

## ACRITH (高精度演算ライブラリー) による数値計算例

棚 町 芳 弘

日本アイ・ビー・エム(株)

ACRITH (高精度演算ライブラリー) は従来のコンピュータ演算における桁落ち, 情報落ち, さらに演算結果の丸めに基づく丸め誤差の累積などの数値的諸問題を解決するとともに, 計算結果の妥当性を自動的に検証することを目指してコンピュータによる数値計算のための新しいアプローチを具現化したソフトウェアである。

ACRITHはこの目的のために, 半準同形写像という新しい演算方式をIBMの中大型機上で実現することによって最大精度または高精度の計算結果を得るとともに, 高度のコンピュータ演算においては区間演算の実施とこれを工台とした残差修正法を利用して解る区間に包含し, この区間を縮小することを試み, ここに不動点定理を適用して解の存在とその一意性を与える。

本稿ではACRITHの概要を紹介し, その重要性を立証する若干の数値例を示す。

ACRITH (High-Accuracy Arithmetic Subroutine Library) and Numerical Examples.

Yoshihiro Tanamachi

IBM Japan, Ltd. Nihon Bldg. 6F., 6-2, Ohtemachi 2-chome, Chiyoda-ku, Tokyo 100

The ACRITH is a newly developed software which has materialized an approach to solving such arithmetic problems in computation as accumulation of round-off errors, cancellation or loss of information. It is also designed to almost always verify the validity of the result automatically. The ACRITH uses "semimorphism" which is a novel mathematical mapping principle. It will work on any large IBM computer and offers the highest or very high accuracy in the computation results. It uses the interval arithmetic method, contracting the interval by means of the residual correction method, and then the existence and uniqueness of the solution is found through the application of the fixed point theorem. The outline of the ACRITH is presented here with some specially selected numerical examples to demonstrate the importance of the ACRITH.

## 1 新しい演算方式とACRITHの概要

科学技術分野の研究，技術開発における問題の解決にはコンピュータを使用した数値計算が行われる。

コンピュータ計算 つまり従来の浮動小数点演算に伴う問題点については文献[1]～[4]，[7]～[12]，[16]等に詳しい。

ここでは新しい演算方式に基づく高精度演算機能と結果の自動的検証機能とを備えたサブルーチン・パッケージACRITHの概要を紹介し，若干の数値例を示す。

新しい演算方式とACRITHの理論的背景とそのコンピュータにおける具現化の方法については第3節において概説する。

### (1) コンピュータ計算における問題点

既に周知のことであり，また上述の文献に詳しい説明があるように，コンピュータ計算における従来の演算方式では有限桁，有限指数の浮動小数点数体系を取り扱い，各演算ごとに丸めが行われ丸め誤差なしでは計算は行われない。

つまり，従来の演算方式においては，コンピュータ計算に使用される計算アルゴリズムが数学的な実数，複素数の空間の数体系を对象として記述されるのに対し，実際のコンピュータにおける計算段階になると，使用される数値はすべて有限桁，有限指数の浮動小数点表現され，演算の途中結果はすべて何らかの方法で丸められる。その結果，数学的には厳密に成立する加減算，乗算の結合則，および分配則が満足されない。さらに実数，複素数のベクトル，行列あるいは区間データのそれぞれに対してもこの方法をそのまま拡張した「垂直型演算方式」[14]が採用されている。

このように，コンピュータによる科学技術計算においては，問題のモデルの解（厳密解）と計算結果としての数値解との間のギャップが生じ，数値解の精度評価は容易ではない。

このために，実際の科学技術計算の現場では「自分が実施した計算の結果に対する品質の保証が得られているとは言えない」のが現実である。

### (2) 新しい演算方式

新しい演算方式では，このような従来の演算方式における問題点を解決するために，次の基本方針をとる。（[11]～[14]，[16] 参照）：

- 1) 計算対象の空間 (space) を形式的・数学的に記述する。
- 2) この空間での演算を半準同型写像 (Semi morphism) により定義する。
- 3) この演算をコンピュータで具現化する。

### (3) IBM中大型コンピュータでの具現化の方法

次に，IBM中大型コンピュータへ半準同型写像を導入するために採用された方法について簡単に説明する。

- 1) 基本演算として四則演算の他に内積を導入した。
- 2) 丸め的方式として次の4種類を導入し状況に応じて適切なものを選択できるようにした。：

「上方から」, 「下方から」, 「最も近い」, 「零に向って」  
それぞれに対し, 最寄りの浮動小数点数への丸めを行う。

3) 16進32桁の加減算, 積和用アキュムレータと記憶域内に備える。

4) IBM中大型コンピュータの短精度(short)および長精度(Long)の浮動小数点形式のもとで実行する。

#### (4) ACRITH (High Accuracy Arithmetic Subroutine Library)

高精度演算サブルーチン・ライブラリーACRITHは, 上記の方法によって半導同型写像を実現し, 演算結果として高精度\*を得ることが出来るソフトウェアである。加えて, ACRITHの各種数値解法機能のサブルーチンにおいて採用されているアルゴリズムは区間演算と解の反復改良により解の検証を行うところにその特徴がある。

