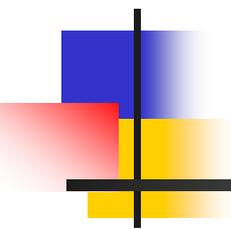


Javaによる数値計算のすすめ



九州工業大学 大学院情報工学研究院

古賀 雅伸

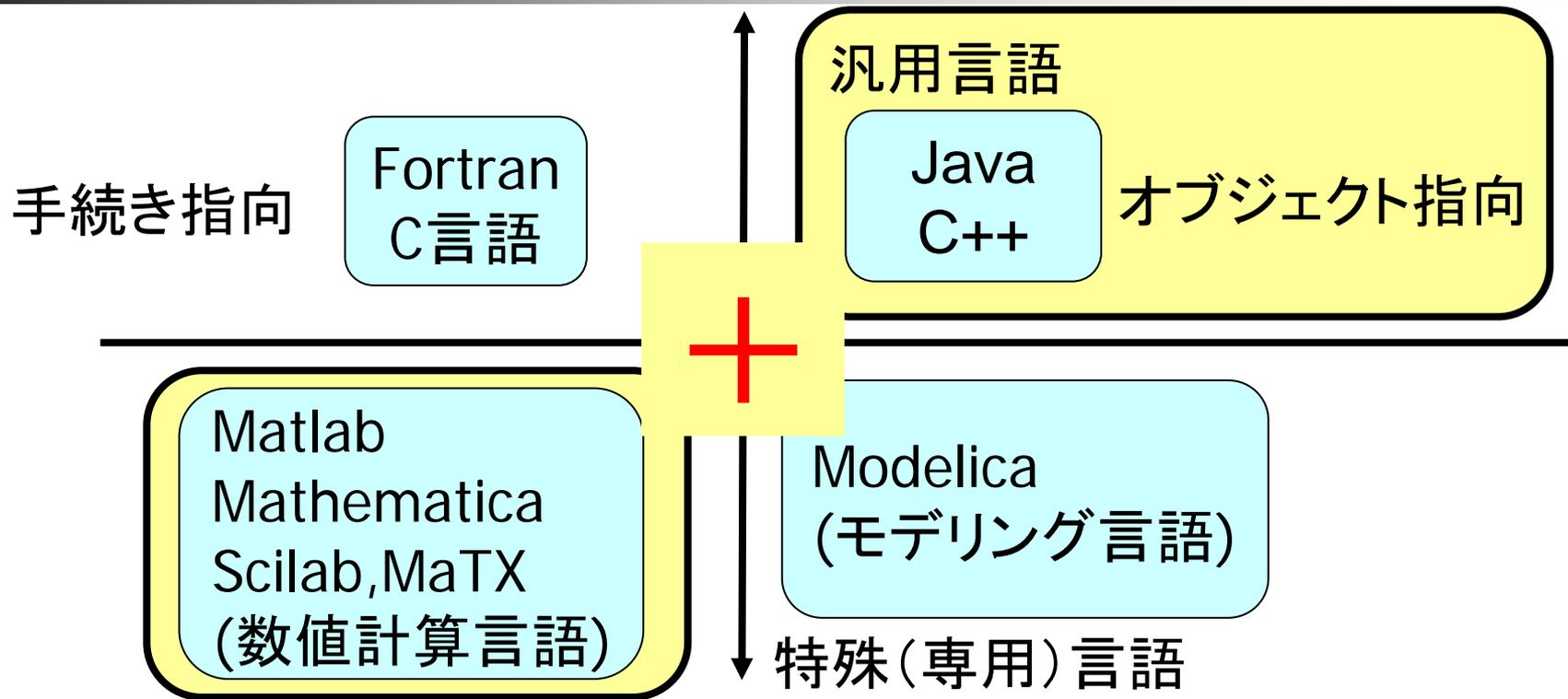
目次

- はじめに
- Javaは遅い？速い？
 - JavaとCのベンチマーク
 - JITとAOTとLLVM
- Javaによる数値計算に関する情報
 - 書籍(日本語、英語)
 - ライブラリ
- Javaによる数値計算の応用
 - 数値シミュレーション
 - 高品質数値計算
- まとめ

目次

- はじめに
- Javaは遅い？速い？
 - JavaとCのベンチマーク
 - JITとAOTとLLVM
- Javaによる数値計算に関する情報
 - 書籍(日本語、英語)
 - ライブラリ
- Javaによる数値計算の応用
 - 数値シミュレーション
 - 高品質数値計算
- まとめ

数値計算に用いるプログラミング言語



■ 要求

- 広く普及した標準技術 (開発者の確保) ➡ 汎用言語
- 大規模・複雑化へ対応 ➡ オブジェクト指向
- 可読性・保守性に優れる ➡ 数値計算言語

目次

- はじめに
- Javaは遅い？速い？
 - JavaとCのベンチマーク
 - JITとAOTとLLVM
- Javaによる数値計算に関する情報
 - 書籍(日本語、英語)
 - ライブラリ
- Javaによる数値計算の応用
 - 数値シミュレーション
 - 高品質数値計算
- まとめ

JavaとCのベンチマーク

- Stefan Krause (2009.1.29)
- <http://www.stefankrause.net/wp/?p=4>
- 問題(入出力無し、文字列処理無し)
 - Mandelbrot, NBody, Spectralnorm (実数)
 - Frannkuch (整数)
- 10回測定した平均
- Javaでは2回目以降使用(JITの起動コスト無し)
- 実行環境
 - CPU: Intel Core 2 Duo 2GHz, RAM: 2GB
 - OS: Ubuntu 7.04 32Bit

Java環境とC環境

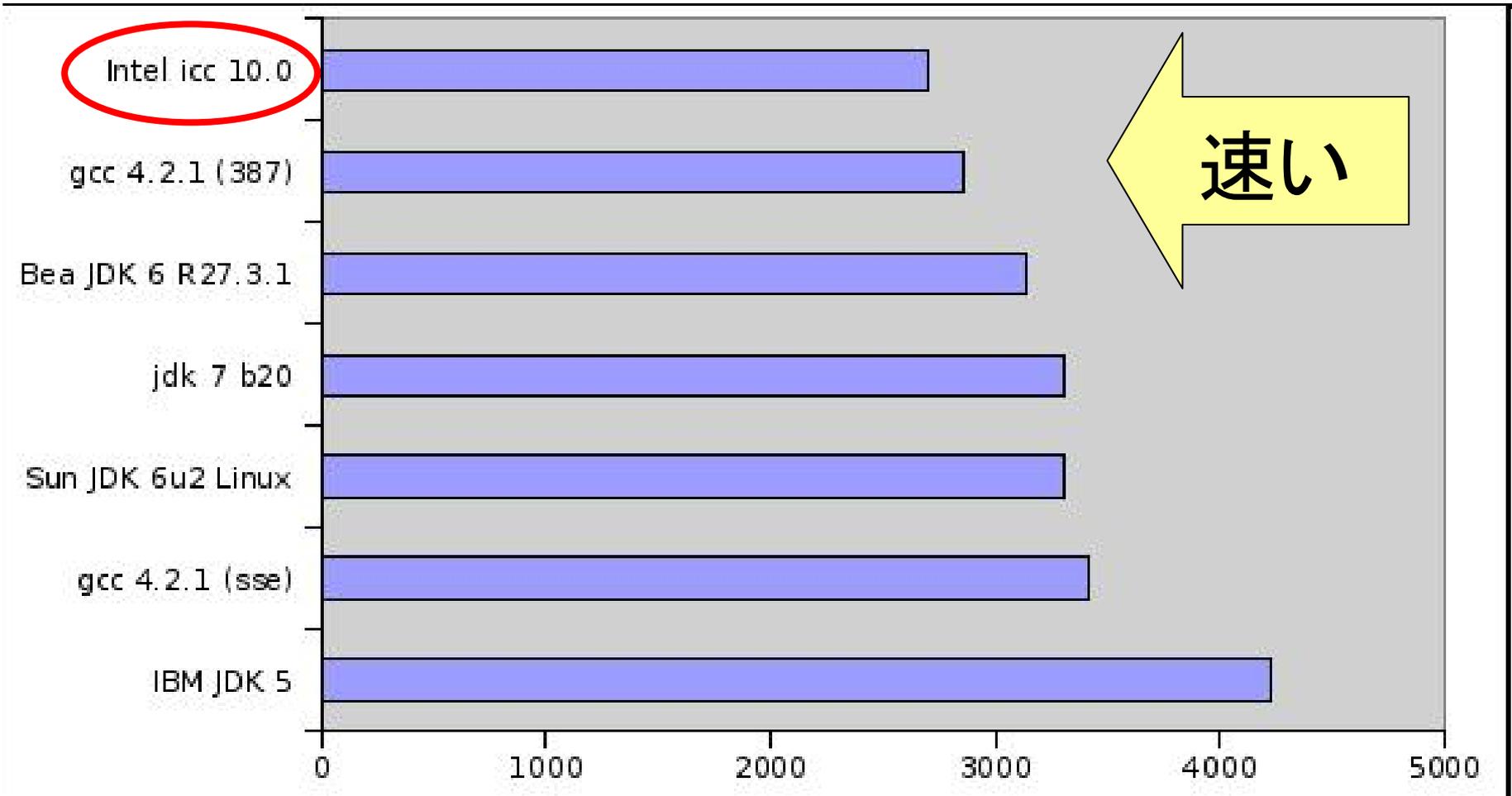
■ Java

- Sun JDK 6u2, Sun JDK 7b20
- IBM JDK 5, Oracle JRockit JDK 6 R 27.3.1
- -serverオプション

■ C

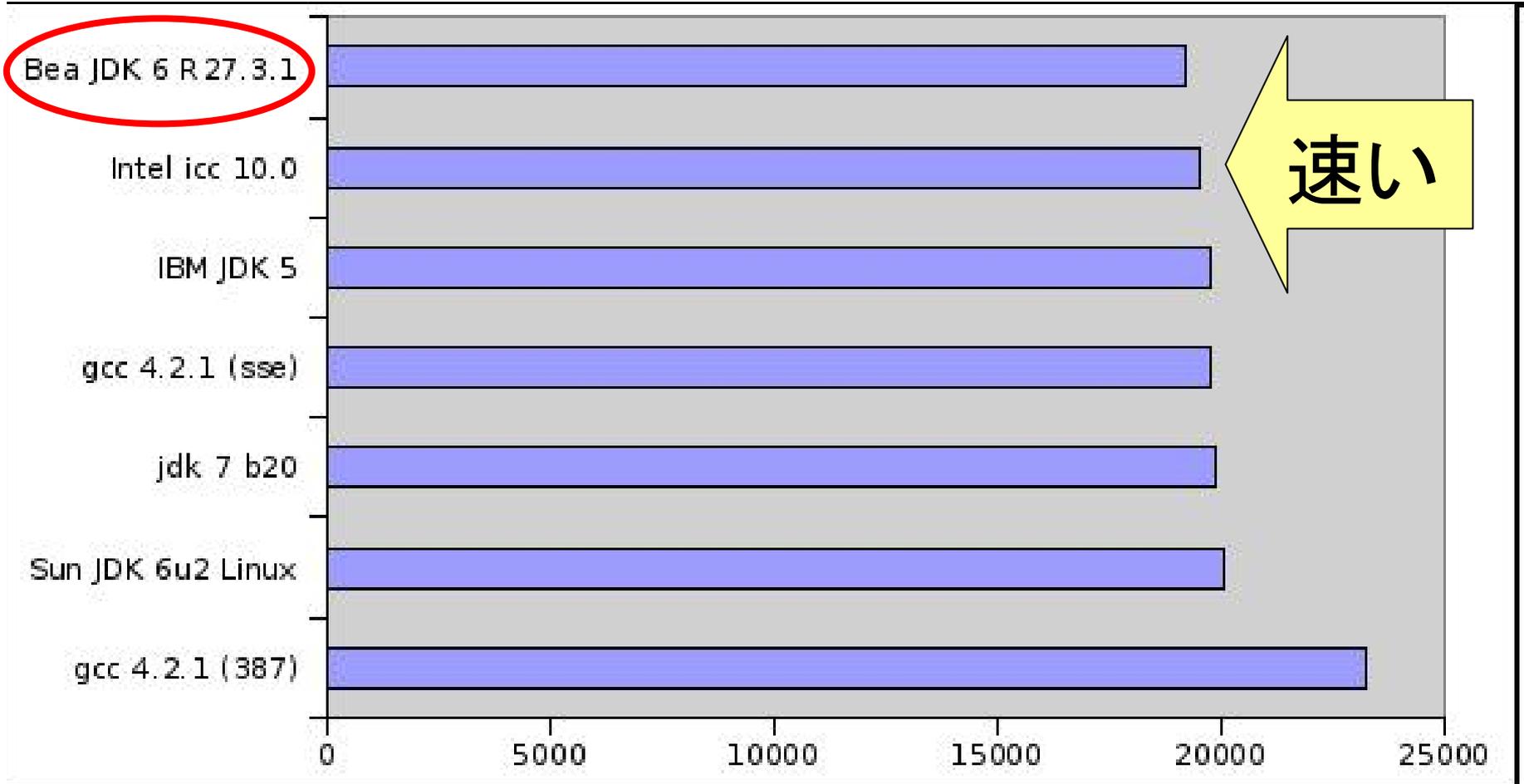
- gcc 4.2.1
 - -mfpmath=387 -march=native -O3 ...
 - -mfpmath=sse -march=native -O3 ...
- Intels ICC 10.0
 - -xT -fast

