

4倍精度クリロフ部分空間法の 収束比較

小武守 恒(JST/東京大学)

はじめに

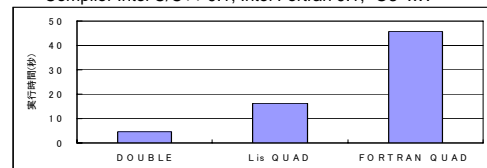
- クリロフ部分空間法は、理論的には高々行列の次数回の反復で収束
- 丸め誤差の影響で収束までに多くの反復が必要または停滞
- 収束の改善には高精度演算、例えば4倍精度演算が有効であるが計算コスト大

反復解法ライブラリLisへの 4倍精度演算の実装

- 厳密な4倍精度ではなく高速な4倍精度
 - 倍精度浮動小数点数を2個用いるdouble-double精度演算を採用
- 係数行列A, 右辺ベクトルbは高々倍精度
 - 入力・出力(A, b, x_0 , x_k)は倍精度
 - 反復解法中の解ベクトルx, 補助ベクトル, スカラーは4倍精度
- SSE2を活用して高速化
 - ベクトル単位(dot, axpy, matvec)のSSE2化

Lis4倍精度の実行時間比較

- BiCG法を50回反復した実行時間
 - 2次元ポアソン方程式を有限差分で離散化(次数: 10^6)
 - 行列格納形式はCRS
 - CPU Core 2 Duo 2.4GHz 64bit
 - Compiler Intel C/C++ 9.1, Intel Fortran 9.1, -O3 -xW



- FORTRAN4倍精度との比較で2.8倍の高速化
- 倍精度の約3.5倍程度の実行時間
 - FORTRAN4倍精度は約9.9倍の実行時間

収束の改善の有効性

- 多倍長精度の反復解法の結果
 - 長谷川, クリロフ部分空間法の計算精度依存性, 日本応用数理学会 2003 年度年会, 2003
 - 渡部, 多倍長関係の最近の結果, 日本応用数理学会 2003 年度年会, 2003
- 2,3種類の問題に対して有効性を確認
- どのような行列で有効なのか相関が示されていない

目的

- 最終目標
 - 4倍精度の前処理付クリロフ部分空間法の収束比較
- 今回の目的
 - 前処理なしの4倍精度クリロフ部分空間法の収束比較
 - MatrixMarketの行列(対称:55, 非対称:108)に対して4倍精度反復解法と条件数との相関を明らかにする

実験条件

- 反復解法
 - CG, BiCG, CGS, BICGSTAB
 - BICGSTAB(2), GPBiCG, TFQMR, BiCGSafe
- 右辺ベクトルb
 - 以下の3通りの解ベクトルxから設定
 - $x = (1, \dots, 1)^T$
 - $x = (1, -1, 1, \dots, -1, 1)^T$
 - x = random
- 初期ベクトル $x_0 = (0, \dots, 0)^T$
- 収束判定基準 10^{-12}

