

令和 3 年 6 月 16 日現在

機関番号：32685

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2016～2020

課題番号：16K16060

研究課題名（和文）特殊関数における高可搬で高精度かつ高信頼な高速計算手法の複素変数への拡張

研究課題名（英文）Extension of Fast Numerical Algorithms for Special Functions retaining High Reliability, High Accuracy and High Portability

研究代表者

山中 脩也 (Yamanaka, Naoya)

明星大学・情報学部・准教授

研究者番号：90548877

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,200,000円

研究成果の概要（和文）：丸め誤差や打ち切り誤差などの全ての誤差を考慮した上で、数学的に正しい結果を数値計算によって導く計算法を精度保証付き数値計算と呼ぶ。本研究では、ガンマ関数・第二種修正ベッセル関数・正弦積分に対して、高可搬で高精度かつ高信頼な高速計算アルゴリズムの設計法を複素数にまで拡張し提案した。また、多くの特殊関数の精度保証付き数値計算で必須となる高階微分計算法の研究を推進し、さらに多くの関数でその拡張が進められる基盤を構築した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

複素変数に対する特殊関数の計算について、倍精度数だけを利用して（高可搬）、倍精度数のより高精度な精度を（高精度）、精度保証付きで達成する（高信頼）、既存手法より実行時間が早い（高速）、計算アルゴリズムの設計法を構築したことにより、現在使っている計算機環境のまま、僅かなソフトウェアの変更で、従来の精度の倍の結果を精度保証付きで得られ、誤りの無い解が計算できる高速なアルゴリズム（4H-Algorithm）に基づいた「安心・安全な数値結果」を利用することができるようになった。

研究成果の概要（英文）：The purpose of this research is to extend a framework of 4H-Algorithm for some special functions. Here, the 4H-algorithm means a fast numerical algorithm retaining high reliability, high accuracy and high portability. In this research we have proposed algorithms with complex variables for Gamma function, Modified Bessel function, Sinc function. Moreover, we succeeded in developing algorithm for high order differential based on the hyper dual numbers, so that we can develop the 4H-algorithm for other special functions.

研究分野：数値解析

キーワード：高精度計算 誤差解析 精度保証付き数値計算

様式 C-19、F-19-1、Z-19（共通）

1. 研究開始当初の背景

丸め誤差や打ち切り誤差などの全ての誤差を考慮した上で、数学的に正しい結果を数値計算によって導く計算法を精度保証付き数値計算と呼ぶ。2012年から2016年まで行なってきた本研究代表者による「初等関数と特殊関数の高可搬で高精度かつ高信頼な高速計算法の実現」（研究課題/領域番号：24700015）では、すべての非線形問題の基礎となる初等関数や特殊関数の計算において、従来の数値計算環境のまま、高速かつ高精度な結果を効率的に得られることを様々な関数について明らかにし、非線形問題に対する精度保証付き数値計算の基盤を確立した。

2. 研究の目的

複素変数に対する特殊関数の計算について、倍精度数だけを利用して（高可搬）、倍精度数のより高精度な精度を（高精度）、精度保証付きで達成する（高信頼）、既存手法より実行時間が早い（高速）、計算アルゴリズムの設計法を構築する。すなわち、現在使っている計算機環境のまま、僅かなソフトウェアの変更で、従来の精度の倍の結果を精度保証付きで得られ、誤りの無い解が計算できる高速なアルゴリズム（4H-Algorithm：High portability, High accuracy, High reliability and High speed Algorithm）の設計法を複素変数に拡張することが目的である。

3. 研究の方法

特殊関数計算法は、初等関数と同様に多くの計算法が存在するが、本質的には基本演算・初等関数・積分の組み合わせで構成される。そのため、既の実現した「数値積分の3H-Algorithmの構築」や「実数を入力とする特殊関数の4H-Algorithm」が本研究で目標とする複素変数を入力とする特殊関数の4H-Algorithm構築の基礎として利用される。これに加え、各関数における構築上の困難がある。これらの困難に対し、エラーフリー変換を用いると容易に高精度化が図れ、内部で必要な場所に必要な精度だけの高精度計算を行えば、各関数で発生する誤差の影響が及ばない程度に小さくなることが予想される。