Mandelbrot



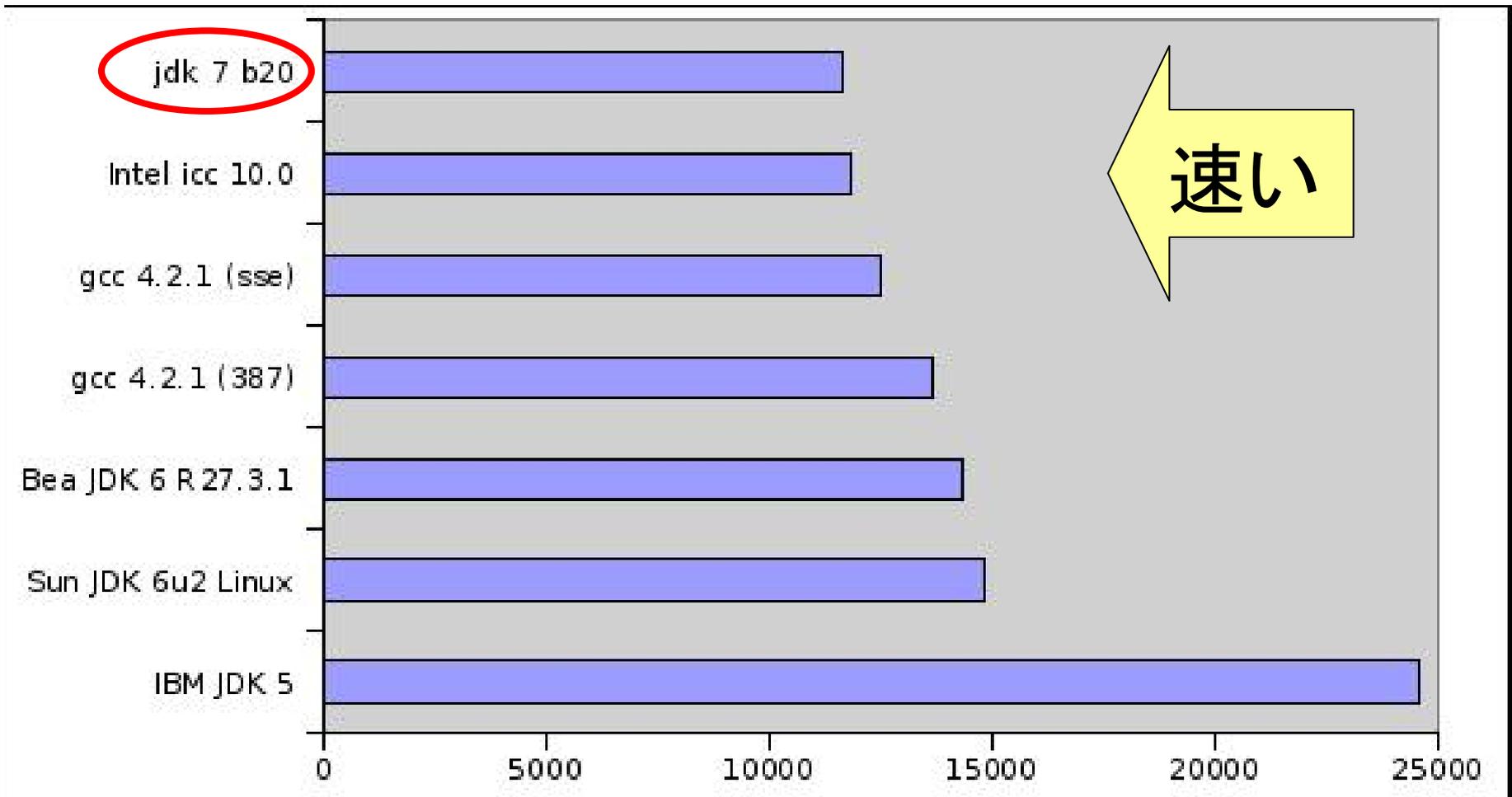
icc > gcc(387) > JRockit > jdk7 > jdk6 > gcc(sse)

Spectalnorm



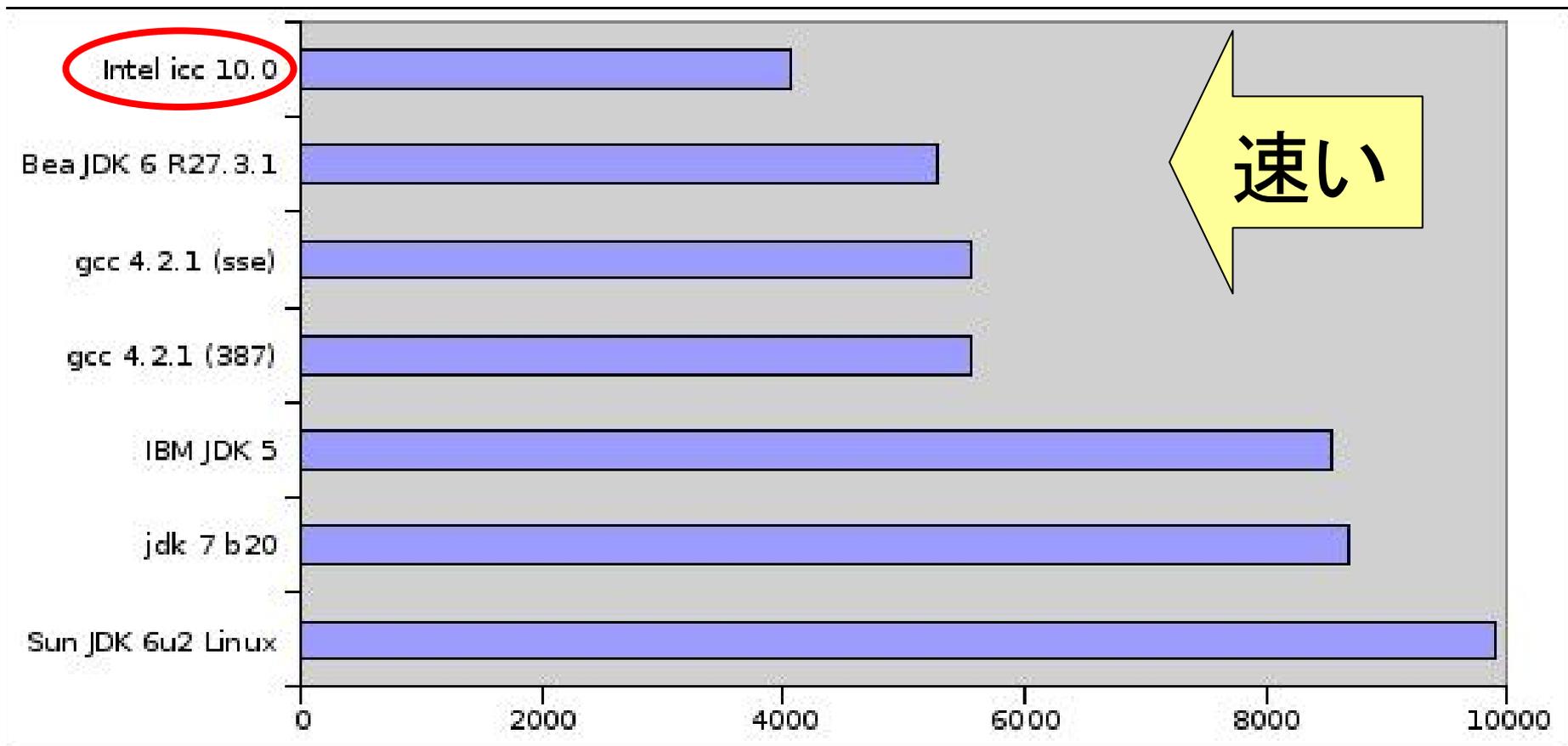
JRockit > icc > IBM jdk5 > gcc(sse) > jdk7 > jdk6

NBody



jdk7 > icc > gcc(sse) > gcc(387) > JRockit > jdk6

Frannkuch



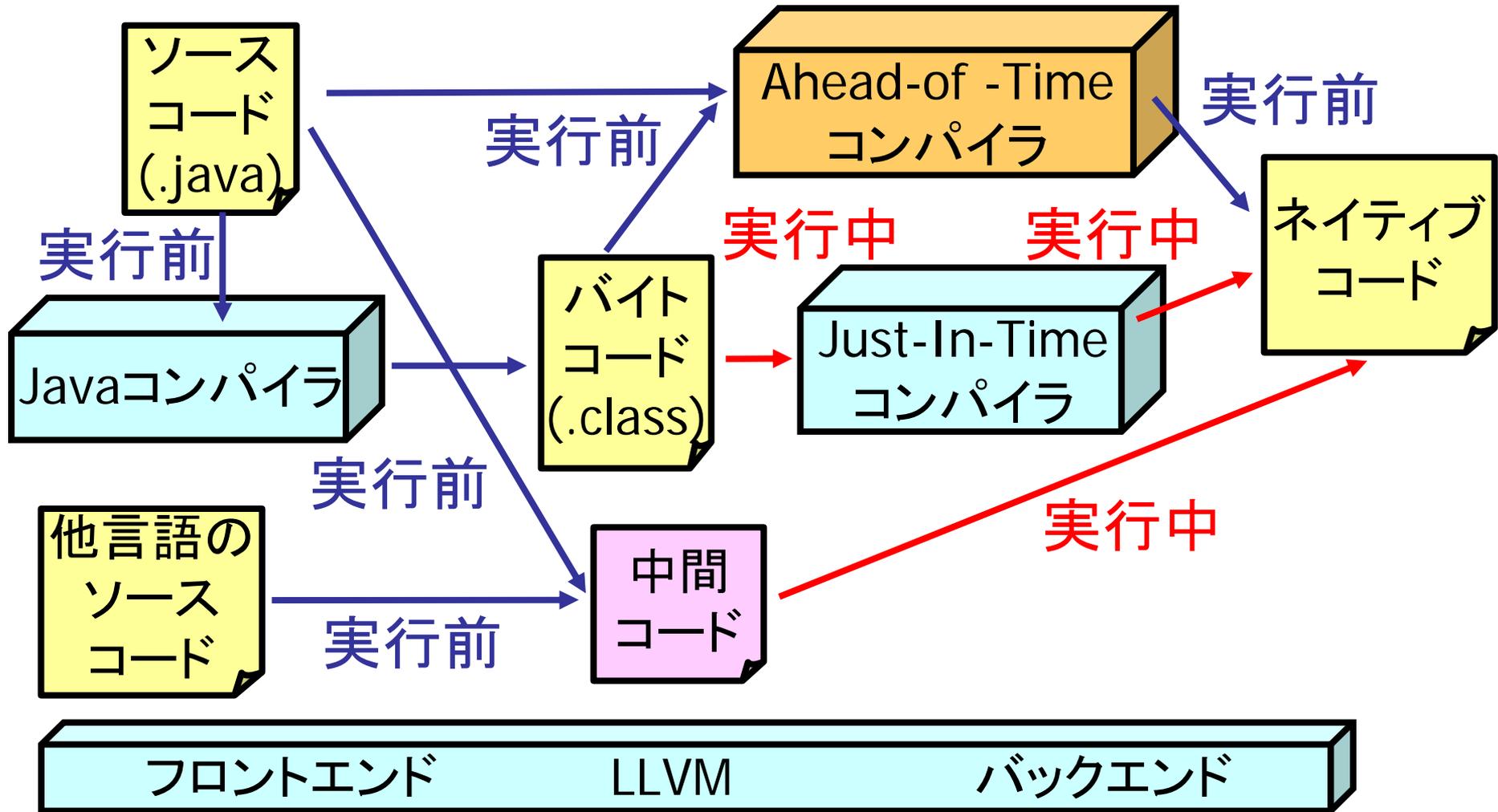
icc > JRockit > gcc(sse) > gcc(387) > IBM jdk > jdk7

ベンチマーク結論

- ICCはGCCより速い
- ICCは無難な選択
- Oracle JRockit JDKは最も早いJDK
- JDK7はJDK6より速い

CとJavaの速さは同程度

JITとAOTとLLVM



参考: <http://www.shudo.net/article/Fedora-Core-Expert-200507-GCJ/>

JITとAOTとLLVMの比較

- JIT(Just In Time)(実行)コンパイラ
 - [Sun JDK](#)
 - [Oracle JRockit](#)
 - [IBM JDK](#)
 - [Apache Harmony](#)
- AOT(Ahead Of Time)(事前)コンパイラ
 - [Excelsior JET](#)
 - [GNU Compiler for Java](#)
- LLVM(Lower Level Virtual Machine)コンパイラ
 - フロントエンド(中間コード生成)最適化
 - バックエンド(機械コード生成)最適化

ベンチマーク実行方法

- Stefan Krause (2008.7.7)
- <http://www.stefankrause.net/wp/?p=9>
- 問題(入出力無し、文字列処理無し)
 - Mandelbrot, NBody, Spectralnorm (実数)
 - Frannkuch (整数)、Himeno
- 10回測定した平均
- Javaでは2回目以降使用(JITの起動コスト無し)
- 実行環境
 - CPU: Intel Core 2 Duo 2GHz, RAM: 2GB
 - OS: Ubuntu 7.04 32Bit

実行環境

■ JIT

- Sun JDK 6u2, Sun JDK 6u6
- Apache Harmony m6
- IBM JDK5, IBM JDK6
- -serverオプション

