

# PCクラスタ上での 連立一次方程式の解の精度保証

---

大石進一, 荻田 武史  
(早稲田大学)

# 概要

---

- 分散並列計算環境(PCクラスタ)において連立一次方程式の数値解の精度保証を行う
- 並列計算用の数値計算ライブラリ ScaLAPACKを用いる
- 大規模な問題(行列サイズ:最大1万次元)で高速かつシャープに精度保証する
- 現状での問題点と解決に向けて

線形問題

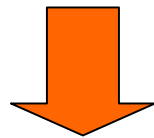
非線形問題

固有値問題

連立一次方程式

密行列

疎行列



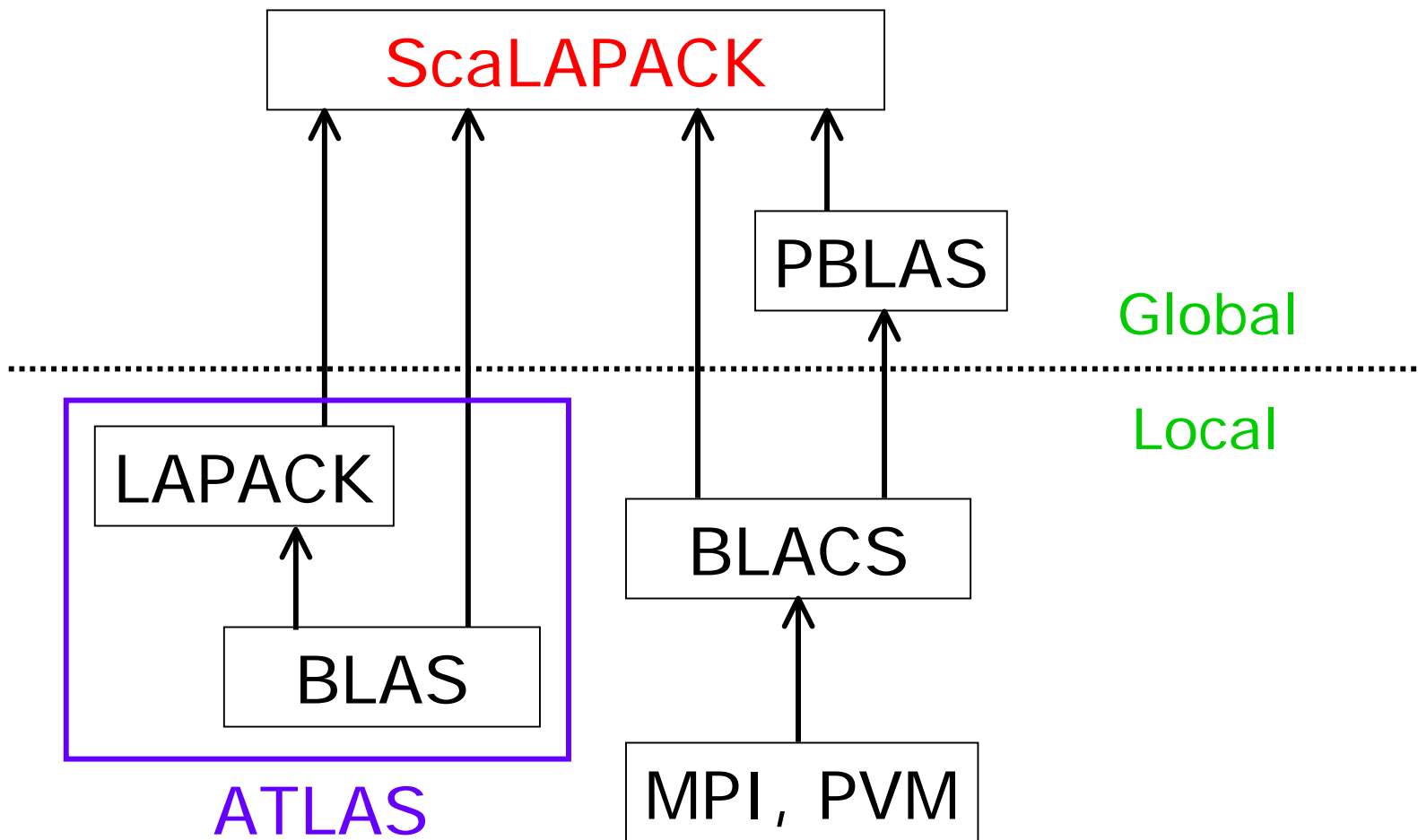
高速・安定な数値計算ライブラリ

PC: LAPACK (BLAS, ATLAS)