MatrixMarketの行列

- 対称: 55個

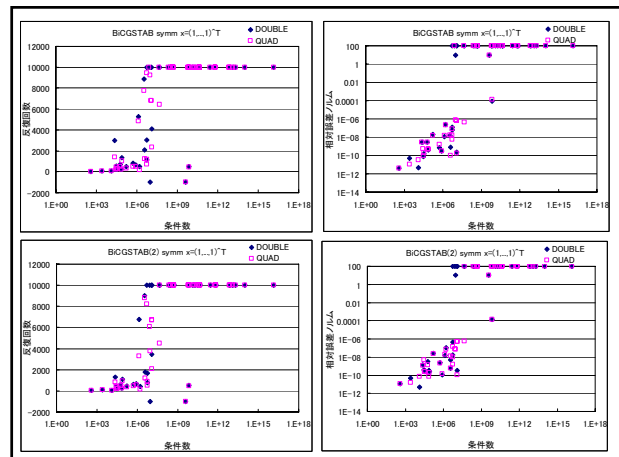
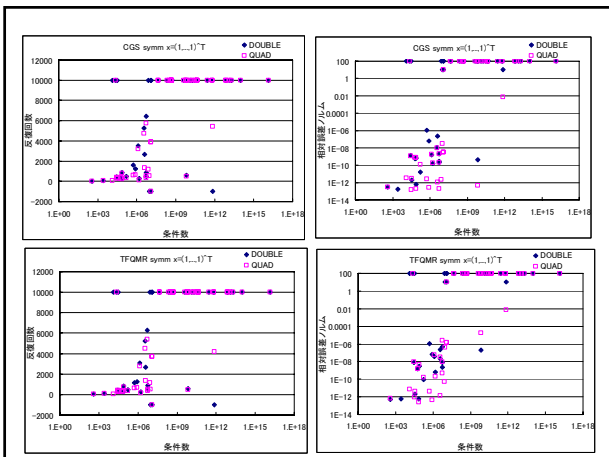
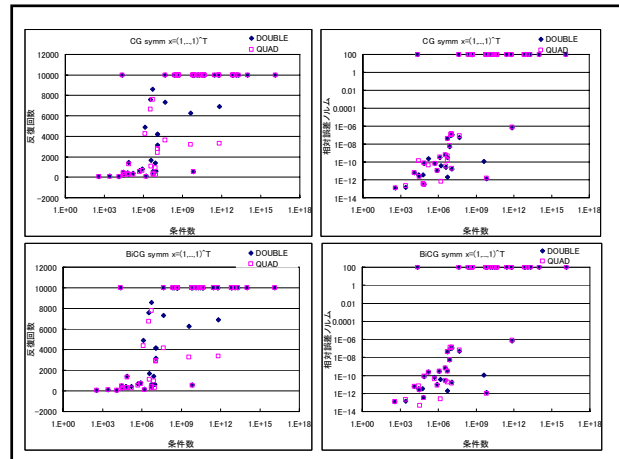
条件数	個数
$\sim 1.0E+3$	2
$1.0E+3 \sim 1.0E+6$	20
$1.0E+6 \sim 1.0E+9$	17
$1.0E+9 \sim$	16

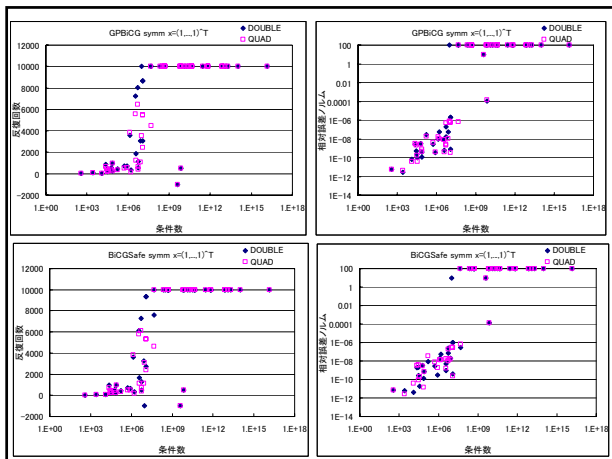
- 非対称: 108個

条件数	個数
$\sim 1.0E+3$	32
$1.0E+3 \sim 1.0E+6$	30
$1.0E+6 \sim 1.0E+9$	14
$1.0E+9 \sim$	32

収束状況(対称)

		CG	BiCG	CGS	BICG STAB	BICG STAB (2)	GPBi CG	TFQ MR	BICG Safe
$x=(1, \dots, 1)^T$	DOUBLE	Maxiter 27	27	34	32	32	29	34	27
	Break	0	0	3	2	2	1	3	2
	Converge	28	28	18	21	21	25	18	26
$x=(1, -1, \dots, 1, -1)^T$	DOUBLE	Maxiter 27	27	29	28	27	27	29	27
	Break	0	0	1	1	1	1	1	1
	Converge	28	28	25	26	27	27	25	27
x=random	DOUBLE	Maxiter 27	26	29	33	33	28	27	26
	Break	0	0	1	2	1	0	1	2
	Converge	28	29	25	20	20	26	26	26
	DOUBLE	Maxiter 27	26	25	29	28	28	23	28
	Break	0	0	0	0	0	0	0	0
	Converge	28	29	30	26	27	27	32	27