■ AOT

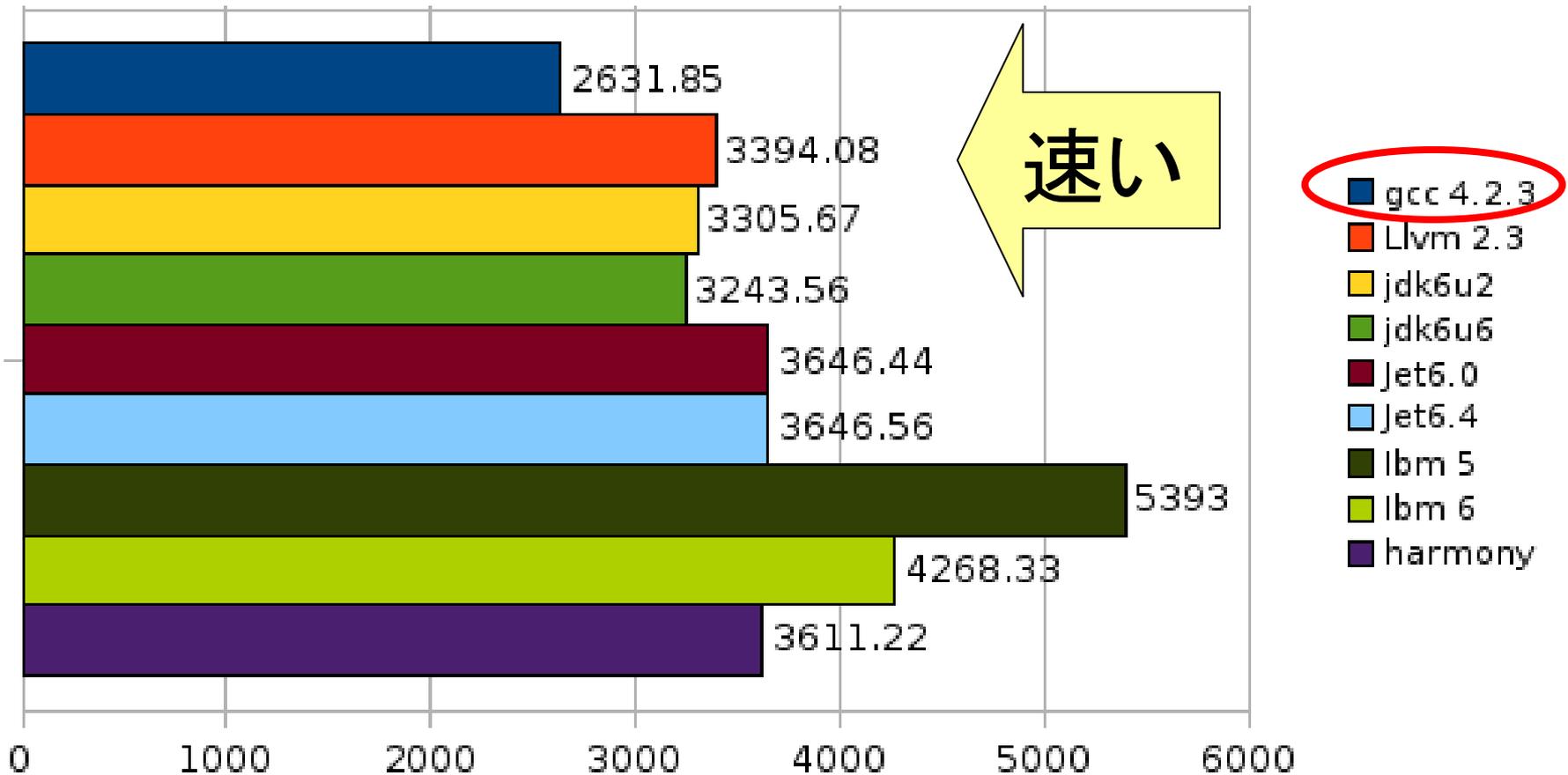
- gcc 4.2.3(-O3 -msse2 -march=native =mfpmath=387)
- Excelsior JET 6.0, JET 6.4

■ LLVM

- LLVM 2.3 (-mcpu=core2 -mattr=sse42)

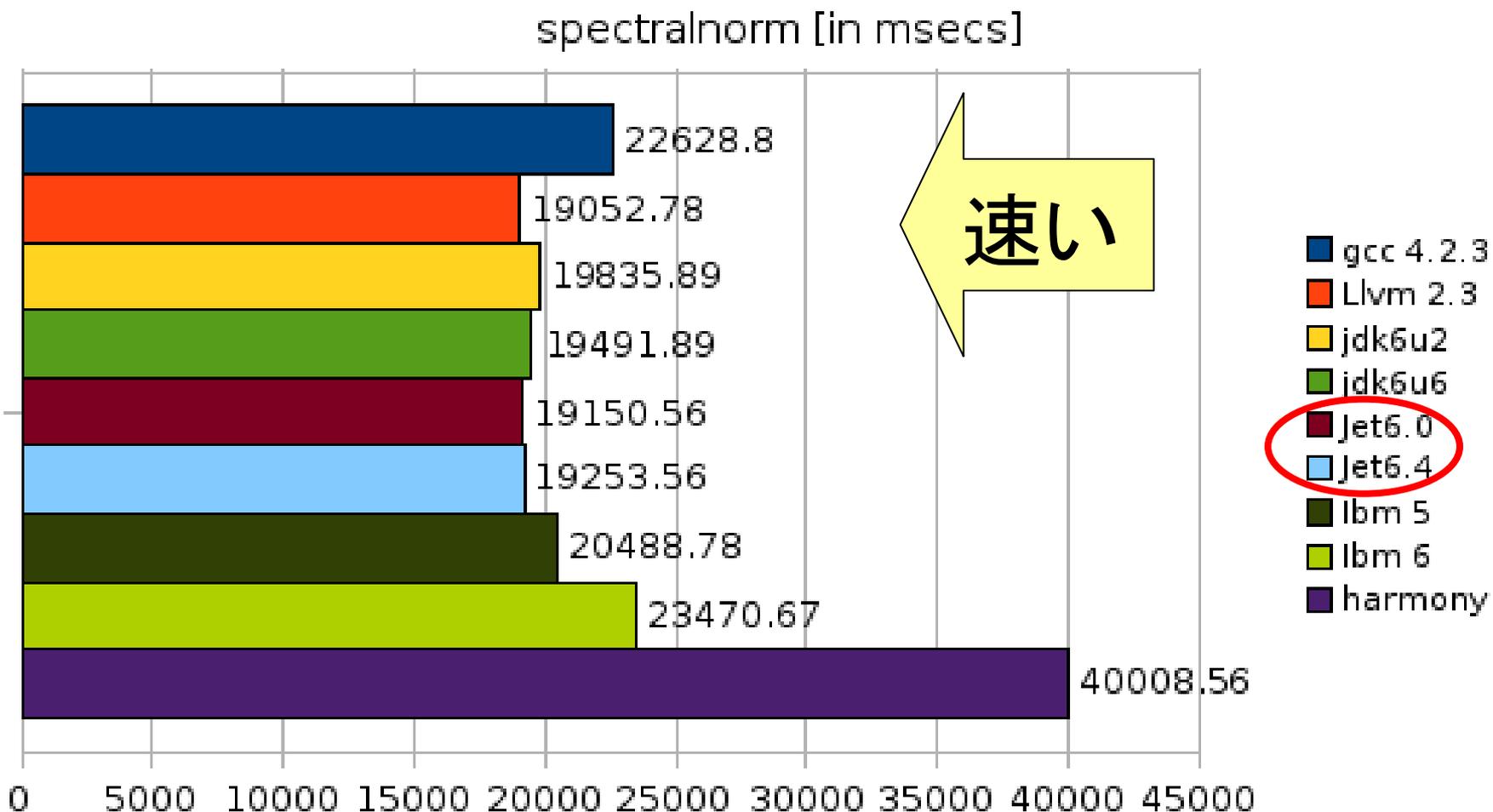
Mandelbrot

mandelbrot [in msec]



gcj > JDK 6 > LLVM > Harmony > JET > IBM JDK

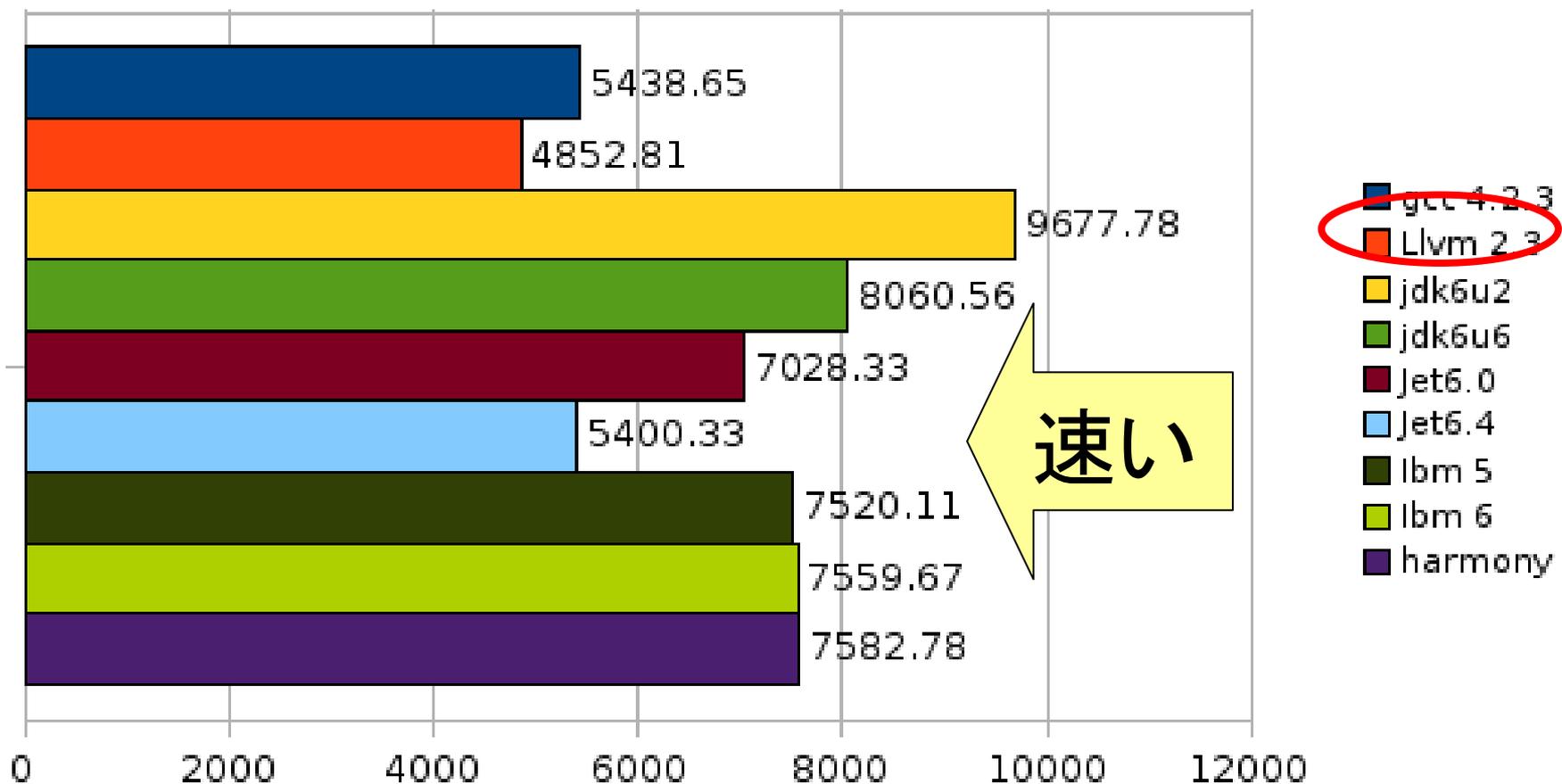
Spectralnorm



JET > LLVM > JDK 6 > IBM JDK5 > gcj > Harmony

Funnkuch

fannkuch [in msec]

