数式処理と区間演算の結合とその応用†

1X−2

近藤祐史　野田松太郎
愛媛大学工学部 情報工学科

1 はじめに

最近，数値・数式融合計算 [3] が提唱され数式処理と数値計算との結合の重要性がますます増してきている．融合計算 (ハイブリッド計算) を実現する計算システムは数式処理システムを基本とし数値計算機能を付加する必要がある．しかし，ここで重要なことは浮動小数演算にともなう数値計算の誤差の問題である．融合計算の目的の一つは悪条件問題など誤差に敏感な問題を安定して解くことにある．そこで計算途中の数値計算の誤差の取り扱いはより厳密に行なわねばならない．その点で融合計算で用いる浮動小数演算を区間演算に基づく誤差保証計算 [1, 2] に置き直せばより強力なシステムが完成すると期待し得る．そこで，本論では誤差保証付き計算を数式処理システムと結合し，融合計算を効果的に実現する計算システムを構成することを考える．数式処理システムとしては，国産数式処理システム risa/asir[4] を取り上げ，そのデータ構造に区間数の概念を取り入れる．さらに，本論では，システムの有効性を具体的に連立代数方程式の求解に適用して示す．

2 区間演算の概要とシステムの特徴

実数全体を$\boldsymbol{R}$ であらわし，

$$X=\{x|\underline{x}\leq x\leq\overline{x}\}\qquad x,\underline{x},\overline{x}\in\boldsymbol{R}$$

なる X を区間数と呼び，$X=[\underline{x},\overline{x}]$ と表す．また，2つの区間数 $X=[\underline{x},\overline{x}]$, $Y=[\underline{y},\overline{y}]$ の間の演算を次のように定義する．

$$\left\{\begin{array}{rcl}
[\underline{x},\overline{x}]+[\underline{y},\overline{y}] &=& [\underline{x}+\underline{y},\overline{x}+\overline{y}],\\
[\underline{x},\overline{x}]-[\underline{y},\overline{y}] &=& [\underline{x}-\underline{y},\overline{x}-\overline{y}],\\
[\underline{x},\overline{x}]\cdot[\underline{y},\overline{y}] &=& [\min(\underline{x}\underline{y},\underline{x}\overline{y},\overline{x}\underline{y},\overline{x}\overline{y}),\\
&& \quad\max(\underline{x}\underline{y},\underline{x}\overline{y},\overline{x}\underline{y},\overline{x}\overline{y})],\\
[\underline{x},\overline{x}]\,/\,[\underline{y},\overline{y}] &=& [\underline{x},\overline{x}]\cdot[1/\overline{y},1/\underline{y}]\\
&=& [\min(\underline{x}/\overline{y},\underline{x}/\underline{y},\overline{x}/\overline{y},\overline{x}/\underline{y}),\\
&& \quad\max(\underline{x}/\overline{y},\underline{x}/\underline{y},\overline{x}/\overline{y},\overline{x}/\underline{y})],\\
&& (\text{ただし},0\notin Y).
\end{array}\right.$$

実際に計算機で計算する場合には，右辺の区間では下限では切捨て，上限では切り上げる．

また，このような区間演算機能を国産数式処理システム risa/asir に付加する．対応する区間数に関する以下の関数を作成し組み込んでいる．

- システムからの区間数 $X=[\underline{x},\overline{x}]$ の入力:
  `itv`$(\underline{x},\overline{x})$.
- 区間数 X の中心: `mid`$(X)=(\underline{x}+\overline{x})/2$.
- 区間数 X の幅: `width`$(X)=\overline{x}-\underline{x}$.
- 区間数 X の絶対値: `abs`$(X)=\max(|\underline{x}|,|\overline{x}|)$.
- 区間数 X,Y の間の距離:
  `distance`$(X,Y)=\max(|\underline{x}-\underline{y}|,|\overline{x}-\overline{y}|)$.
- 区間数 X の下限の取り出し: `inf`$(X)=\underline{x}$.
- 区間数 X の上限の取り出し: `sup`$(X)=\overline{x}$
- 区間数 X,Y の間の cap:
  `cap`$(X,Y)=[\max(\underline{x},\underline{y}),\ \min(\overline{x},\overline{y})]$,
  (ただし，結果が ϕ でない場合).
- 区間数 X,Y の間の cup:
  `cup`$(X,Y)=[\min(\underline{x},\underline{y}),\ \max(\overline{x},\overline{y})]$.
- 実数 a, 区間数 X, *if* $a\in A$ *then* 1 *else* 0:
  `initv`(X,a).