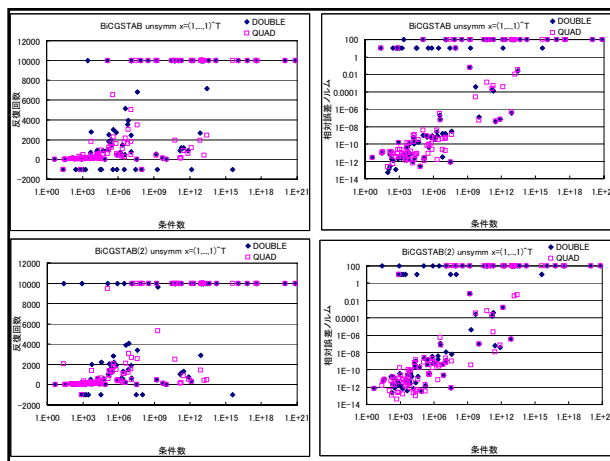
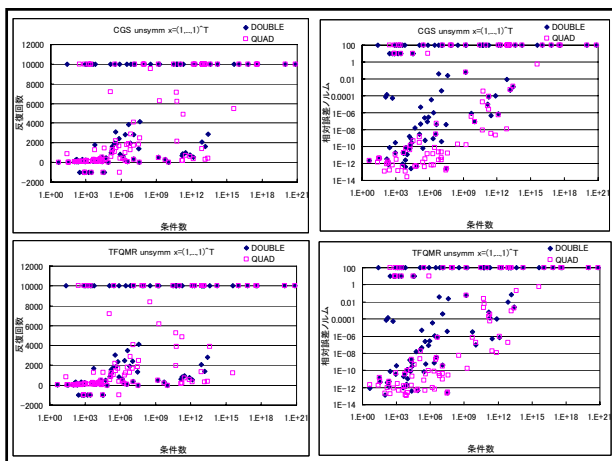
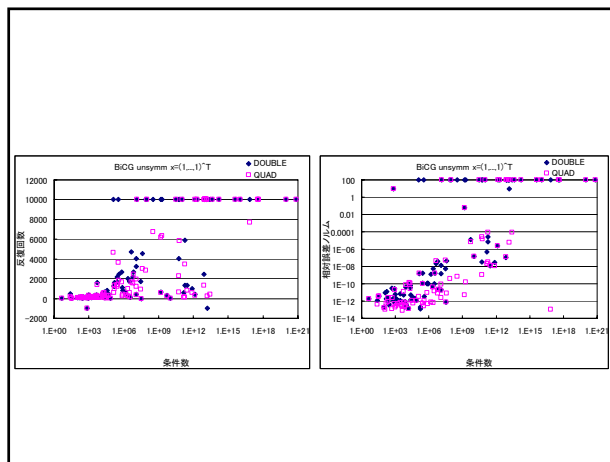


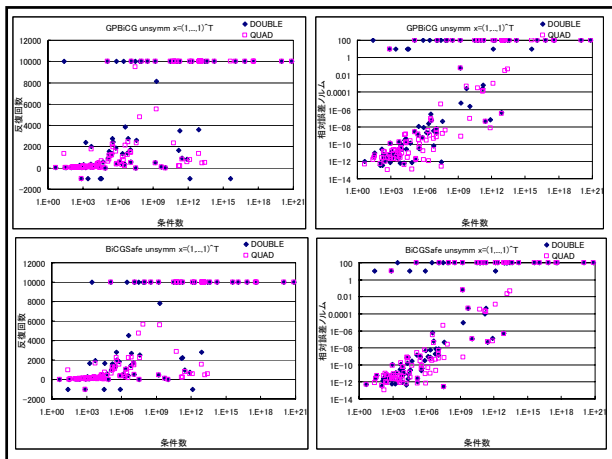
ここまでのまとめ(対称)

- 4倍精度ではブレイクダウンが低減
- 条件数 $\sim 10^3$ ではDOUBLEとほぼ同じ
- 条件数 $10^6 \sim 10^9$ では反復回数的大幅な改善が見られる
- 条件数 $10^9 \sim$ ではQUADでもほとんど収束しない

収束状況(非対称)

		BICG	CGS	BICG STAB	BICG STAB (2)	GPBI CG	TFQ MR	BICG Safe	
$x=(1, \dots, 1)^T$	DOUBLE	Maxiter	30	42	30	34	35	42	35
		Break	2	8	17	8	6	8	5
	Converge	76	58	61	66	67	58	68	
$x=(1, -1, \dots, 1, -1)^T$	DOUBLE	Maxiter	20	27	29	28	27	26	27
		Break	1	5	3	1	1	5	1
	Converge	87	76	76	79	80	77	80	
x =random	DOUBLE	Maxiter	27	45	31	33	39	41	37
		Break	0	8	15	8	2	8	1
	Converge	81	55	62	67	67	59	70	
x =random	QUAD	Maxiter	17	22	29	26	26	19	25
		Break	0	1	2	0	0	1	0
	Converge	91	85	77	82	82	88	83	
x =random	DOUBLE	Maxiter	28	30	34	35	33	29	34
		Break	0	0	12	6	2	0	1
	Converge	80	78	62	67	73	79	73	
x =random	QUAD	Maxiter	19	21	29	27	27	15	25
		Break	0	0	3	1	0	0	0
	Converge	89	87	76	80	81	93	83	