4. 研究成果

(1) 複素変数を入力とするガンマ関数の構築

初年度である平成28年度は、実数入力のガンマ関数の4H-Algorithmとエラーフリー変換を組み合わせ、またその誤差解析を行うことで、複素変数を入力とするガンマ関数の4H-Algorithmの構築を目的とした。ガンマ関数の4H-Algorithmの構築では、実数変数を入力するとき同様、多項式の項と指数減衰の項が被積分関数に含まれる半無限区間の精度保証付き数値積分の計算が必要になる。この半無限積分の積分値とその誤差の計算には、これまでに取り組んできた二重指数関数型積分公式の誤差上限に関する研究成果を利用した。具体的には、多項式の項での増加具合に比べ、指数減衰の項の減少具合が大きいことを利用し、ガンマ関数の計算で必要となる多項式の項の増加具合の上限を見積もり、その大きさを指数減衰の項で吸収するようにして、二重指数関数型積分公式の誤差上限を求めた。ガンマ関数の計算では実数変数を入力するとき同様、部分積分により考えるべき定義域を限定することが可能となるため、ここでも同様の性質を利用した。その結果、どのような入力に対しても、二重指数関数型積分公式により高精度な結果を与えることができただけでなく、それらの結果は、丸め誤差や打ち切り誤差などのすべての誤差を考慮した上で、数学的に正しい結果を与えることができるようになった。また、それらの高精度計算には無誤差変換が基礎として利用されており、計算に必要なすべての関数内でもそれらを利用した高速な計算法が利用されているため、内部で多倍長演算等を利用した時と比べて、高速であるだけでなく、どのような計算機環境でも動作させることができる計算法を提案することができた。

(2) 複素変数を入力とする修正ベッセル関数の構築

二年目である平成29年度は、これまでの構築で得た知識と、四則演算の4H-Algorithm・エラーフリー変換を組み合わせ、複素変数を入力とする第二種修正ベッセル関数の4H-Algorithmを構築した。第二種修正ベッセル関数の4H-Algorithmの構築では、実数変数を入力するとき同様、多項式の項と指数減衰の項が被積分関数に含まれる半無限区間の精度保証付き数値積分の計算が必要になる。この半無限積分の積分値とその誤差の計算には、これまでに取り組んできた実数を入力とする二重指数関数型積分公式の誤差上限に関する研究成果を利用した。具体的には、多項式の項での増加具合に比べ、指数減衰の項の減少具合が大きいことを利用し、第二種修正ベッセル関数の計算で必要となる多項式の項の増加具合の上限を見積もり、その大きさを指数減衰の項で吸収するようにして、二重指数関数型積分公式の誤差上限を求めた。第二種修正ベッセル関数の計算ではガンマ関数の精度保証された計算結果が必要となるが、平成28年度実施した内容を利用し、実装した。

(3) 正弦積分の 4H-Algorithm の構築等

三年目である平成 30 年は、平成 29 年度までに提案した技術を基礎として、特殊関数である「正弦積分」に対し 4H-Algorithm を提案した。また、複素数を用いた高精度な数値積分である「数値積分に対する超関数法」に対して、精度保証付きで計算を行うための誤差上限を求める方法を構築した。

正弦積分の計算は、多項式の項と指数減衰の項が被積分関数に含まれる半無限区間の精度保証付き数値積分の計算に帰着させることができる。このアイデアにより、これまでに取り組んできた二重指数関数型積分公式の誤差上限に関する研究成果を直接利用することができるようになり、振動を繰り返す Sinc 関数を直接積分する際に比べて、高速かつ高精度な計算を実現することが可能となった。