スーパーコン: LAPACK, ScaLAPACK

PCクラスタ: ScaLAPACK (MPI, PVM)

# ScaLAPACKの構成

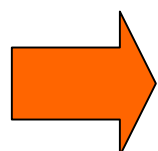


# 連立一次方程式と精度保証(1)

$F$  : 倍精度浮動小数点数の集合

$A \in F^{n \times n}$ ,  $\mathbf{b} \in F^n$  に対し

$A\mathbf{x} = \mathbf{b}$  を解く

  $\begin{cases} \mathbf{x}^* & : \text{厳密解} \\ \tilde{\mathbf{x}} & : \text{数値解} \end{cases}$

# 連立一次方程式と精度保証(2)

$$\|A^{-1}\|_{\infty} \leq \alpha \quad \Rightarrow \quad \|\tilde{\mathbf{x}} - \mathbf{x}^*\|_{\infty} \leq \varepsilon_{\text{ABS}}$$

$$\Rightarrow \quad \frac{\|\tilde{\mathbf{x}} - \mathbf{x}^*\|_{\infty}}{\|\mathbf{x}^*\|_{\infty}} \leq \varepsilon_{\text{REL}}$$

[1] S. Oishi and S. Rump (2000)

[2] T. Ogita, S. Oishi and Y. Ushiro (2001)

# LU分解を利用した精度保証

$\left\{ \begin{array}{l} R: A^{-1} \text{の近似} \\ I: \text{単位行列} \end{array} \right.$  のとき,  $\|RA - I\|_{\infty} < 1$  ならば

$$\|A^{-1}\|_{\infty} \leq \frac{\|R\|_{\infty}}{1 - \|RA - I\|_{\infty}}$$

LU分解の結果を利用して  
上限  $\beta$  を高速に計算

➡  $\beta < 1$  なら精度保証可能

# 数値実験

---

## 目的

- 行列乗算 (PDGEMM) の性能評価
- 連立一次方程式の数値解の精度保証

## コンピュータ環境

- PC (Pentium III 800MHz,  
Memory 256MB)
- 最大64台, LAN接続 (Gigabit ether)