ここまでのまとめ(非対称)

- 4倍精度ではブレイクダウンが低減
- 条件数 $\sim 10^3$ ではDOUBLEとほぼ同じ
- 条件数 $10^6 \sim 10^9$ では反復回数的大幅な改善が見られる。誤差も大幅な改善が見られる。特にCGSとTFQMRは顕著
- 条件数 $10^9 \sim$ では収束するものもあるが誤差が非常に大きい

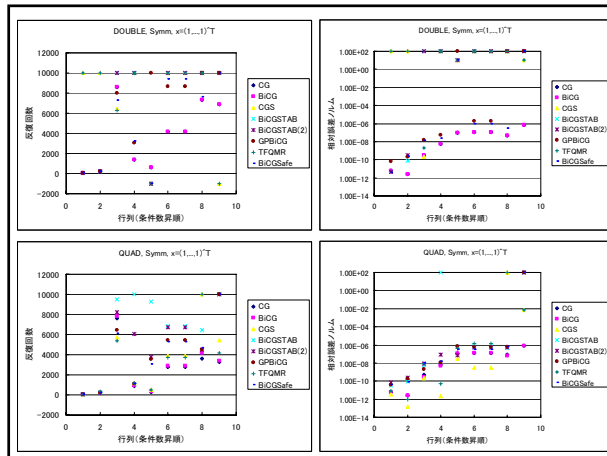
倍精度で収束せず 4倍精度で収束する行列

対称: 9個

行列名	条件数
bcsstk02	1.29E+04
bcsstk09	3.10E+04
s1rmt3m1	5.35E+06
nos6	8.00E+06
bcsstk03	9.50E+06
bcsstk06	1.22E+07
bcsstk07	1.22E+07
bcsstk08	4.73E+07
plat362	7.08E+11

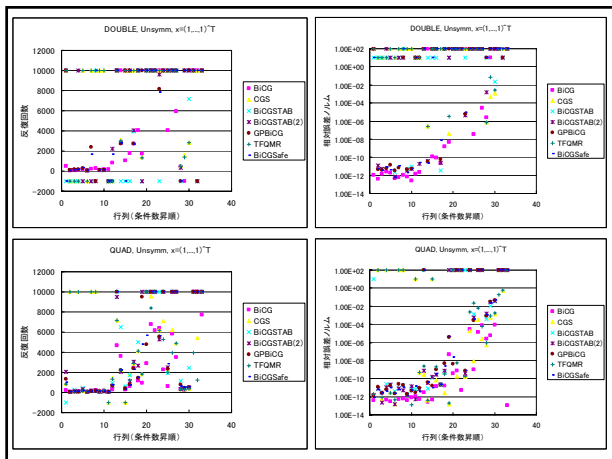
非対称: 33個

行列名	条件数	行列名	条件数
rd968	2.50E+01	olm2000	1.21E+07
rd2001	2.84E+02	steam1	2.99E+07
rd4501	5.30E+02	olm5000	7.58E+07
rd8001	7.97E+02	pores_2	3.31E+08
rd12501	1.17E+03	saylr1	1.59E+09
rd450	1.64E+03	utm5940	1.91E+09
rd20481	1.81E+03	fidap002	5.48E+10
rd32001	2.71E+03	steam3	5.51E+10
rd1250	3.98E+03	fidap003	6.11E+10
rd2048	6.21E+03	fidap007	1.93E+11
olm100	3.06E+04	watt_2	1.37E+12
dwa512	3.72E+04	fs_183_1	1.51E+13
hor_131	1.27E+05	fs_183_3	2.69E+13
af23560	3.50E+05	fidap009	4.05E+13
olm500	7.60E+05	fidap013	3.94E+15
olm1000	3.04E+06	sherman3	6.90E+16
savr4	6.92E+06		



収束した割合(対称)