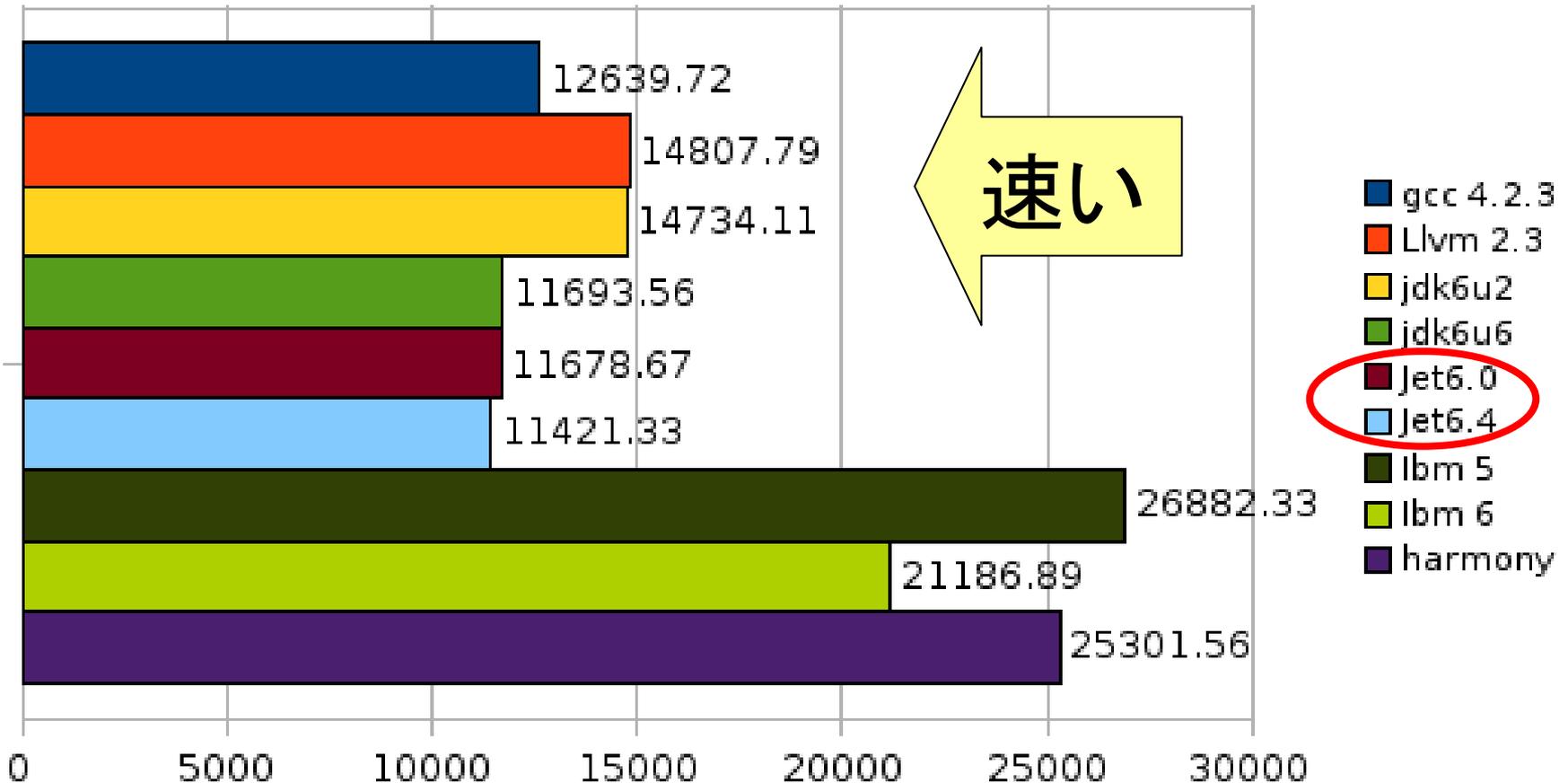


速い

LLVM > JET > gcj > IBM JDK > Harmony > JDK6

NBody

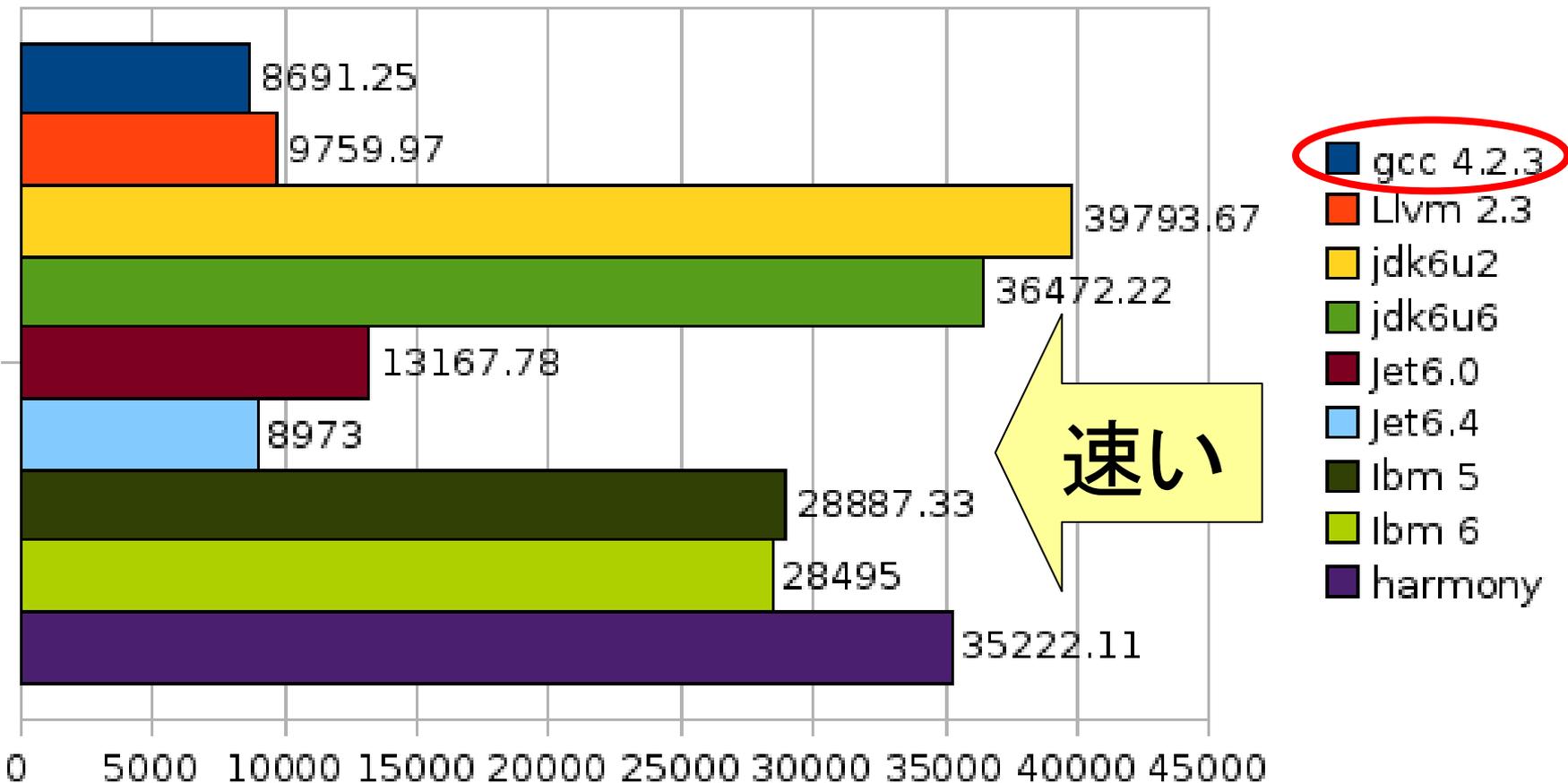
nbody [in msec]



JET > JDK 6 > gcj > LLVM > IBM JDK6 > Harmony

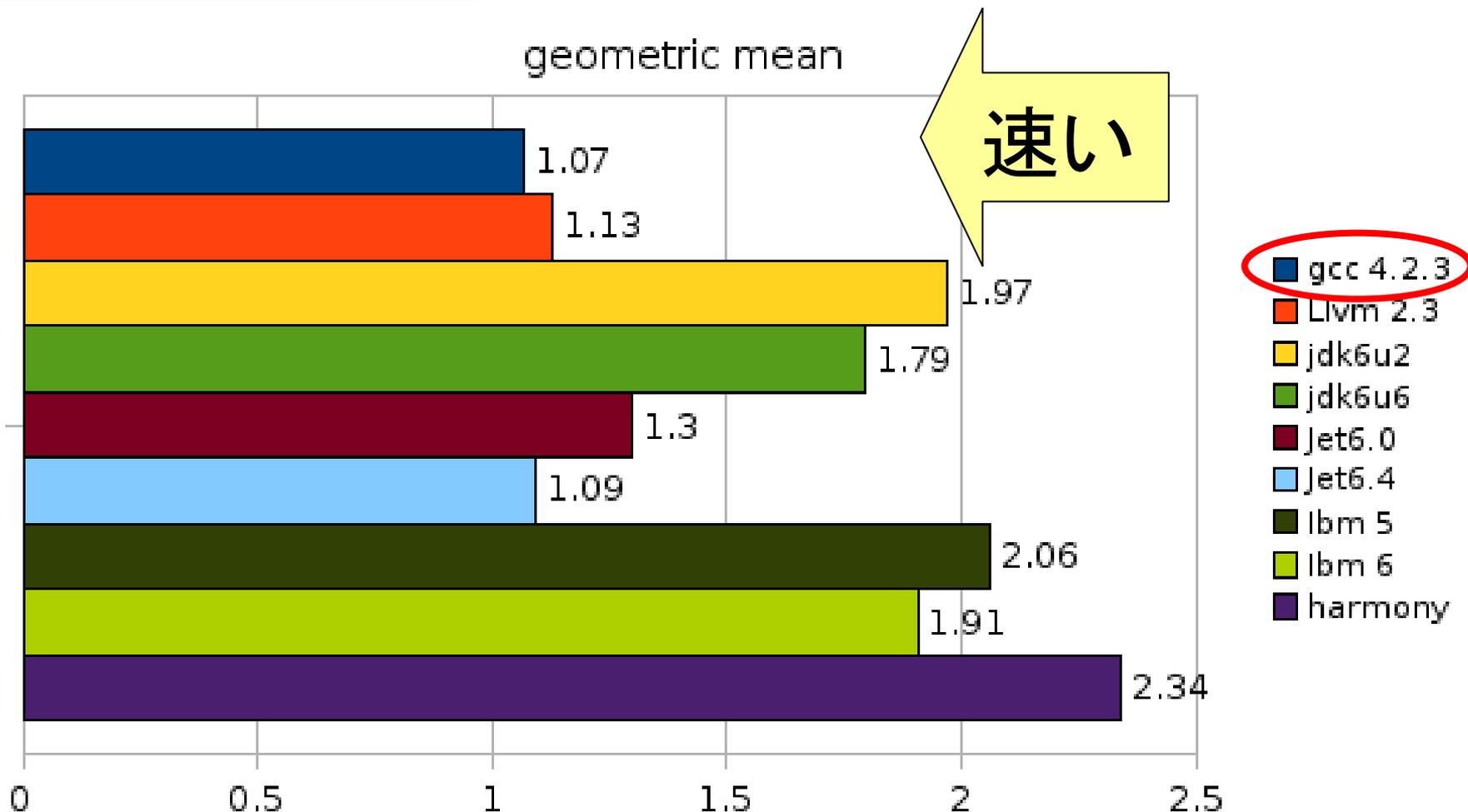
Himeno

himeno m [in msec]



gcj > JET > LLVM > IBM JDK6 > Harmony > JDK6

5個のベンチマーク結果の幾何平均



gcj > JET > LLVM > JDK6 > IBM JDK6 > Harmony

ベンチマークの結論

- GCJが一番速い
- JET6.4が二番目に速い
- LLVMは、かなり速い
- Sun JDKには不得意な処理がある
- Harmonyは改善の余地がある

AOTやLLVMは有望である

目次

- はじめに
- Javaは遅い？速い？
 - JavaとCのベンチマーク
 - JITとAOTとLLVM
- Javaによる数値計算に関する情報
 - 書籍(日本語、英語)
 - ライブラリ
- Javaによる数値計算の応用
 - 数値シミュレーション
 - 高品質数値計算
- まとめ

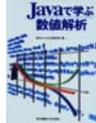
Javaによる数値計算に関する情報(2003年以前)

- Java Numerics
- <http://math.nist.gov/javanumerics/>
- 1998～2003
- JGF(Java Grande Forum)のNumerics WG
- 情報
 - ベンチマーク
 - ライブラリ
 - ツール、ユーティリティー
 - 参考文献
 - 関連リンク

Javaによる数値計算に関する書籍(日本語)(1/2)

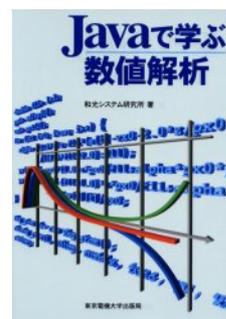
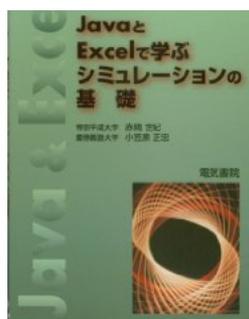
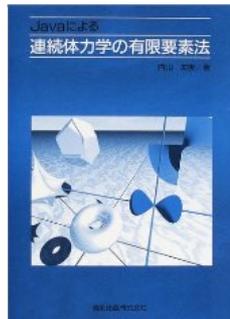
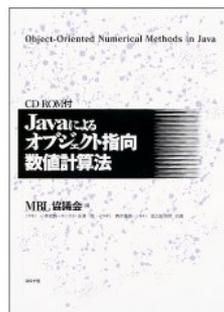
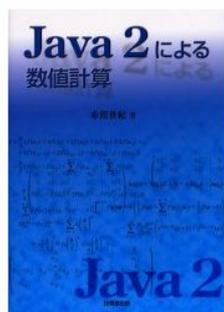
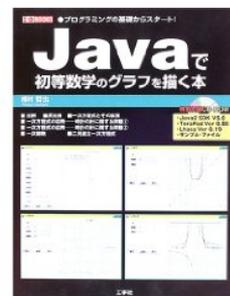
1999年		Java2による数値計算
		CとJavaで学ぶ数値シミュレーション入門
2000年		Javaで学ぶ数値計算
2001年		Javaによる連続体力学の有限要素法
		Javaによる流体・熱流動の数値シミュレーション
2003年		Javaによるオブジェクト指向数値計算法
2004年		理工系のJava
		Javaによる応用数値計算

Javaによる数値計算に関する書籍(日本語)(2/2)