\* [注] ACRITHでは計算精度について3種類の言い方をしている。すなわち, 最大精度, 高精度および完全精度である。計算結果(点)が最大精度 (maximum accuracy)であるとは計算された浮動小数点数と厳密解との間に他の浮動小数点数が存在しないことをいう。区間解の場合はその区間が厳密解を含みその上界と下界が隣接する浮動小数点数であることである。

計算された区間解が高精度 (high accuracy)であるとは, その上界と下界が仮数部の最後の数ビットしか違っていない場合という。

計算結果(点)が完全精度 (full accuracy)であるとは得られた結果が厳密解と一致する場合をいう。一般に, 完全精度は“完全精度アキュムレータ (Full-Precision Accumulator)”の中だけの演算の結果として得られる。

## 2 ACRITHの背景と構成

ACRITHはオ1節の冒頭で述べた問題提起に対するサブルーチン・ライブラリー・プロダクトとしてのひとつの解答であり, オ3節の数値計算例でみるような機能をもっている。機能面で, 取り扱う問題の範囲が必ずしも十分広くはないが, この分野の今後の発展の基礎をあたえるものとは言い得るであろう。

ACRITHの概要をオ1節で簡単に紹介したが, ここでは少し詳しくその背景とコンピュータへの具現化の方法, およびライブラリー構成の要点を整理しておく。

### 2.1 背景

ACRITHのねらいは次の2点にある。

- ・半導同型写像の具現化と高精度計算
- ・「E-methods」の実現, すなわち,

|                |              |
|----------------|--------------|
| Existenz       | (existence)  |
| Eindeutigkeit  | (uniqueness) |
| Einschliessung | (inclusion)  |

の検証あるいは保証。

(1) まず半準同型写像を具現化するためには従来の浮動小数点演算を改良する必要がある。以下、基底とする計算対象の空間を  $R$  (実数),  $T$  (長精度浮動小数点数  $D$ 、または短精度浮動小数点数  $S$ ) とし、 $V$  でベクトル、 $M$  で行列を、また前に  $I$  とつけることにより区間であることを示す。

これらの組み合わせで計算対象空間をリスト・アップすると、以下のようになる。

図1 計算対象空間

|       |           |       |
|-------|-----------|-------|
| $R$   | $\supset$ | $T$   |
| $VR$  | $\supset$ | $VT$  |
| $MR$  | $\supset$ | $MT$  |
| $IR$  | $\supset$ | $IT$  |
| $IVR$ | $\supset$ | $IVT$ |
| $IMR$ | $\supset$ | $IMT$ |

$R \rightarrow T$  の写像  $\square$  が丸め (rounding) である。ACRITH は 4 種類の丸め : 「最も近い」 (nearest), 「上方から」 (upwards), 「下方から」 (downwards), 「零に向って」 (to zero) を用意している。

$R$  と  $T$  を  $\square$  をもとにして半準同型にするためには、 $T$  における演算を、例えば加算について、 $a \in T, b \in T$  に対して、次式が成り立つように具現化しなくてはならない。

$$T \ni a \oplus b = \square(a + b) \quad (\text{正確には、右辺の } a, b \text{ は } R \text{ の元とみている})$$

ACRITH は高精度演算機能 (The High Accuracy Arithmetic Facility) という機能を導入してこれを具現化している。ある機種ではハードウェアで、他の機種ではソフトウェアによるエミュレーションで行う。

次に  $MR \supset MT$  について考える。 $MR$  での積「 $\cdot$ 」に対して  $MT$  における積  $\boxtimes$  を、 $A, B \in MT$  に対して、

$$MT \ni A \boxtimes B = \square(A \cdot B) \quad (\text{右辺の } \square \text{ は、} \square: R \rightarrow T \text{ を自然に } MR \rightarrow MT \text{ に拡張したもの})$$

を具現化しなくてはならない。

したがって内積を高精度で計算することが要となる。Vector Inner Product は Very Important Person なのである。

ACRITH は十分な語長をもつアキュムレーター (以下 Accumulator と書く) を導入して、内積を 完全精度、すなわち誤差なしで求めることが出来るようにした。

(2) 次に E-methods についてみる。ここでの基本のひとつは区間演算の実現である。さきの計算空間のなかで下の3行にある空間の要素の定義と、そこで演算を半準同型性をみたすように具現化しなくてはならない。ACRITH は区間