また「数値積分に対する超関数法」の誤差上限を求める方法では、従来理論的により知られていた複素平面上の無限領域（実軸に平行な帯状領域）で表現された誤差上限に対して、適切な変数変換を行うというアイデアにより、帯状領域を円環領域に変換することが可能となり、その結果、比較的シンプルな誤差上限の計算法を提案することができた。

(4) 複素変数を入力とする様々な関数の 4H-Algorithm の構築基盤

令和元年度は、特殊関数の計算に必要となる精度保証付き数値積分の計算法における高階微分計算法の研究を推進した。従来、高階微分の計算には広く自動微分(Automatic Differentiation)が広く利用されてきた。この計算方法は、生じる演算すべてでその中間変数の計算法が定義されていれば、微分の連鎖律に基づく計算が高精度に行えるという特徴を持つ。この方法に対して近年、超双対数 HDN を用いた微分法が提案され二階微分と HDN の係が明らかになった。そして二階微分に拡張した HDN 微分法は計算機で実装すると自動微分と一緒にすることが判明した。この方法は従来の自動微分計算法と比べ、計算の構造がシンプルであることと、計算結果が自動微分と同様に高精度になるという点で、より精密な誤差評価を与えたいような場合に大変重宝する。この事実を基礎として、二階微分の計算をさらに高階微分の計算に拡張し、任意階の微分計算を考案し、基礎理論の構築を行なった。この計算法のユニークな点は、解析的な微分という演算を、すべて代数的に行うという点にあり、演算規則それ自体についても、行列演算をそのまま用いることができるという点にあり、これまでの計算法にない独創的な特徴である。これにより自動微分において必須であった演算規則の事前定義は、一般的な行列演算に帰着され、広範囲の数値解析ソルバーへの導入が可能となった。また、その技術を応用し、超弾性モデルへ適用例とその性能評価についても報告した。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計2件（うち査読付論文 2件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 藤川 正毅, 田中 真人, 井元 佑介, 三目 直登, 浦本 武雄, 山中 脩也	4. 巻 86
2. 論文標題 Hyper-dual numbersを用いたOgden型超弾性モデルの定式化とその性能評価	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 日本機械学会論文集	6. 最初と最後の頁 19-00256
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1299/transjsme.19-00256	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Y. Imoto, N. Yamanaka, T. Uramoto, M. Tanaka, M. Fujikawa, N. Mitsume	4. 巻 12
2. 論文標題 Fundamental theorem of matrix representations of hyper-dual numbers for computing higher-order derivatives	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 JSIAM Letters	6. 最初と最後の頁 29-32
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.14495/jsiaml.12.29	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計23件（うち招待講演 0件 / うち国際学会 13件）