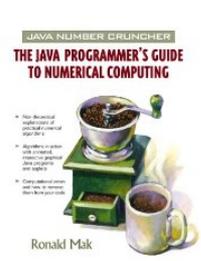
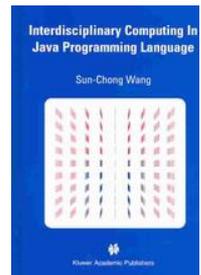
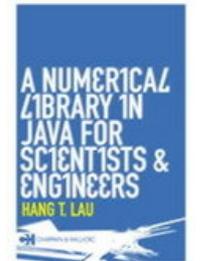
2005年		線形代数とJavaプログラミング
		Javaで初等数学のグラフを描く本
		Javaで学ぶ数値解析
		JavaとExcelで学ぶシミュレーションの基礎
2006年		Javaで学ぶシミュレーションの基礎
2007年		Javaで学ぶ遺伝的アルゴリズム
		CIP法とJavaによるCGシミュレーション

Javaによる数値計算に関する書籍(日本語)

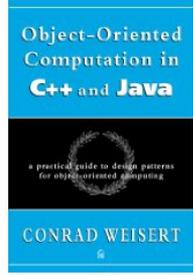
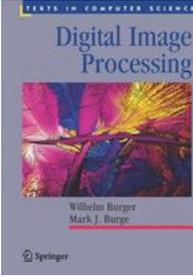
- staticメソッドによる実装
- ベクトルと行列を配列で表現
- 機能不足、拡張性が低い
- 計算と可視化のコードが混在



Javaによる数値計算に関する書籍(英語)(1/2)

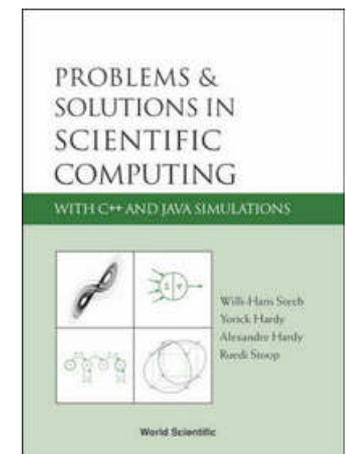
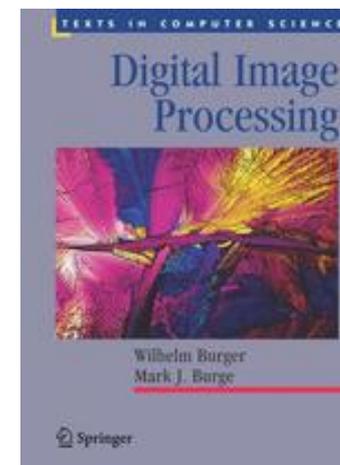
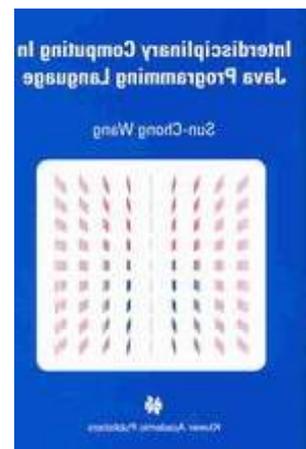
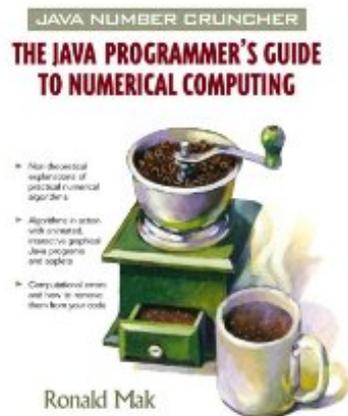
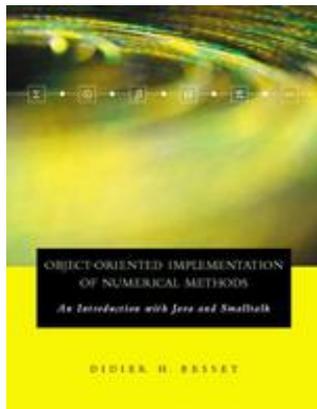
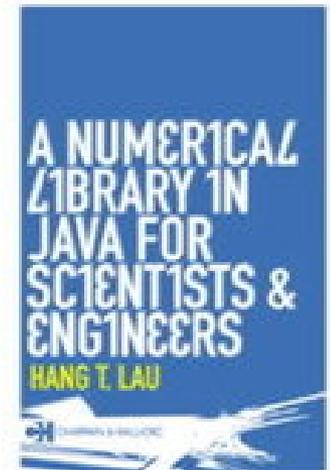
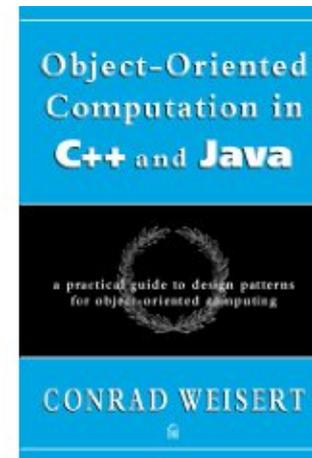
2000年	 The book cover features a green and yellow abstract design with the title 'OBJECT-ORIENTED IMPLEMENTATION OF NUMERICAL METHODS' and the subtitle 'An Introduction with Java and Smalltalk' by DIDIER H. BESSEY.	Object-Oriented Implementation of Numerical Methods An Introduction with Java & Smalltalk
2002年	 The book cover shows a green coffee grinder and a white mug with coffee. The title is 'THE JAVA PROGRAMMER'S GUIDE TO NUMERICAL COMPUTING' by Ronald Mak.	The Java Programmer's Guide to Numerical Computing
2003年	 The book cover is blue with a grid of red and white squares. The title is 'Interdisciplinary Computing In Java Programming Language' by Sun-Chong Wang.	Interdisciplinary Computing in Java Programming Language
	 The book cover is blue with white text. The title is 'A NUMERICAL LIBRARY IN JAVA FOR SCIENTISTS & ENGINEERS' by HANG T. LAU.	A Numerical Library in Java for Scientists and Engineers

Javaによる数値計算に関する書籍(英語)(2/2)

2004年	 <p>PROBLEMS & SOLUTIONS IN SCIENTIFIC COMPUTING WITH C++ AND JAVA SIMULATIONS World Scientific</p>	Problems & Solutions In Scientific Computing With C++ And Java Simulations
2007年	 <p>Object-Oriented Computation in C++ and Java a practical guide to design patterns for object-oriented computing CONRAD WEISERT</p>	Object-Oriented Computation in C++ And Java
	 <p>TEXTS IN COMPUTER SCIENCE Digital Image Processing Wilhelm Burger Mark J. Burge Springer</p>	Digital Image Processing (An Algorithmic Introduction Using Java)

Javaによる数値計算に関する書籍(英語)

- staticメソッドによる実装
- ベクトルと行列を配列で表現
- 機能不足、拡張性が低い
- 単精度floatのみ



Javaによる数値計算ライブラリ

- 開発が終わった(停止?)ライブラリ
 - Java Numerical Toolkit (~1998.5.6)
 - JavaNumerics (1998~2003)
 - JAMA (A JAVa MATrix Package) (1998~2005.7.13)
 - JUMP (Java Ultimate Math Package) (~2002.6.7)
 - JAMPACK (A JAVa Matrix PACKage) (~2005.7.13)
 - JScience (~2007.10.4)
- 開発継続中のライブラリ
 - 数学的構造: JSci、JAS
 - 他言語から変換: netlib-java
 - 商用: JSML
 - 基本数学: Apache Commons Math
 - オブジェクト指向: NFC

Java Numerical Toolkit

- <http://math.nist.gov/jnt/>
- NIST(米国標準技術局)
- ~1998.5.6
- 特殊関数、非線形方程式
- 線形代数
 - 疎行列
 - 簡単な演算
 - LU分解、QR分解

JAMA (A JAvA MAtrix Package)

- <http://math.nist.gov/javanumerics/jama/>
- 1998.8.5～2005.7.13
- MathWorks社とNIST(米国標準技術局)
- 線形代数用ライブラリ
 - Matrixクラス(実行列のみ、倍精度、四則演算)
 - Cholesky分解(対称正定)
 - LU分解(長方形)、QR分解(長方形)
 - 固有値(対称、非対称)
 - 特異値(長方形行列)

JUMP (Java Ultimate Math Package)

- <http://jump-math.sourceforge.net/>
- Ernst de Haan
- ~2002.6.7
- 任意精度整数、任意精度実数、有理数

JAMPACK (A JAvA Matrix PACKage)

- <ftp://math.nist.gov/pub/JamPack/JamPack/AboutJamPack.html>
- ~2005.7.13
- NIST(米国標準技術局) とMaryland大学
- 線形代数用ライブラリ
 - 複素数行列のみ
 - ピボット付きLU分解、Cholesky分解、QR分解
 - 固有値(対称、一般)、特異値
 - Hessenberg形式、Schur分解

JScience

- <http://jscience.org/>
- ~2007.10.4
- JSR-275(javax.measure)のリファレンス実装
- 数学的構造(群、環、体、ベクトル空間)
- 複素数、有理数、多項式、有理多項式
- 任意精度整数、任意精度実数
- 複素行列、疎密行列、LU分解

- <http://jsci.sourceforge.net/>
- JSci e-group
- 数学的構造(群、環、体、ベクトル空間)
- 非線形方程式、統計、ウェーブレット、作図
- 行列
 - 密疎行列、実行列のみ
 - 四則演算、LU分解、Cholesky分解、QR分解
 - 固有値、特異値

JAS (Java Algebra System)

- <http://krum.rz.uni-mannheim.de/jas/>
- 代数計算用ライブラリ
- タイプセーフ(ジェネリクス)、マルチスレッド対応
- 可換で可解な多項式クラス
- 四則演算、最大公約数、乱数

netlib-java

- <http://code.google.com/p/netlib-java/>
- netlib(blas, eispack, lapackなど)をF2Jで変換
- 行列
 - 実数行列のみ、密疎行列、圧縮行列
 - LU分解、QR分解、Cholesky分解
 - 固有値、特異値

Apache Commons Math

- <http://commons.apache.org/math/>
- 数学の基本的ライブラリ
- データ生成、複素数、統計、最適化、GA
- 非線形方程式、常微分方程式
- 線形代数
 - 実行列のみ、ブロック行列、疎行列
 - LU分解、QR分解、Cholesky分解(対称のみ)
 - 固有値(対称のみ)、特異値

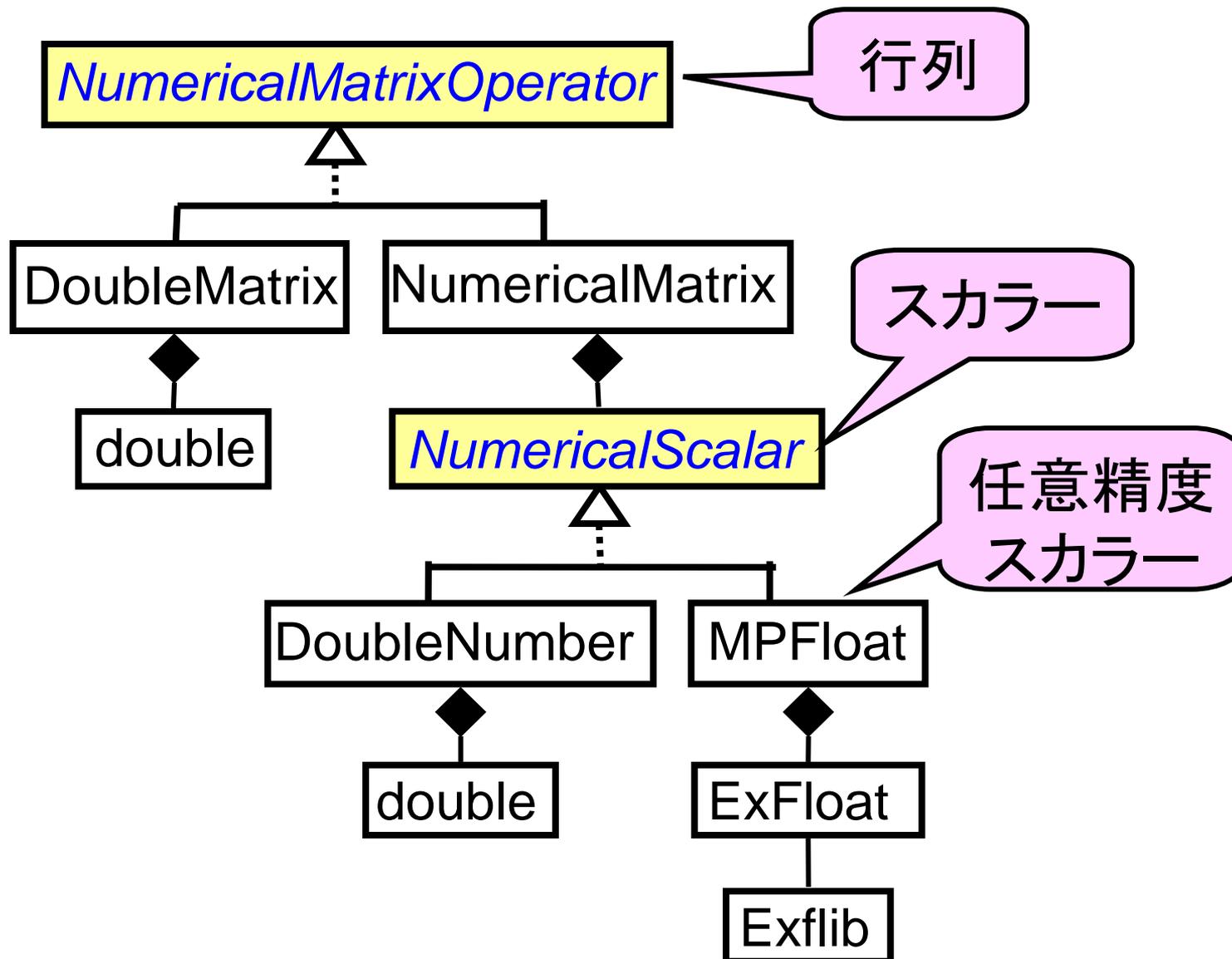
JMSL

- <http://www.vni-j.com/products/imsjl/jmsjl/jmsjl.html>
- Visual Numerics社の製品
- 数値計算ライブラリIMSLのJava版
- 多くの機能はstaticメソッド実装
- 常微分方程式、FFT、補間、非線形方程式
- 線形計画法、回帰分析、フィルタ
- 行列
 - ベクトルと行列データを配列で表現
 - 疎行列、複素行列、倍精度
 - 四則演算、LU分解、QR分解、Cholesky分解
 - 固有値、特異値

