

アルゴリズム選択による数値解析

3 J-6

和田武¹ 保田貴史² 野田松太郎²
愛媛大学

1. はじめに

近年、計算機およびネットワークを取りまく技術の進展は著しく、利用面においても多様化・高度化している。情報システムもネットワークにより有機的に結合された分散システム型が一般化しており、与えられた問題を解くためのライブラリやパッケージ等のソフトウェア資源が、計算機センターの大型計算機や研究室のワークステーション、またネットワークを介した他機関の超大型計算機上に存在することが多い。また、分散システム型が一般化しているため、他機関のソフトウェア資源の利用目的や利用方法について説明したマニュアルや文法書が手元に揃っていない。

このような環境下で、単に高速性のみを求めると、与えられた問題を解くために不適切なアルゴリズムを選択する場合がある。その結果、信じられないような結果を得ることがある。与えられた問題を解くために、効率的に適切なアルゴリズムを選択することは、非常に重要である。現在の問題解決のためのアルゴリズム選択は、使用者側の知識やアルゴリズムの特性に関する情報に頼らざるを得ない状況であり、ODEXPART(1), XELLPACK(2), GAMS(3)などのエキスパートシステムの研究開発が行なわれている。これらのシステムは、(1),(2)のように、常微分方程式や楕円問題の解決法など限られた範囲内で使用することが目的のものや、(3)のように、アルゴリズムの選択までは表示できるが、実行までは考慮されていないシステムとなっている。一方、国内では、GUIDEL(4)が開発されており、数値計算・統計計算のみならず、画像処理、結晶解析など広範囲に及んでいるが、数値計算・統計計算の分野では、ごく限られたライブラリやパッケージが対象になっている。そこで、我々は、数値計算・統計計算に焦点を絞って大型計算機、ワークステーション、ベクトル計算機など、どのシステム上にあってもマニュアルや文法書を探すことなく、自動的に最適なアルゴリズムが選択でき、実行まで可能なシステムを構築することにした。すなわち、本システムにより、(1)場所、計算機の種類にとらわれず、(2)マニュアルを読まなくても、(3)表示された例題を参照しながら、与えられた問題を効率的に解くために、最適なアルゴリズムを選択することができる。

2. アルゴリズム選択

アルゴリズム選択(Algorithm Selection)とは、与えられた問題を解決するために、多種多様な数値計算・統計計算などのアルゴリズム群のソフトウェア資源の中から最適なアルゴリズムを自動選択することである。与えられた問題を解く場合、どのアルゴリズムで解くかを決定することは、解を得るまでの労力、解の解釈、解を得た後の問題の発展的展開などに大きな影響を及ぼす。与えられた問題に適したアルゴリズムが見つければすぐに実行し、結果を比較検討し、次のステップに移ることができる。しかし、もしも不適切なアルゴリズムを選択した場合には、信じられないような結果を出力してしまうことがある。以下に、アルゴリズム選択の重要性を示す例として、4つの定積分を取り上げる。

Algorithm Selection in Mathematical and Statistical Library

1. Takeshi Wada, General Information Processing Center, Ehime University

2. Takashi Yasuda, Matu-Tarow Noda, Dept. Computer Science, Ehime University

3 Bunkyo, Matsuyama, Ehime 790, Japan

これらの、被積分関数をニュートン・コーツ公式、ロンバーグ積分公式、32点ガウス積分公式、および二重指数公式によって計算した結果を示す。

$$\begin{aligned} \text{a)} & \int_{-1}^1 \frac{5x-1}{x^3-3x-2.001} dx \\ \text{b)} & \int_0^1 \frac{dx}{1000x(x-1)-0.001} \\ \text{c)} & \int_0^1 \frac{dx}{1000(x-0.5)^2+0.001} \\ \text{d)} & \int_0^1 \frac{dx}{x^5-x^4-0.75x^3+x^2-0.25x-10^{-6}} \end{aligned}$$

| 式 | (a) | (b) | (c) | (d) |
|------------|------------|-------------|------------|-------------|
| ニュートンコーツ公式 | 164.956278 | 5.40966656 | 3.13759258 | 230.75544 |
| ロンバーグ積分公式 | 164.957869 | -0.68482819 | 2.98225113 | -5759.10716 |
| 32点ガウス積分公式 | 164.891426 | -0.01622972 | 0.19994934 | -580.39410 |
| 二重指数公式 | 164.956278 | -0.02763097 | 24.6736125 | -24965.007 |

(a)の定積分は、どの公式を用いてもほぼ安定した結果が得られる。しかし、(b),(c),(d)の定積分は、どれが正しい結果かわからない。このような場合、4個の公式および被積分関数の性質を理解することにより、次のような判断をすることができる。(b)の定積分は、区間内の両端で関数値が急激に増加する。このような場合には二重指数公式が有効であり、その結果がほぼ正しいと思われる。(c)の定積分は、(b)とは逆に区間の中央付近で鋭いピーク値を持つ関数で、ニュートン・コーツ公式により計算された結果がほぼ正しいものと思われる。(d)の定積分は、いずれの積分公式によっても正しい結果を与えることができない。(b),(c)の性質が存在しない場合には、区間を分割して別々に公式を与えることになる。このように、被積分関数の振舞いが急激に変化する場合、即ち悪条件の場合には、誤った解を得る危険性があるので、アルゴリズム選択が非常に重要になる。なお、数式処理を用いたハイブリッド積分公式では正しい結果を得ることが出来ることを付記する。

3. アルゴリズム選択システムの開発

現在まで、多種多様な数値・統計計算のアルゴリズムやソフトウェアが開発されているが、アルゴリズムの選択はユーザの判断によっている。自動的に最適なアルゴリズムを選択し、その実行までを可能にするソフトウェアシステムの開発を行なった。当然ながら、膨大なアルゴリズムに対応する各種のマニュアル、ドキュメントを収納するため、データベースを活用しなければならず、かつ優れたユーザインターフェースの開発が必要となる。われわれは、前者にオブジェクト・リレーショナルデータベース *Illustra* を活用し、後者には Web との連携を考慮した。さらに、数値積分における積分-被積分関数の振る舞いを知るために、数式処理との結合も考慮した。本システムを起動すると、数値解析・統計解析に必要なライブラリやパッケージの概要が表示される。その後、注意事項や使用例を参考にしながら、最適なアルゴリズムが導かれ、実行まで可能なシステムになっている。以上のように、我々が構築したシステムは、最適なアルゴリズムの選択に加えて、必要とされる計算機・ソフトウェアの情報も提示する。また、メニュー方式により実行して、不満足ならば別の選択肢を選び、再実行することができる。

4. まとめ

与えられた問題を解く場合、どのアルゴリズムで解くかを決定することは、解を得るまでの労力、解の解釈、解を得た後の問題の発展的展開などに大きな影響を及ぼす。本論文では、問題解決のための数値計算および統計計算のアルゴリズムのソフトウェアの選択により、自動化のためのアルゴリズムの提示とその適用について述べた。より幅広い問題に対して対象となる関数の振る舞いの把握等の処理を効果的に行えて、システムの適用範囲を広げることが今後に残されている。