1. 発表者名 Naoya Yamanaka
2. 発表標題 Verified High Order Differentiation Algorithm Based on Hyper-dual Numbers
3. 学会等名 2019 Mini-Workshop on Computational Science (MWCS2019) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Naoya Yamanaka
2. 発表標題 Verified Algorithm of Hyperfunction Method for Numerical Integration
3. 学会等名 2018 Workshop on recent Results of Mathematical Science and Computer Assisted Proofs (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Naoya Yamanaka
2. 発表標題 Traps in numerical calculation and techniques of verified numerical computation
3. 学会等名 6th TWSIAM Meeting (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 井元 佑介
2. 発表標題 Hyper-dual numbers を用いた数値微分の研究
3. 学会等名 数学と現象 in 長瀬
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Naoya Yamanaka
2. 発表標題 Verified Algorithm for the sine integral
3. 学会等名 The 18th International Symposium on Scientific Computing, Computer Arithmetic, and Verified Numerical Computations (SCAN2018) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Naoya Yamanaka
2. 発表標題 Verified Algorithm of Hyperfunction Method for Numerical Integration
3. 学会等名 The 37th JSST Annual International Conference on Simulation Technology (JSST2018) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Naoya Yamanaka
2. 発表標題 Verified Algorithm for the sine integral
3. 学会等名 The 37th JSST Annual International Conference on Simulation Technology (JSST2018) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 山中 脩也
2. 発表標題 Hyper Dual Number の性質を用いた高階微分の精度保証付き数値計算法
3. 学会等名 第2回 精度保証付き数値計算の実問題への応用研究集会 (NVR 2018)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Naoya Yamanaka
2. 発表標題 Verified Algorithm of High Order Differential using Hyper Dual Numbers
3. 学会等名 2018 Workshop on Recent views of Nonlinear Analysis (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 山中 脩也
2. 発表標題 数値積分の誤差項についての一考察 -精度を保証したいという視点から-
3. 学会等名 数学と現象 in 那須 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Naoya Yamanaka
2. 発表標題 Verified Algorithm for High Order Differentiation Based on Hyper-dual Numbers
3. 学会等名 2019 SIAM Conference on Computational Science and Engineering (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 井元 佑介
2. 発表標題 Hyper Dual Numbersの行列表示を用いた微分計算手法の基礎理論整備
3. 学会等名 第15回 研究部会連合発表会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Naoya Yamanaka, Tomoaki Okayama, Shin'ichi Oishi
2. 発表標題 Verified Algorithm for Gamma Function using Double Exponential Formula and Its Applications
3. 学会等名 The 36th JSST Annual International Conference on Simulation Technology (JSST2017) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 山中 脩也
2. 発表標題 乗除算の数値計算誤差を愉しむ
3. 学会等名 数学と現象 in 清里
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 山中 脩也
2. 発表標題 数値計算に潜む罠と精度保証
3. 学会等名 応用数理 学生・若手研究者のための研究交流会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Naoya Yamanaka, Tomoaki Okayama, Shin'ichi Oishi
2. 発表標題 Verified Algorithm for the Modified Bessel Function of the Second Kind
3. 学会等名 5th European Seminar on Computing (国際学会)
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 Yusuke Morikura, Daichi Mukunoki, Takeshi Fukaya, Naoya Yamanaka
2. 発表標題 Performance Evaluation of Verified Computation for Linear System on Supercomputer
3. 学会等名 The 11th East Asia SIAM Conference (国際学会)
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 山中 脩也
2. 発表標題 半無限区間の精度保証付き数値積分法
3. 学会等名 数学と現象 in 奥多摩
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 山中 脩也
2. 発表標題 精度保証における高精度数値計算
3. 学会等名 非線形問題の解法に関する研究会「第1回非線形・可視化 部門研究会」
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 森倉悠介, 椋木大地, 深谷猛, 山中脩也, 大石進一
2. 発表標題 大規模並列計算機における連立1次方程式の精度保証付き数値計算に対する性能評価
3. 学会等名 第157回ハイパフォーマンスコンピューティング研究発表会
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 Naoya Yamanaka, Tomoaki Okayama, Shin'ichi Oishi
2. 発表標題 Verified Algorithm for the Gamma Function using Double Exponential Formula
3. 学会等名 The 53rd ANZIAM Conference (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 山中 脩也
2. 発表標題 数値計算に潜む罠と精度保証
3. 学会等名 数学と現象 in 清里
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 山中 脩也
2. 発表標題 半無限積分における精度保証付き数値計算法と高精度計算
3. 学会等名 第5回 大規模並列数値計算技術に関する研究集会
4. 発表年 2017年

〔図書〕 計1件

1. 著者名 大石 進一 (著, 編集), 荻田 武史 (著), 柏木 雅英 (著), 劉 雪峰 (著), 尾崎 克久 (著), 山中 脩也 (著), 高安 亮紀 (著), 関根 晃太 (著), 木村 拓馬 (著), 市原 一裕 (著), 正井 秀俊 (著), 森倉 悠介 (著), Siegfried M. Rump (著)	4. 発行年 2018年
2. 出版社 コロナ社	5. 総ページ数 311
3. 書名 精度保証付き数値計算の基礎	

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
---------------------------	-----------------------	----

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------