NFC(Numerical Foundation Classes)

- <http://jamox.mklab.org/>
- 九州工業大学 古賀研究室
- オブジェクト指向設計
- 日本語Javadoc(<http://jamox.mklab.org/doc/javadoc/>)
- 線形方程式、非線形方程式
- 常微分方程式、FFT、信号処理、制御系設計
- 汎用数値型、複素数、多項式、有理多項式
- 行列
 - 汎用数値型を成分とする行列
 - 四則演算、LU分解、QR分解、Chelesky分解
 - 固有値、一般化固有値、特異値

NFCの汎用数値クラス



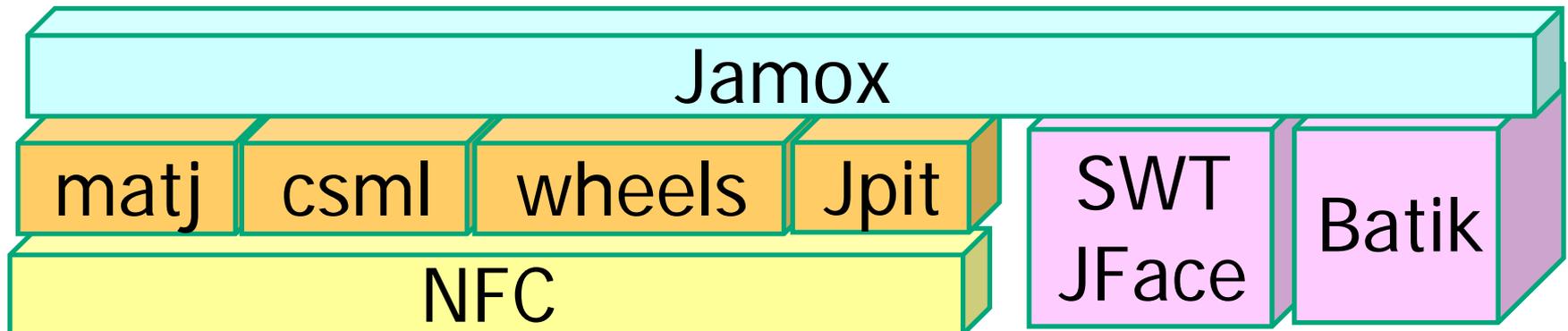
目次

- はじめに
- Javaは遅い？速い？
 - JavaとCのベンチマーク
 - JITとAOTとLLVM
- Javaによる数値計算に関する情報
 - 書籍(日本語、英語)
 - ライブラリ
- Javaによる数値計算の応用
 - 数値シミュレーション
 - 高品質数値計算
- まとめ

Jamox (<http://jamox.mkclab.org/>)

『制御系モデリング・シミュレーションツール』

- モデリング
 - モデル作成GUI (SWT、JFace、Batik)
 - データのXML保存、読込 (JAXB)
 - システム解析・設計 (Scripting API)
- シミュレーション
 - 時間応答 (ステップ応答等)
 - 周波数応答 (ボード線図等)



Jamoxの利用画面

ドラッグ & ドロップ

ユーザ定義ブロック

変数
テーブル

変数の登録
情報の表示

変数名	値
Mat D	[[2.0000000...
Mat A	[[1.0000000...
Real c	7.0
Real b	2
Mat E	[[3.0000000...

```
7.0  
>D = A#2  
=== ( 1 x 2) Matrix ===  
      ( 1)  
      ( 2)  
( 1 2.00000000E+00 2.00000000E+00  
E = * [[2] [1]]  
=== ( 1 x 1) Matrix ===  
( 1) 3.00000000E+00
```


matj (<http://matj.mklab.org/>)

『数値計算言語MaTXの処理系』 (<http://www.matx.org/>)



- **JavaCC**による構文定義
- MaTXコードからJavaコード生成
- MaTXコードからCコード生成
- 数値計算エンジン(インタプリタ)
Scripting API(JSR223)に対応

数値計算言語

- Matlab, Mathematica, Scilab, MaTX
- 行列を言語レベルで扱う事ができる

$E = AB + CD$ (数学的表現)

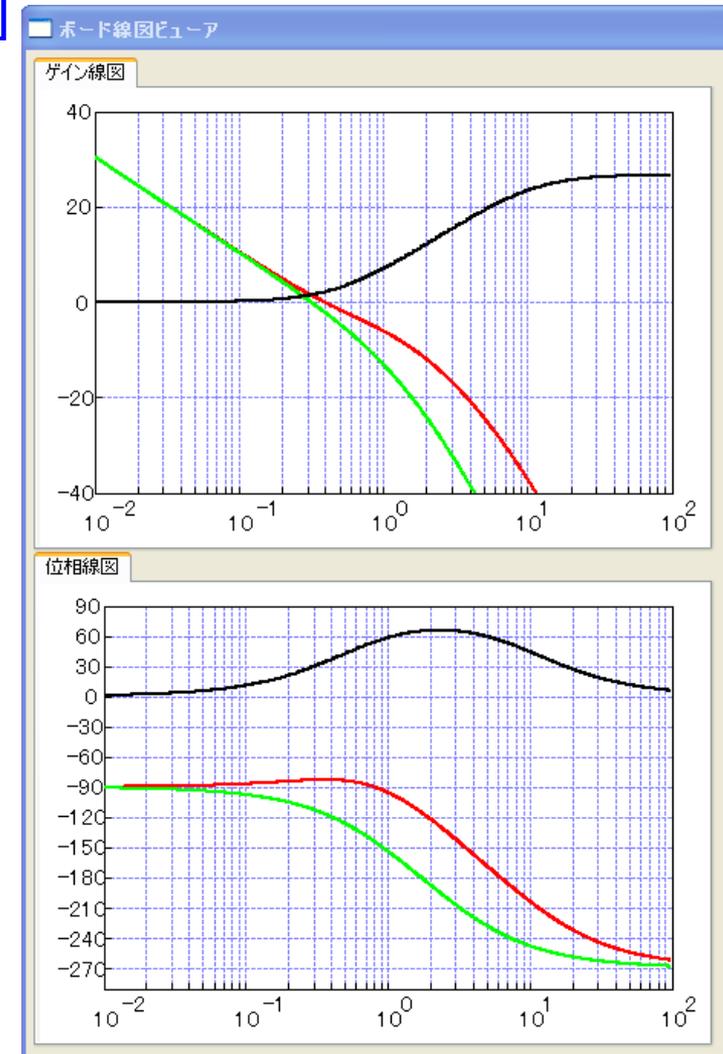
$E = A * B + C * D;$ (数値計算言語)

$E = A.multiply(B).add(C.multiply(D));$ (Java言語)

可読性、保守性が高い

『対話型グラフ描画パッケージ』

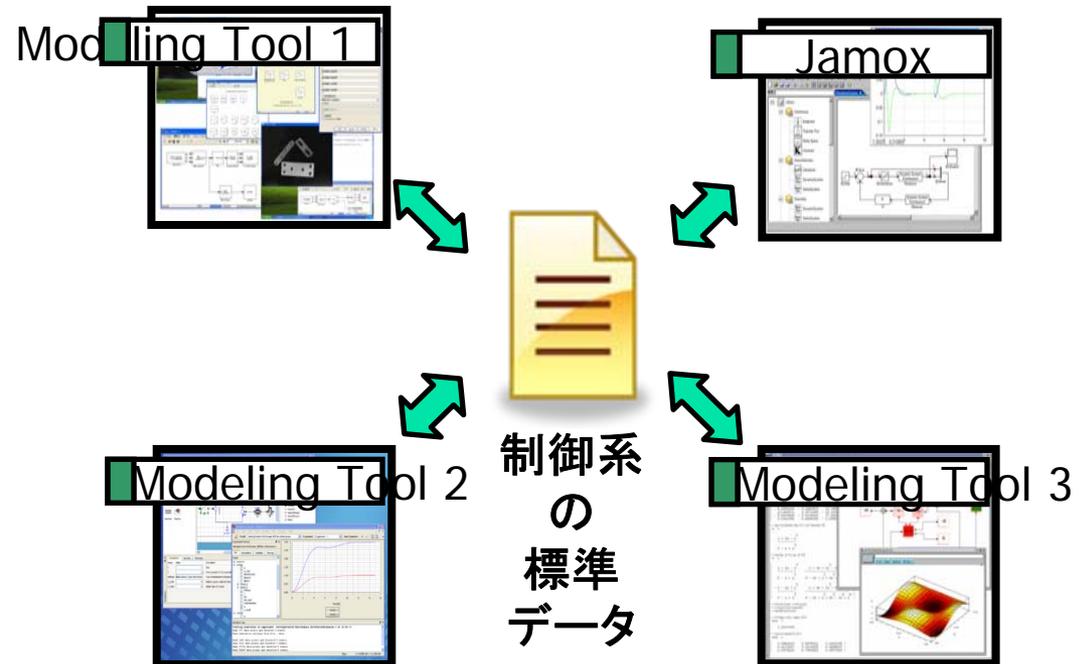
- SWT, JFaceを利用
- 時間応答グラフ
- 周波数応答グラフ
- グラフとパラメータが連動
- Jamoxと連携



CSML (<http://csml.mklab.org/>)

『制御系モデリング言語パッケージ』

- XML Schemaでデータ構造定義(妥当性検証、拡張性)
- JAXBを用いてアクセスコード生成
- データの相互変換

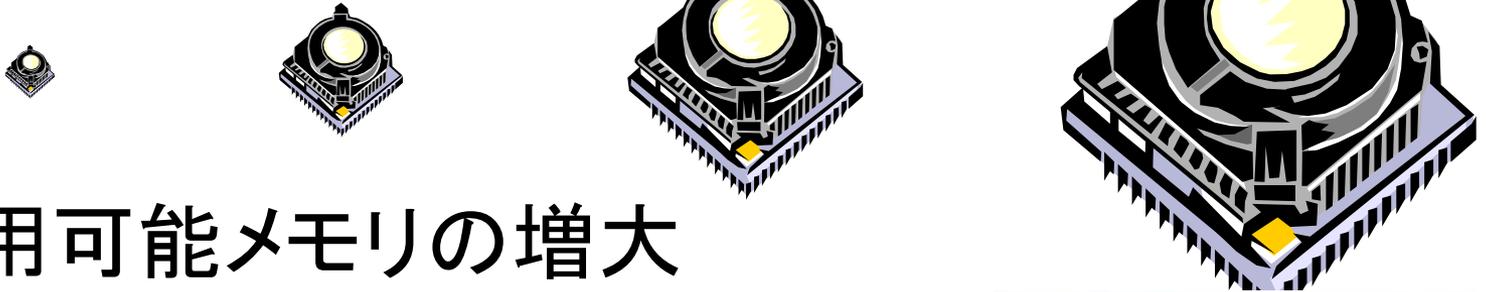


目次

- はじめに
- Javaは遅い？速い？
 - JavaとCのベンチマーク
 - JITとAOTとLLVM
- Javaによる数値計算に関する情報
 - 書籍(日本語、英語)
 - ライブラリ
- Javaによる数値計算の応用
 - 数値シミュレーション
 - 高品質数値計算
- まとめ