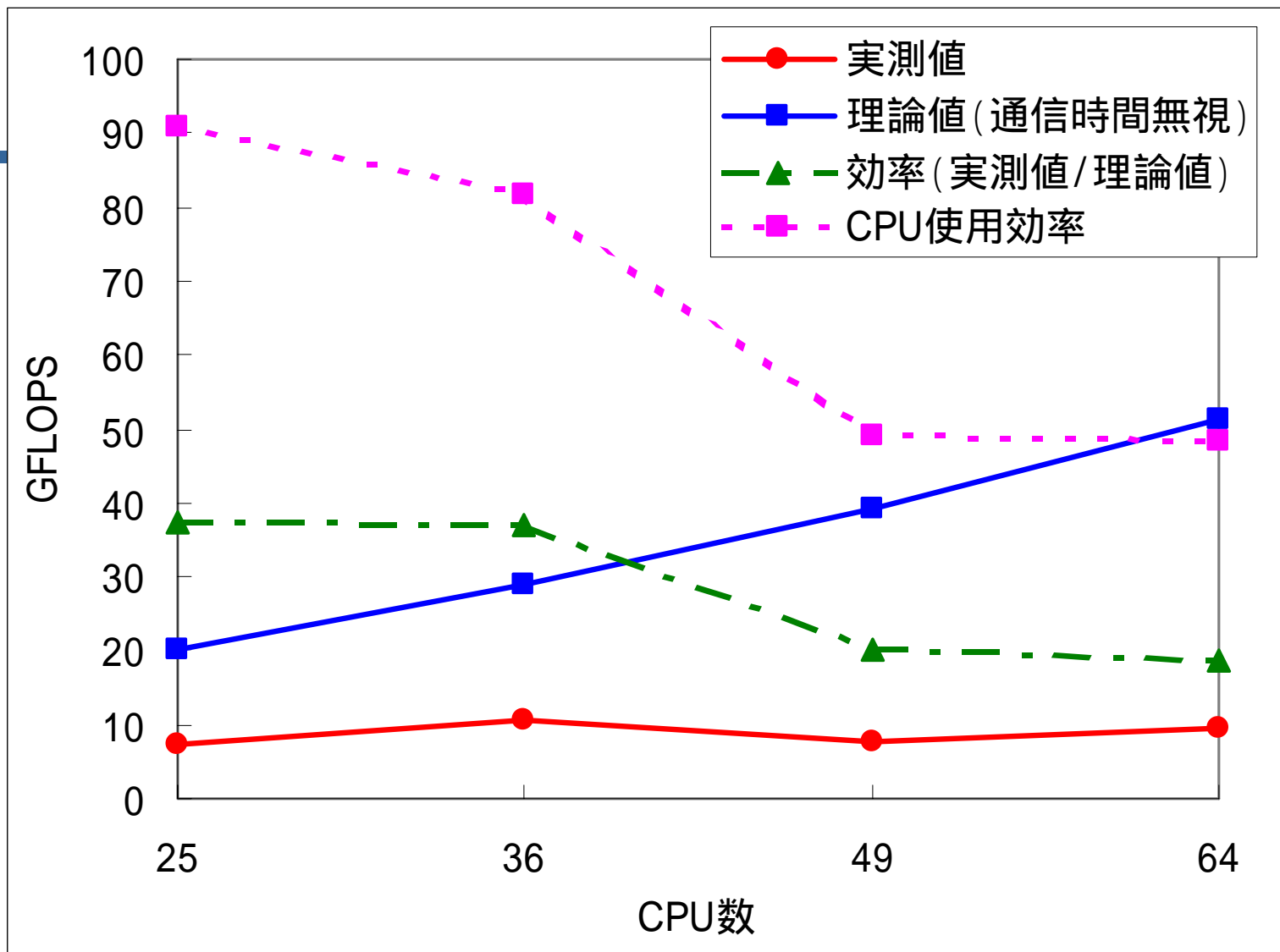
# 行列乗算 (PDGEMM)

---

$A, B$  : 10000 × 10000 のランダム行列

- $C = A \times B$  を計算
- PDGEMM(PBLAS)を使用
- DGEMM(BLAS)はATLASで高速化

# 行列乗算 (PDGEMM) の性能



# 連立一次方程式の精度保証

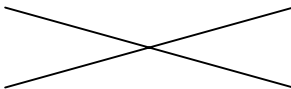
- 係数行列の次元数：100 ~ 10000
- 数値解の計算：PDGESV(ScaLAPACK)
- 数値解の精度保証：  
LU分解を用いた高速精度保証法

$$\frac{\|\tilde{\mathbf{x}} - \mathbf{x}^*\|_{\infty}}{\|\mathbf{x}^*\|_{\infty}} \leq \underline{\varepsilon_{\text{REL}}}$$

## 連立一次方程式の数値解の精度保証

行列サイズ	数値解の 計算時間	精度保証に 要した時間	保証相対精度 $\varepsilon_{\text{REL}}$
100	0.76	0.34	1.5E-12
500	3.89	0.76	1.4E-10
1000	8.29	1.90	1.9E-09
5000	55.14	34.80	1.3E-07
10000	182.53	169.70	

# LU分解を用いた $\|RA - I\|_{\infty}$ の上限 $\beta$ の計算

行列サイズ	$\beta$	保証相対精度 $\varepsilon_{\text{REL}}$
100	1.3E-08	1.5E-12
500	2.6E-05	1.4E-10
1000	1.2E-03	1.9E-09
5000	0.5	1.3E-07
10000	12.6 (>1)	

# 参考文献

---

- 1) S. Oishi, S. Rump: Fast Verification of Solutions of Matrix Equations, Numer. Math., to appear (2001)
- 2) ScaLAPACK HomePage:  
<http://www.netlib.org/scalapack/>
- 3) ScaLAPACK Tutorial(日本語版)  
<http://phase.etl.go.jp/phase/lapack-j/ScaLAPACK/>