もうひとつの基本は、区間演算を土台にした残差修正法 (residue correction method) の利用であり、これにより解を区間に包含し、かつこの区間を縮小することを知り、不動点定理 (fixed point theorem) を適用して解の存在性を示す。たとえば連立一次方程式の場合の次の結果 (と半導同型写像で  $T$  の世界に持ち込んだもの) がその典型的な例である。

$A, R \in MR, \quad \tilde{x}, b \in VR$  とする。ある  $X \in IVR$  に対して  
 $R(b - A\tilde{x}) + (I - RA)X \subset \overset{\circ}{X} \quad (\overset{\circ}{X} : X \text{ の内部})$   
 が成り立つならば、  
 $R, A$  は正則  
 $A\hat{x} = b$  を満たす  $\hat{x} = \tilde{x} + \overset{\circ}{X}$  が一つ唯一存在する  
 が成り立つ。

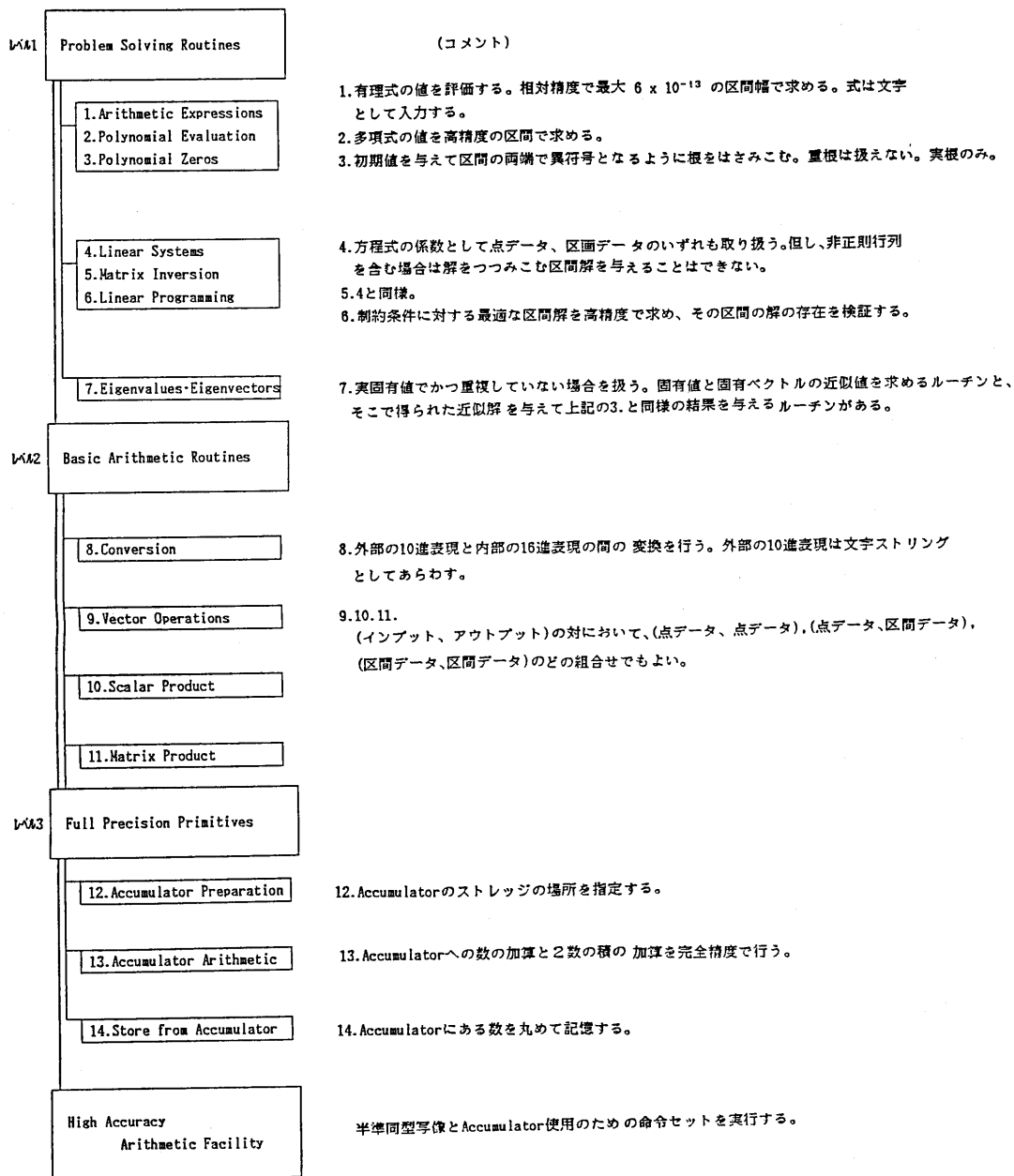
## 2.2 ACRITH の構成

度々ふれてきた高精度の内積計算を実行するための機構である Accumulator のレイアウトは図2図のようになる。

| Status Area |        |        |   |   | Numeric Area |  |  |  |  |  |  |  |     |
|-------------|--------|--------|---|---|--------------|--|--|--|--|--|--|--|-----|
| S<br>G      | L<br>B | R<br>B |   |   |              |  |  |  |  |  |  |  |     |
| 0           | 1      | 2      | 3 | 4 |              |  |  |  |  |  |  |  | 167 |