次世代の高品質数値計算

■ CPUの高速化



■ 利用可能メモリの増大

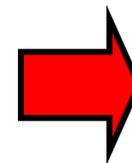


次世代の数値計算

高精度

+

品質保証



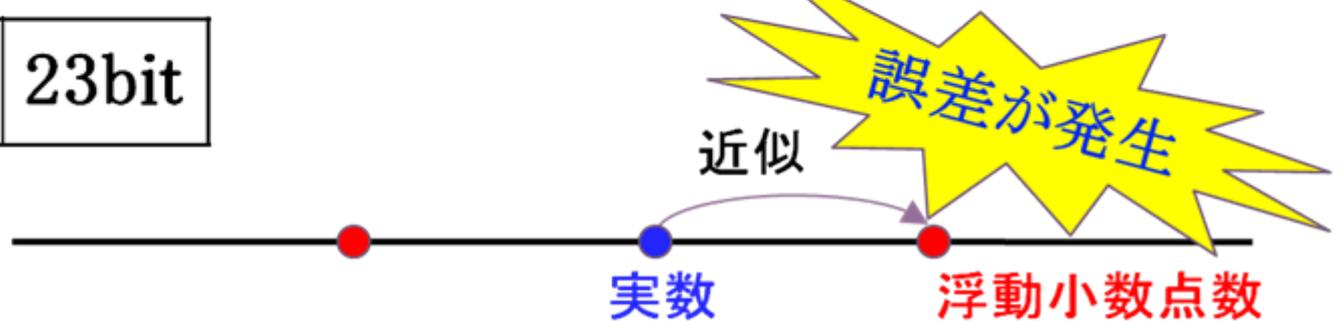
高品質
数値計算

浮動小数点数の丸め誤差

符号	指数部	仮数部
----	-----	-----

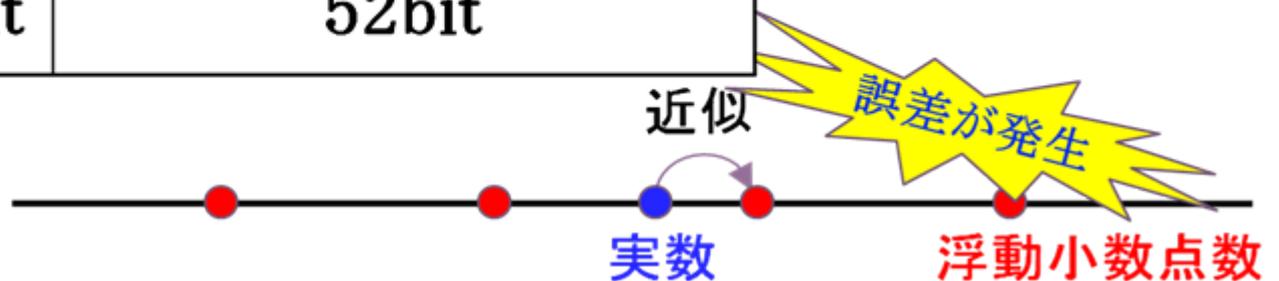
◆ 単精度浮動小数点型(10進約7桁) float型

1bit	8bit	23bit
------	------	-------



◆ 倍精度浮動小数点型(10進約16桁) double型

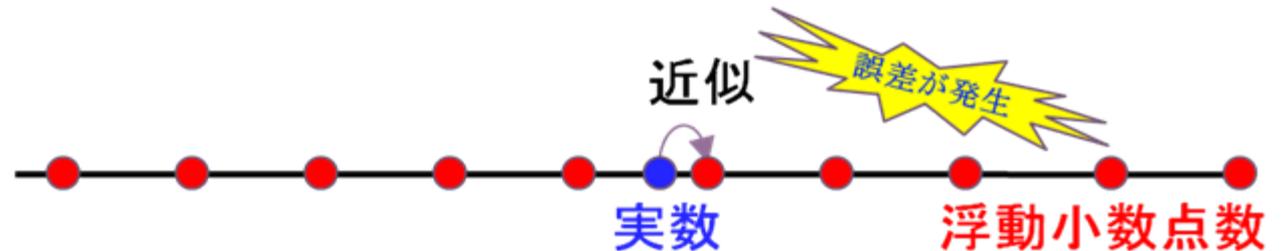
1bit	11bit	52bit
------	-------	-------



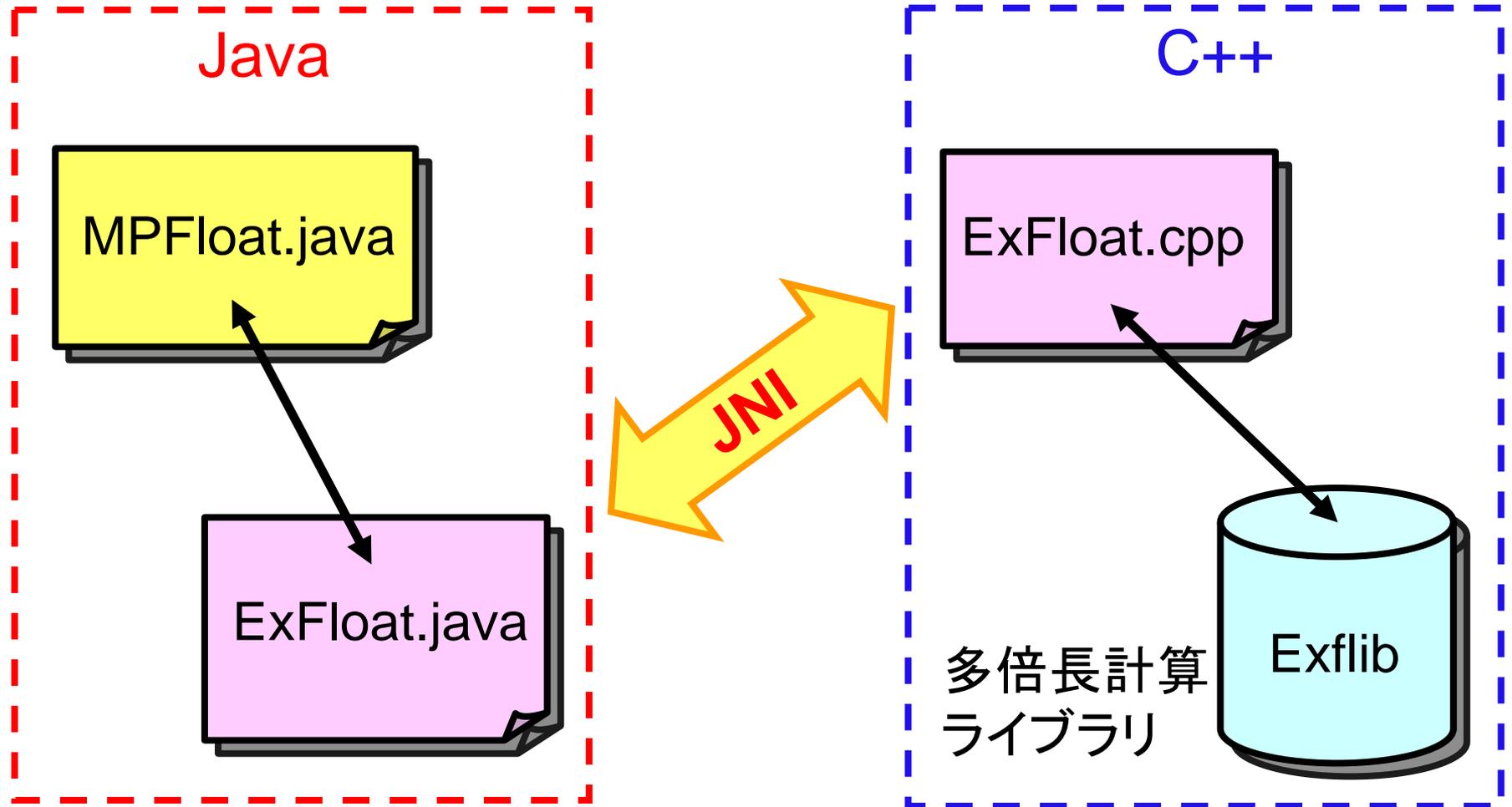
多倍長精度浮動小数点数 (任意桁)



- ◆ 指数部と仮数部が任意ビット長
- ◆ 仮数部を大きくすることで、誤差の影響を低減

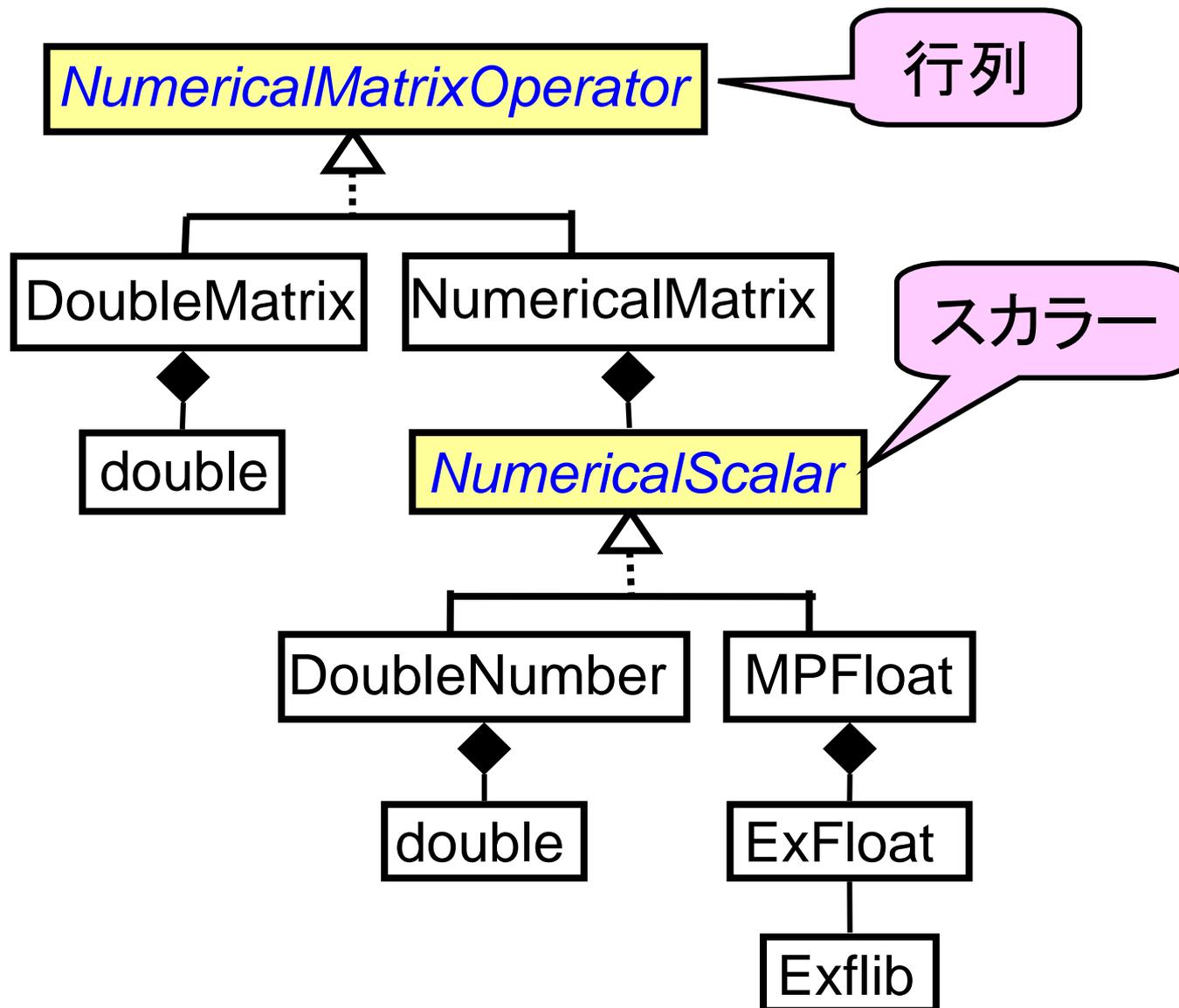


MPFloatパッケージ



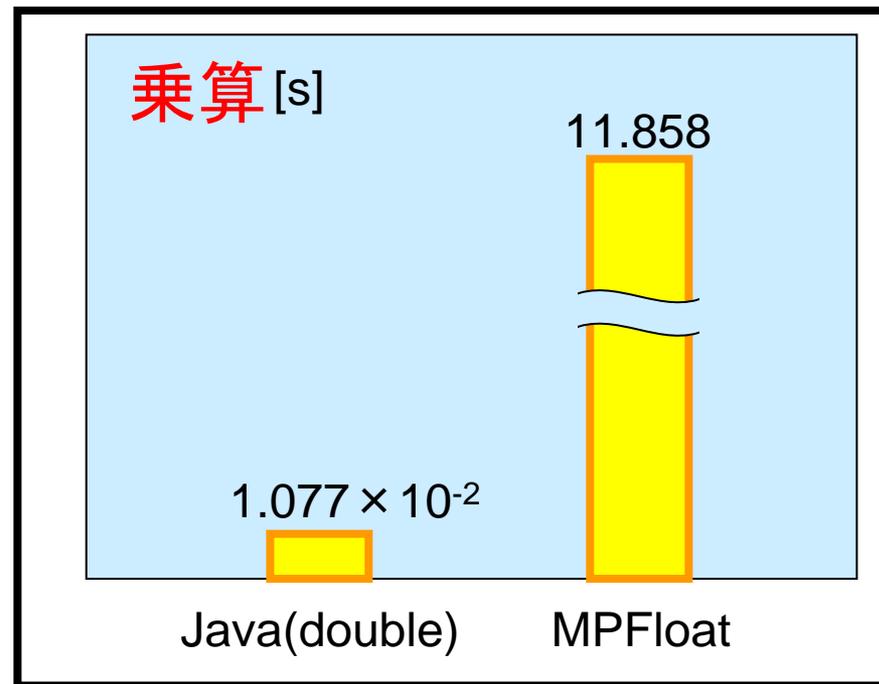
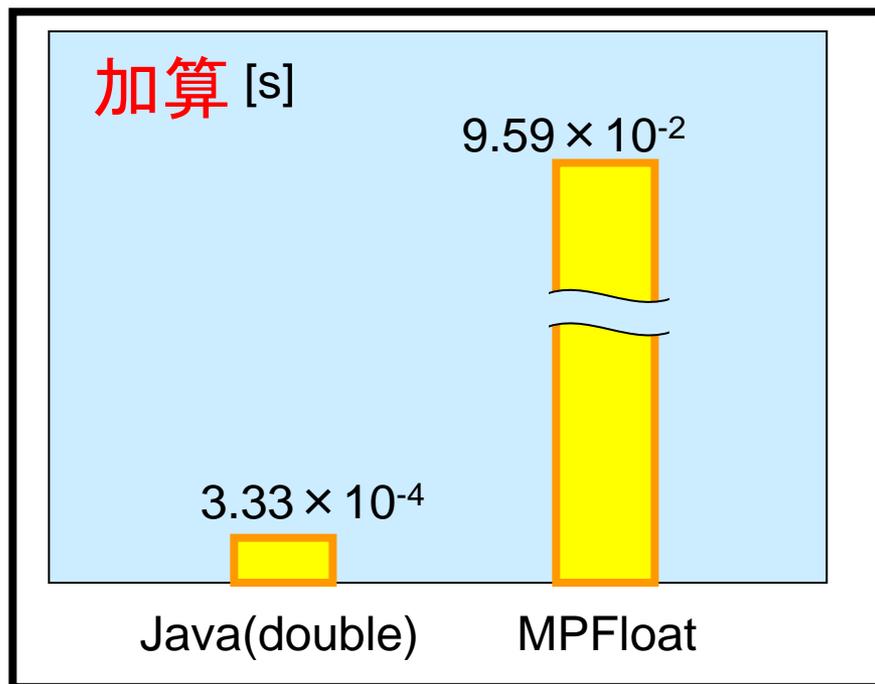
Exflib: 藤原宏志(京都大学)

