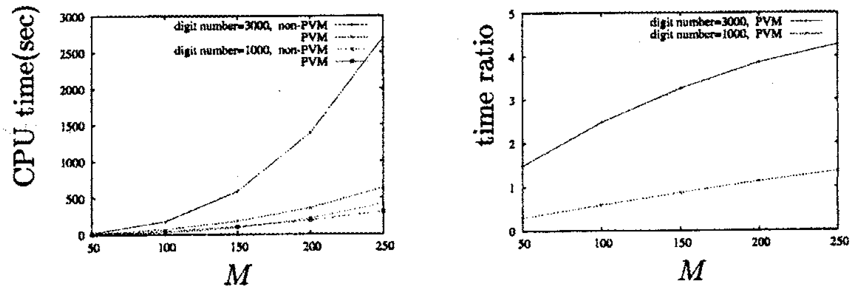


図 5. 精度保証付き数値計算を用いないテスト問題 1 の並列計算 (P4 3.2GHz×8)

多倍長計算が多くの計算機リソースを必要とするため，多倍長計算を用いた数値計算では並列計算は避けられない．それで，我々はテスト問題 1 に対して精度保障付き数値計算を用いずにメモリーサイズが 16GB(M = 900 and 5000 digit number) の大きなサイズの並列計算を行った．PVM(16 CPUs=P4 3.2GHz×8⊕Xeon 2.4GHz×2⊕Xeon 2.0GHz×6) を用いた際の計算時間は 48320 秒であった．

4 結論

我々は逆問題などのいくつかの数値計算を多倍長精度で行った．これは，このような数値計算に現れる連立一次方程式の行列がたちが悪いためである．精度保障付き数値計算はこれらの扱いにくい問題を研究するのに重要な役割を果たしているが，多倍長計算を行わなければならない．多倍長計算は多くの計算機リソースを必要とするが，PC クラスターを用いることで，簡単にそのリソースを得ることが出来る．したがって，我々は連立一次方程式に対する並列化された精度保障付き数値計算のための多倍長精度の区間演算ライブラリーを開発した．我々のライブラリーは PVM と FMLIB を元にしているので，PC クラスターには都合がよい．数値計算結果から我々のライブラリーが正当であることがわかる．

謝辞

なお、本研究の一部は、科学研究費補助金 (課題番号 15204007, 16340024, 16340029) の支援を受けて行ったものである。

参考文献

[1] L. S. Blackfort, J. Choi, A. Cleary, E. D'Azevedo, J. Demmel, I. Dhillon, J. Dongarra, S. Hammarling, G. Henry, A. Petitet, K. Stanley, D. Walker, and R. C. Whaley, ScaLAPACK Users' Guide, SIAM, Philadelphia, 1997.

[2] C. Canuto, Y. M. Hussaini, A. Quarteroni, A. T. Zang, Spectral Methods in Fluid Dynamics, Springer-Verlag, 1988.

[3] H. Fujiwara, Numerical Method for Integral Equation of the First Kind under Multiple-Precision Arithmetic, Theoret. Appl. Mech. Japan 52 (2003) 193-203.

[4] A. Geist, A. Beguelin, J. Dongarra, W. Jiang, R. Manchek, V. Sunderam, PVM: Parallel Virtual Machine, A Users' Guide and Tutorial for Networked Parallel Computing, Scientific and Engineering Computation, The MIT Press, Cambridge, 1994.

[5] M. Grimmer, K. Petras, N. Revol, Multiple Precision Interval Packages: Comparing Different Approaches, Numerical Software with Result Verification, Lecture Notes in Computer Science, 2991 (2004) 64-90.

[6] W. Gropp, E. Lusk, A. Skjellum, Using MPI: Portable Parallel Programming with the Message-Passing Interface second edition, The MIT Press, Cambridge, 1999.

[7] H. Imai, T. Takeuchi, Direct Simulation of an Integral of the First Kind, in: Y.-C. Hon, M. Yamamoto, J. Cheng, J.-Y. Lee (Eds.), Proceedings for International Conference on Inverse Problems Recent Developments in Theories and Numerics, World Scientific, Singapore, 2003, 247-254.

[8] H. Imai, T. Takeuchi, Some advanced applications of the spectral collocation method, GAKUTO International Series. Mathematical Sciences and Applications 17 (2001) 323-335.

[9] H. Imai, T. Takeuchi, H. Fujiwara, Y. Iso, Direct numerical computation of integral equations of the first kind by IPNS, in preparation.

[10] H. Imai, T. Takeuchi, M. Kushida, On Numerical Simulation of Partial Differential Equations in Infinite Precision, Adv. Math. Sci. Appl. 9 (2) (1999) 1007-1016.

[11] D. E. Knuth, The Art of Computer Programming, Addison-Wesley, 1981.

[12] M. T. Nakao, Numerical Verification Methods for Solutinos of Ordinary and Partial Differential Equations, International Workshops on Numerical Methods and Verification of Solutions, and on Numerical Functional Analysis, Numer. Funct. Anal. Optim. 22 (3-4) (2001) 321-356.

[13] M. T. Nakao, N. Yamamoto, Numerical verification, Nippon Hyoronsha, Tokyo, 1998 (in Japanese).

[14] S. Oishi, Verifed Numerical Computation, CORONA PUBLISHING CO., Tokyo, 2000 (in Japanese).

[15] N. Revol, F.Rouillier, Motivations for an arbitrary precision interval arithmetic and the MPFI library, Reliab. Comput. 11 (2005) 1-16.

[16] D. M. Smith, A FORTRAN Package For Floating-Point Multiple-Precision Arithmetic, ACM Trans. Math. Software 17 (1991) 273-283.