EX17308（東京大学情報基盤センター推薦課題）

課題代表者氏名（所属）： 寺尾 剛史 （芝浦工業大学）

研究課題名：超大規模な線形計算に対する精度保証付き数値計算法の開発と評価

- 大規模連立1次方程式の数値解に対する精度保証付き数値計算を実装する
- 係数行列を正定値対称行列に限定し精度保証付を行う
- スーパーコンピュータの特性を考慮した実装を目指す

- 本課題では、行列サイズを 100,000 ～ 400,000 の密行列を想定する
- 計算量がコレスキー分解の計算量の2倍から5倍程度の手法を開発し，実装する

丸め誤差の影響

- 連立1次方程式の数値解

$$\begin{pmatrix} 64919121 & -159018721 \\ 41869520.5 & -102558961 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

- 数値計算上で残差の大きさは零（MATLAB）

$$\begin{pmatrix} 64919121 & -159018721 \\ 41869520.5 & -102558961 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{x} \\ \hat{y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

- 真の解： $(x, y) = (205117922, 83739041)$
- 数値解（MATLAB）： $(\hat{x}, \hat{y}) = (106018308.0071325, 43281793.0017831)$

検算が成功する

- 残差の確認のみでは不十分な場合がある
- 大規模問題ではさらに誤差が大きくなる可能性がある

計算の品質を保証

精度保証付き数値計算

- 連立1次方程式を $Ax = b$ とし，数値解を $\hat{x}$ とする．
- ある R が存在し，単位行列 I に対して

を満たすならば A は正則で

$$\|x - \hat{x}\| \le \frac{\|R(b - A\hat{x})\|}{1 - \|RA - I\|}$$

を満たす．

- $\|RA - I\| < 1$ の検証が重要

```
function res = vinv(A)
  R = inv(A);
  feature('setround', -inf);
  X1 = abs(R * A - I);
  feature('setround', inf);
  X2 = abs(R * A - I);
  X = max(X1, X2);
  res = norm(X, inf);
end
```

- 精度保証の例（MATLAB）
  - 与えられた行列の正則性を保証
  - 計算量
    - 行列積：2回
    - 逆行列：1回
  - 合計：$6n^3 + O(n^2)$ flops

行列が正定値対称行列の場合，計算量の観点から効率的な実装が可能である

- 課題
  - 計算量を低減したアルゴリズムの開発
  - 丸め誤差の影響を抑えた方法の実装
- 改善法
  - ブロック計算を考慮した誤差解析の応用
  - スーパーコンピュータ環境を考慮したアルゴリズムの実装
  - メモリ量を低減した方法の実装