NFCの汎用数値クラス



速度性能評価

- 100 × 100の行列の加算と乗算
倍精度(10進16桁)と多倍長(10進115桁)
- Window XP, Athlon 64 (1.8GHz)
- 数百倍の速度差(JNIのオーバーヘッド)



精度性能評価(1)

■ 状態フィードバックによる極配置問題

System:

$$A = \begin{bmatrix} 1 \times 10^{-4} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 \times 10^{-4} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \times 10^{-4} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 4 \times 10^{-4} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 5 \times 10^{-4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 5 \times 10^5 \end{bmatrix}, \quad B = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

指定極: $P = -1, -5, -10, -15, -20, -25$

指定極と(A-BF)固有値の差

■ 倍精度 (商用ツール)

=== Error of poles (6 x 1) ===
(1)

0.0038秒

(1) (-5.743007289519024e+2, 0.0000000000000000e+0)
(2) (2.861960362183150e+2, 4.95792925226331e+2)
(3) (2.861960362183150e+2, -4.95792925226331e+2)
(4) (3.986909989200000e-3, 0.0000000000000000e+0)
(5) (-3.393522412700000e-3, 0.0000000000000000e+0)
(6) (2.083002602000000e-4, 0.0000000000000000e+0)

■ 多倍長 (10進115桁)

=== Error of poles (6 x 1) ===
(1)

0.4008秒

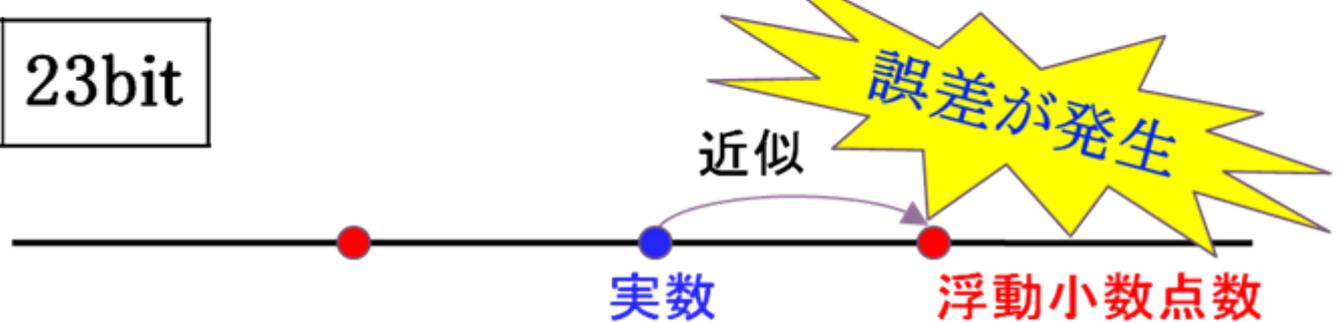
(1) (1.0480643517590362e-85, 0.0000000000000000e+0)
(2) (-5.2004154564111335e-83, 0.0000000000000000e+0)
(3) (8.2230357211239218e-82, 0.0000000000000000e+0)
(4) (-3.1250414993070453e-81, 0.0000000000000000e+0)
(5) (4.3707437346488162e-81, 0.0000000000000000e+0)
(6) (-2.0534137254471678e-81, 0.0000000000000000e+0)

浮動小数点数の丸め誤差

符号	指数部	仮数部
----	-----	-----

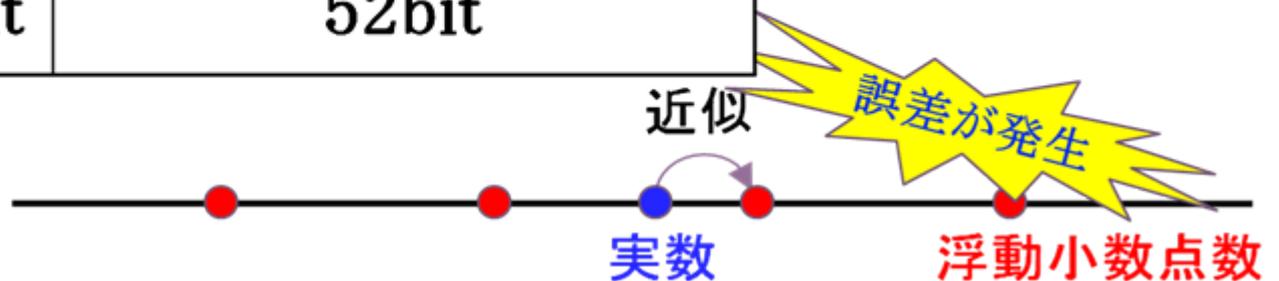
◆ 単精度浮動小数点型(10進約7桁) float型

1bit	8bit	23bit
------	------	-------



◆ 倍精度浮動小数点型(10進約16桁) double型

1bit	11bit	52bit
------	-------	-------



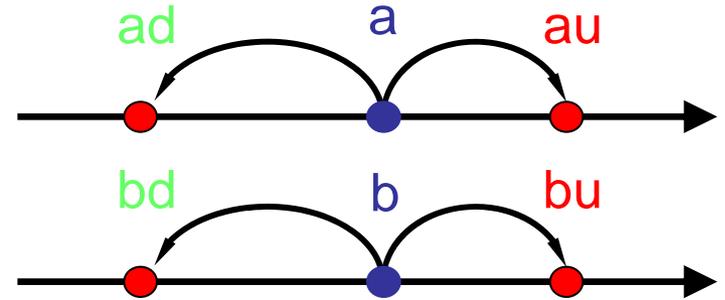
$c = a + b$ の精度保証付き数値計算

区間演算

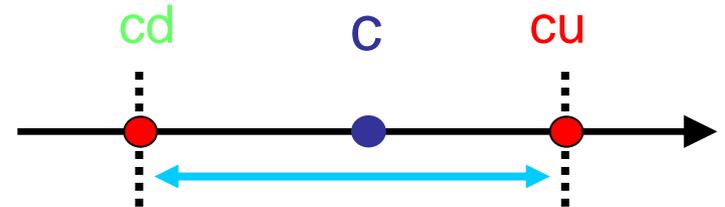
上向きの丸め: $au = \Delta a$, $bu = \Delta b$

下向きの丸め: $ad = \nabla a$, $bd = \nabla b$

上限と下限 : $cu = \Delta(au + bu)$, $cd = \nabla(ad + bd)$



$$\Downarrow$$
$$cd \leq c \leq cu$$

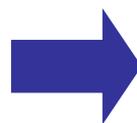


真の解が含まれる(浮動小数点数を境界とする)集合

精度保証付き数値計算

計算結果の品質保証を行う

真の解は存在する？
近似解の精度は？



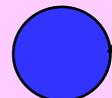
真の解と近似解を
含む集合を求める

計算結果は集合

真の解と近似解を含む集合



真の解



近似解

JCGA (Java Computing Guaranteed Accuracy)

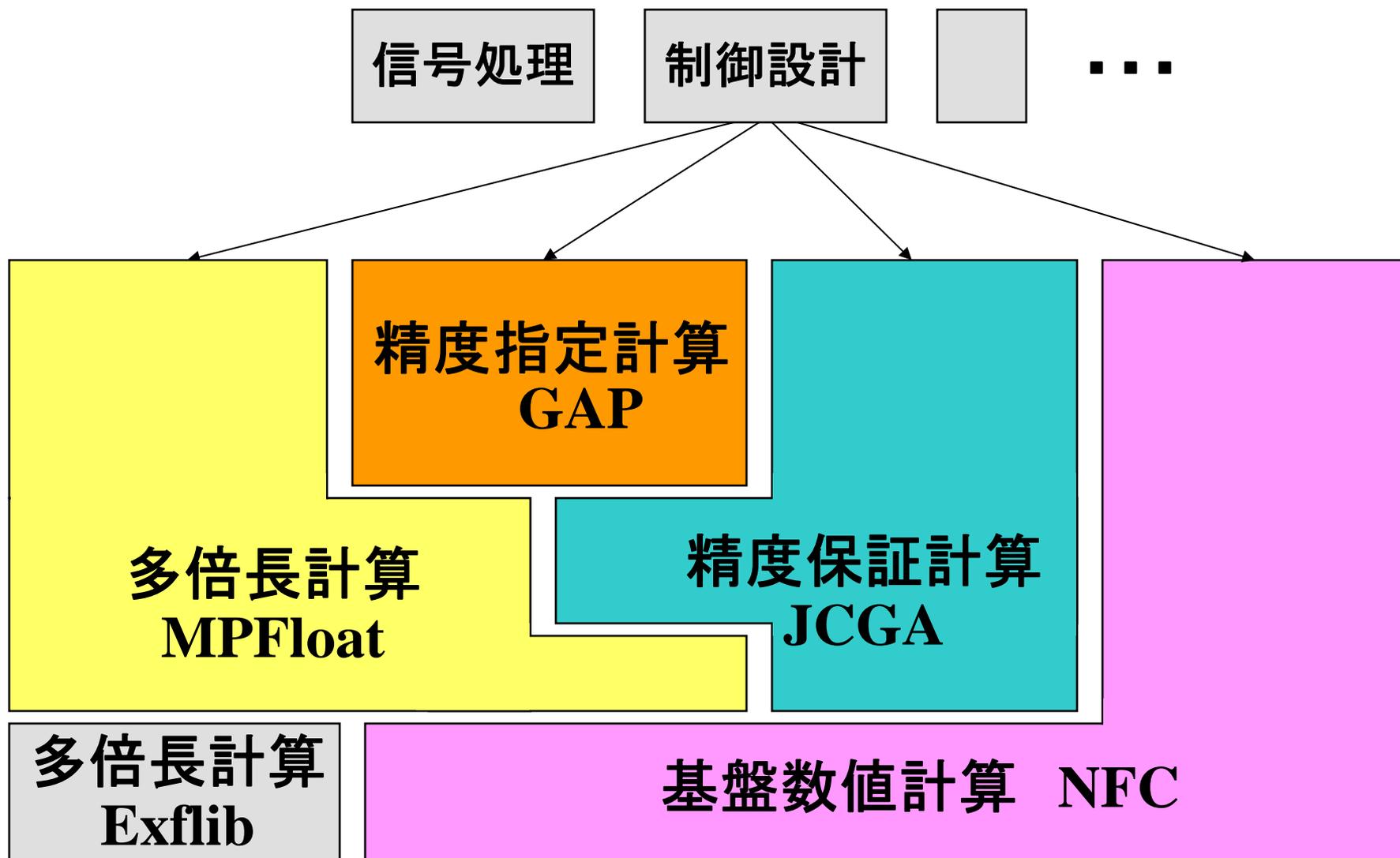
主要クラス

- Interval・IntervalMatrixクラス
区間演算、区間行列演算
- LinearVerifierクラス
線形方程式求解の精度保証
- EigenVerifierクラス
固有値問題の精度保証
- HornerVerifierクラス
多項式評価の精度保証
- IntervalDerivativeクラス
微分値の精度保証
- NonLinearVerifierクラス
非線形方程式求解の精度保証

参考文献

- { 大石進一、2001、「精度保証付き数値計算」、コロナ社
- { G. I. Hargreaves、2002、Interval Analysis in MATLAB
- { G. I. Hargreaves、2002、Interval Analysis in MATLAB
- { **山本の定理**：
大石進一、2003、「応用解析セミナー 数値計算」、裳華房
- { **Rumpの方法**：Siegfried M. Rump、2000
Computational error bounds for multiple eigenvalues
- { **山本の定理の応用**：
大石進一、2003、「応用解析セミナー 数値計算」、裳華房
- { **自動微分法**：
大石進一、2000、「Linux数値計算ツール」、コロナ社
- { **クラフチック法**：
大石進一、2001、「精度保証付き数値計算」、コロナ社

数値計算環境の構成



まとめ

- CとJavaの速さは同程度
- AOTやLLVMは有望である
- 書籍中のコードは機能不足、拡張性が低い
- 実用的なライブラリが利用可能
- 数値シミュレーションツールが利用可能
- 計算機資源を活用した高品質数値計算