

C++11 を用いた精度保証付き行列計算ライブラリ の構築について

東洋大 情報連携

日大 生産工

日大 生産工

○関根 晃太

山崎 憲

内田 暁

1 はじめに

現在の計算機は実数を IEEE 754 で定められた浮動小数点数に近似して演算を行う。また、浮動小数点数同士の演算結果も浮動小数点数で表せない場合、切り捨てや切り上げによって近似することで浮動小数点数にする。この誤差を丸め誤差という。そのため、浮動小数点数の演算は非常に高速である反面、演算を経て得られた結果は丸め誤差を含む近似値となる。

丸め誤差の他にも数値計算を行う上では離散化誤差や打ち切り誤差なども発生する。このように計算機で得られた結果は必ずしも正しいわけではない。そのために近似値がどの程度正しい結果を得ているのか確かめる手段が必要である。

誤差が含まれた近似値がどの程度正しい結果を得ているのか確かめる手段として精度保証付き数値計算法がある。精度保証付き数値計算とは、連立一次方程式をはじめとした固有値問題、積分、微分方程式などの解きたい問題の真の解と近似解に対し、数学的に厳密な誤差の上界を得る手法である。そのため、近似解の誤差を検討するだけでなく、数学の証明の道具として利用することも可能である。

しかし、精度保証付き数値計算を実装することは、数値計算のみの知識に限らず、コンピュータの丸めの制御から数学的な知識まで必要になるため、気軽には一般ユーザーが使えない。そこで、一般ユーザーが気軽に利用できるように開発された精度保証付き数値計算ライブラリが必要となる。

現在ある精度保証付き数値計算ライブラリは例えば

・ Intlab: MATLAB, 有料

- doubleにおける最適化された行列計算
- 連立一次方程式, 固有値問題
- 自動微分, 数値積分など

・ kvライブラリ: C++, 無料

- テンプレートをを用いた様々な型の演算
- 自動微分, 数値積分
- 常微分方程式など

などがある。その上で、新しいライブラリを構築する意義は以下の三点である:

- (1) 様々な型で行列計算, 連立一次方程式, 固有値問題を扱えるようにする
- (2) double型は最適化されたBLAS, LAPACKを利用する
- (3) 上記を変数の型のみの変更で、切り替えが可能にする

これらを達成することにより今まではライブラリ化されていない偏微分方程式の解に対する精度保証付き数値計算も実装可能になる。

本発表では上記を達成した「VCPライブラリ (Verified Computation for Partial differential equation)」を提供する。VCPライブラリはkvライブラリをベースに、C++言語を用いて(1)-(3)を実現している。VCPライブラリのリリースは <http://verified.computation.jp> を参照されたい。

2 matrixクラスの設計

matrixクラスは2つのテンプレート引数 T と P を必要とし

```
main.cpp
vcp::matrix< T, P > A, B;
```

のように行列用の変数AとBを宣言する。 T には行列の要素の型、 P には行列演算に関する

Design of Linear Algebra Library with Guaranteed Accuracy using C++11

Kouta SEKINE, Ken YAMAZAKI, and Akira UCHIDA

アルゴリズムを定義したクラス(ポリシー)を与える。matrixクラス

```
matrix.hpp
class matrix : protected _P
```

のようにポリシー_Pを継承して作成される。そのため、ポリシー_Pがある決められた規則に基づくメソッドを持つように作成すれば、ユーザーは「ポリシーの型名」と「matrix型の使い方」さえ理解すれば、自由に「型」、「アルゴリズム」、「精度保証の有無」などが選択可能になる(図1)。

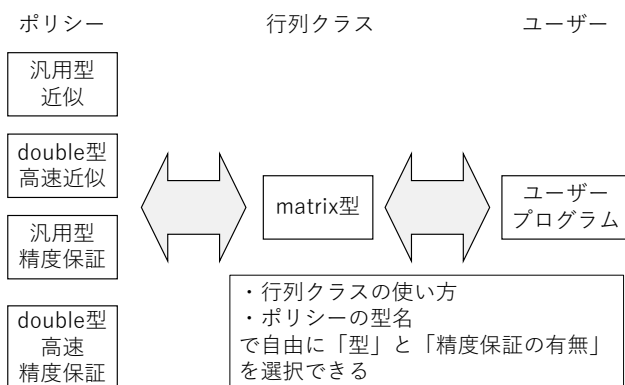


図1. matrix型の設計思想

3 VCPライブラリのポリシークラス

現在、VCPライブラリで提供しているポリシークラスは以下の4つである。

- ・ mats<_T>
 - _T型の近似汎用型ポリシー
- ・ pdblas
 - double型の高速近似ポリシー
 - BLAS, LAPACKが必要
- ・ imats<_T>
 - _T型の精度保証汎用型ポリシー
 - kvライブラリのinterval型が必要
- ・ pidblas
 - double型の高速精度保証ポリシー
 - LAPACKと丸め変更可能なBLASが必要
 - kvライブラリのinterval型が必要

例えば、

```
main.cpp
using namespace kv;
using namespace vcp;
matrix< double, mats<double> > A, B;
matrix< interval<double>, pidblas > A1, B1
```

のように変数を宣言することで、変数ごとに使用するアルゴリズムを変更できる。

4 VCPライブラリの使用例

VCPライブラリを用いて連立一次方程式の解を求めるプログラムを記述すると以下のようになる：

```
main.cpp
using namespace std;
using namespace vcp;
int n = 100;
matrix< (T), (P) > A, b, x; // (T)と(P)は置換
A.rand(n, n) // n×nの乱数行列Aを生成
b.ones(n, 1) // n×1の全要素1のベクトルb
b = A*b // 行列-ベクトル積
x = lss(A, b) // Ax = bを満たすxを求める
cout << x(0) << endl; //xの第1成分を表示
```

ここで、(T)と(P)を近似のポリシーを利用すると近似解xが求められ、精度保証付きのポリシーを利用すると同じプログラムのまま精度保証付きの解xが求められる。また、kvライブラリに入っているdd型やmpfr型を利用することで、高精度な近似解や精度保証付きの結果も得ることが可能である。

5 まとめ

本発表では、VCPライブラリの行列クラスの設計思想について紹介した。VCPライブラリの行列クラスは非精度保証付き数値計算ユーザーでもBLASやLAPACKを用いて高速に近似解が得られるように作成している。さらに、近似解に不安を覚えた場合、精度保証付き数値計算用のポリシーにmatrix型のテンプレート引数_Tを変更すれば、直ちに精度を保証することが可能である。

謝辞

本研究は第一著者がJSPS科研費、課題番号16K17651の支援を受けたものである。kvライブラリの開発者である早稲田大学 柏木雅英先生にはVCPライブラリについて多くの助言を頂き心から感謝の気持ちと御礼を申し上げます。謝辞にかえさせていただきます。

「参考文献」

- 1) S.M. Rump: INTLAB - INTerval LABoratory, In Tibor Csendes, editor, Developments in Reliable Computing, pp.77–104. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, (1999).
- 2) M. Kashiwagi: kv - C++ による精度保証付き数値計算ライブラリ, <http://verifiedby.me/kv/>