〈 5 〉

図3 ACRITHのルーチン構成



### 3 ACRITH による数値計算例

本節では、科学技術計算の種々の分野で生じる悪条件の問題を中心に、従来の浮動小数点演算で計算する場合とACRITHのサブルーチンを用いて計算する場合

の比較例を示す。

・取り上げた計算分野は

(1) 内積の計算、(2) 連立1次方程式の求解、(3) 逆行列、(4) 多項式の根、  
(5) 算術式の計算、(6) 行列の固有値問題

である。計算例は講演時に示す。

#### 4 結論

「ACRITHによる数値計算例」からわかるように、高精度演算サブルーチン・ライブラリーACRITHは最大精度または高精度の結果が検証つきで得られるという意味でコンピュータによる科学技術計算の結果の品質保証を与える数値計算の重要な道具である。

利用者は計算アルゴリズムと結びついた丸め誤差などの計算誤差とそれ以外の誤差との区別を明確にすることができて、問題のモデル化や離散化や計算スキーム化に伴うその他の誤差の検討に専念できるという意味で数値解析の基本に係わるソフトウェアといえよう。

#### 謝辞

最後に付したが、本稿はIBM社内研究会において共同研究者である奥田晃氏とともに行ったACRITHに関する調査研究の成果をまとめたものである。

また、本稿作成にあたって同研究会のメンバーである渡田節雄氏には貴重なご意見をいただいた。

ここに記して両氏に感謝の意を表します。

## 5. 参考文献

### <コンピュータ数値計算における問題点>

- [1] 森、名取、鳥居：数値計算、岩波講座情報科学18、岩波書店、1982
- [2] J.H.Wilkinson (一松、四条訳)：基本的演算における丸め誤差解析、培風館、1974
- [3] 一松信：数値計算の常識、情報処理—小特集・数値計算の動向、情報処理学会、vol.23, no. 2, 1982.2
- [4] 伊理正夫：数値計算の常識1~25, bit, 1982.5~1984.5
- [5] 三井斌友、数値解析入門—常微分方程式を中心に—、朝倉書店、1984.4
- [6] S.M.Rump, W.L.Miranker: Case studies for ACRITH,  
1. Ill-posed problem and  
2. Stiff Differential Systems,  
Research report 10249, IBM Thomas J. Watson Research Center,  
Yorktown Heights, New York, 1983

### <ACRITHによる数値計算例>

- [7] S.M.Rump: Computer Demonstration Packages for standard Problems of Numerical Mathematics, from A New Approach to Scientific Computation (Edited by U.W.Kulisch and W.L.Miranker), Academic Press, 1983
- [8] S.M.Rump: Solving Algebraic Problems with High Accuracy, from as [7]
- [9] IBM manual, ACRITH概要および利用の手引、N:GH18-6062, 1985
- [10] IBM manual, High-Accuracy Arithmetic Subroutine Library (ACRITH), General Information Manual, GC33-6163-1, 1984

### <ACRITHにおける高精度演算の原理>

- [11] IBM manual, High-Accuracy Arithmetic Subroutine Library (ACRITH), General Information Manual, GC33-6163-1, 1984
- [12] IBM manual, High-Accuracy Arithmetic Subroutine Library (ACRITH), Program Description and User's Guide, SC33-6164-1, 1984
- [13] U.W.Kulisch, W.L.Miranker: Computer Arithmetic in Theory and Practice, Academic Press, 1981
- [14] U.W.Kulisch: A new Approach for Scientific Computation, from as [7]
- [15] G.Alefeld, J.Herzberger: Introductions to Interval Computations, Academic Press, New York, 1974

### <その他—ACRITH 概要>

- [16] 棚町、科学技術計算の新しい演算方式とACRITHについて、コンピュータール no.12, (株)コロナ社、1958.10
- [17] 浜田、ACRITHの研究(その1), IBM社内研究会資料, S61.4
- [18] 奥田、棚町、高精度演算サブルーチン・ライブラリー—ACRITH—, ワークショップ「科学計算技術の動向」、愛媛大学、1986.1
- [19] 奥田、棚町、ACRITH (高精度演算サブルーチン・ライブラリー)—その概要と数値計算例—、日本大学—軽井沢、第15回数値解析シンポジウム、1986.5