これらは通常の組み込み関数と同様にプログラム中で使用できる．また，このシステムの特徴は以下の通りである．

- データ構造に区間数を持つ．
- 区間数の定義が容易である．
- 区間数と実数間の相互変換を行う関数を持つ．
- 区間数間あるいは区間数と実数間の演算が容易．
- 多項式や有理式の係数に区間数を利用できる．

3 連立代数方程式の求解

区間演算を適用することの利点と既に本論で示した新しいシステム上での区間演算の実行の長所をみるために，連立代数方程式

$$\text{(a)}\ \left\{\begin{array}{rcl} f_1(x_1,x_2) &=& x_1^2+x_2^2-1=0\\ f_2(x_1,x_2) &=& x_1-x_2^2=0\end{array}\right.$$

$$\text{(b)}\ \left\{\begin{array}{rcl} f_1(x_1,x_2) &=& x_1^3-4.001x_2^2x_2+5x_2=0\\ f_2(x_1,x_2) &=& x_1^2-4x_1x_2-5=0\end{array}\right.$$

を実数での Newton 法

$$x^{(k+1)}\ =\ x^{(k)}\ -\ \frac{f(x^{(k)})}{f'(x^{(k)})},\quad k\geq0,$$

および，区間数に拡張した区間 Newton 法

$$X^{(k+1)}\ =\ m(X^{(k)})\ -\ \frac{f(m(X^{(k)}))}{F'(X^{(k)})}\quad k\geq0,$$

(ただし，$m(X)$ は区間 X の中心を表す.)

† Combination Interval Arithmetic with Symbolic Computation and Its Application by Yuji Kondoh, Matu-Tarow Noda, Department of Computer Science, Ehime University

表 1: 方程式 (a) の解の精度と演算回数

方法	解	誤差限界	Iter.	計算時間
実数 Newton	$x_1 = 6.180339887498947E-01$ $x_2 = 7.861513777574232E-01$	—	5	60msec
区間 Newton	$x_1 = [\underline{6.1803398874989}22E-01,$ $\underline{6.1803398874989}74E-01]$ $x_2 = [\underline{7.8615137775742}13E-01,$ $\underline{7.8615137775742}51E-01]$	$5.22E-15$	5	80msec

表 2: 方程式 (b) の解の精度と演算回数

方法	解	誤差限界	Iter.	計算時間
実数 Newton	$x_1 = 1.5812653211899038E+02$ $x_2 = 3.9523727968002113E+01$	—	9	100msec
区間 Newton	$x_1 = [\underline{1.5812653211}899240E+02,$ $\underline{1.5812653211}906692E+02]$ $x_2 = [\underline{3.95237279680}02617E+01,$ $\underline{3.95237279680}21248E+01]$	$7.45E-11$	8	130msec

で解き，解の精度と演算回数を比較する．ここで，大文字は区間数およびその関数を表し，小文字は実数表す．なお，実数計算も C 言語で記述された risa/asir の浮動小数演算機能を用いて計算した．また，初期値は方程式 (a) は $x_1^{(0)} = x_2^{(0)} = 1$，方程式 (b) は $x_1^{(0)} = x_2^{(0)} = 200$ またはその区間数化したものを用い，結果をそれぞれ表 1，表 2 に示す．

表から明らかなように例題の (a),(b) ともに区間演算を行なうと安心した誤差限界を持つ結果が得られ，収束するに要する反復回数も実数計算，区間演算で等しい．区間演算は，区間の上下限を計算するため，一般には実数計算の 2 倍以上の時間を必要とする．この見返りとして実数計算の結果に対する保証を与えるのが目的である．また，多くの区間演算を対象としたソフトウェアパッケージ [5] はその使用が通常の実数計算に比較して繁雑で十分に普及はしていないし，当然数式処理的機能は備わっていない．しかし，上で見るように本システムを用いると，

1. 計算時間が実数計算に比較して約 1.3 倍程度であり，現在で考えられるものよりはるかに高速．
2. 実数計算にはない誤差保証を十分な精度で与え得る．
3. 係数が区間数の多項式や有理式の数式処理が可能である．
4. わずかの区間数に関する命令を追加するのみで区間演算が可能である．

などの特徴がある．なお，上の例 (b) を通常の FORTRAN 計算すると 100 回以上の反復の結果 11 桁程度の精度の結果しか得られないことを付言する．

4 まとめ

本論文では数式処理システムへの区間演算の付加したシステムで，連立代数方程式を解き，結果の信頼性と高速性を示した．このように数式処理システムのデータ構造に区間数を導入することにより超高精度で誤差の不安がない計算を行う可能性が示し得た．今後本システムを悪条件問題を中心とした問題に適用することによって，今まで困難だった多くの問題の解を数値的にあるいは数式的に求め得る可能性がある．

なお本研究に遂行にあたって，奨学寄付金 (富士通研究所) に感謝する．

参考文献

[1] G. Alefeld and J. Herzberger, "Introduction to Interval Computations", (Translated by J. Rokne), Academic Press, New York (1983).

[2] R.E. Moore: "Methods and Applications of Interval Analysis", SIAM Studies in Applied Mathematics, SIAM, Philaderphia (1979).

[3] M.-T. Noda and T. Sasaki, "Approximate GCD and its application to ill-conditioned algebraic equations", Journal CAM, Vol.38, pp.335–351, December (1991).

[4] M. Noro and T. Takeshima, "Risa/Asir: A Computer Algebra System", in Proc. ISSAC'92, July 26–29, 1992 at Berkeley, CA.

[5] "PASCAL-SC", Ed. U. Kulisch, John Wiley & Sons, 1987.