行列名	精度	条件数	収束割合 (%)							
			CG	BIG	CGS	BIGSTAB	BIGSTAB(2)	GPBICG	TFQMR	BIGSafe
x=(1,...,1)^T	DOUBLE	~3	100.00	100.00	100.00	100.00	100.00	100.00	100.00	100.00
		3~6	95.00	95.00	75.00	85.00	85.00	95.00	75.00	95.00
		6~9	35.29	35.29	5.88	11.76	11.76	23.53	5.88	29.41
	QUAD	~3	100.00	100.00	100.00	100.00	100.00	100.00	100.00	100.00
		3~6	95.00	95.00	95.00	95.00	100.00	95.00	100.00	100.00
		6~9	35.29	35.29	17.65	29.41	29.41	29.41	17.65	29.41
x=(1,-1,...,1,-1)^T	DOUBLE	~3	100.00	100.00	100.00	100.00	100.00	100.00	100.00	
		3~6	95.00	95.00	90.00	80.00	85.00	95.00	90.00	95.00
		6~9	47.06	41.18	35.29	29.41	29.41	35.29	35.29	35.29
	QUAD	~3	100.00	100.00	100.00	100.00	100.00	100.00	100.00	100.00
		3~6	95.00	95.00	95.00	85.00	100.00	100.00	95.00	100.00
		6~9	47.06	41.18	35.29	29.41	29.41	35.29	35.29	35.29
x=random	DOUBLE	~3	100.00	100.00	100.00	100.00	100.00	100.00	100.00	
		3~6	95.00	100.00	95.00	80.00	80.00	95.00	95.00	95.00
		6~9	35.29	35.29	23.53	11.76	11.76	29.41	29.41	29.41
	QUAD	~3	100.00	100.00	100.00	100.00	100.00	100.00	100.00	
		3~6	95.00	100.00	100.00	95.00	100.00	100.00	100.00	100.00
		6~9	35.29	35.29	35.29	29.41	29.41	35.29	35.29	35.29



収束した割合 (非対称)

	条件数	BICG	CGS	BiCGSTAB	BiCGSTAB(2)	GPBiCG	TFQMR	BiCGSafe
x=(1,...,1)^T	~3	96.88%	59.38%	75.00%	81.25%	90.63%	59.38%	90.63%
	3~6	93.33%	76.67%	80.00%	86.67%	83.33%	76.67%	86.67%
	6~9	57.14%	50.00%	42.86%	50.00%	50.00%	50.00%	50.00%
	9~	28.13%	28.13%	21.88%	21.88%	18.75%	28.13%	18.75%
x=(1,-1,...,1,-1)^T	~3	96.88%	78.13%	93.75%	96.88%	96.88%	78.13%	96.88%
	3~6	100.00%	90.00%	96.67%	100.00%	96.67%	90.00%	96.67%
	6~9	85.71%	71.43%	50.00%	57.14%	71.43%	71.43%	71.43%
	9~	43.75%	43.75%	31.25%	31.25%	31.25%	46.88%	31.25%
x=random	~3	100.00%	56.25%	75.00%	81.25%	90.63%	56.25%	96.88%
	3~6	96.67%	76.67%	76.67%	86.67%	86.67%	80.00%	80.00%
	6~9	57.14%	42.86%	42.86%	42.86%	42.86%	57.14%	42.86%
	9~	37.50%	25.00%	28.13%	28.13%	18.75%	28.13%	28.13%

QUADの収束改善率 (対称)

	条件数	CG	BiCG	CGS	BiCGSTAB TAB	BiCGSTAB(2)	GPBiCG G	TFQMR R	BiCGSafe
x=(1,...,1)^T	~3	0.00%	0.00%	0.00%	0.00%	0.00%	0.00%	0.00%	0.00%
	3~6	0.00%	0.00%	20.00%	10.00%	15.00%	5.00%	20.00%	5.00%
	6~9	0.00%	0.00%	11.76%	17.65%	17.65%	5.88%	11.76%	0.00%
	9~	0.00%	0.00%	6.25%	0.00%	0.00%	0.00%	6.25%	0.00%
x=(1,-1,...,1,-1)^T	~3	0.00%	0.00%	0.00%	0.00%	0.00%	0.00%	0.00%	0.00%
	3~6	0.00%	0.00%	5.00%	5.00%	15.00%	5.00%	5.00%	5.00%
	6~9	11.76%	5.88%	17.65%	17.65%	17.65%	5.88%	17.65%	5.88%
	9~	0.00%	0.00%	6.25%	0.00%	0.00%	0.00%	12.50%	0.00%
x=random	~3	0.00%	0.00%	0.00%	0.00%	0.00%	0.00%	0.00%	0.00%
	3~6	0.00%	0.00%	5.00%	15.00%	20.00%	5.00%	5.00%	5.00%
	6~9	0.00%	0.00%	17.65%	17.65%	17.65%	0.00%	11.76%	0.00%
	9~	0.00%	0.00%	6.25%	0.00%	0.00%	0.00%	18.75%	0.00%

- 条件数 $10^3 \sim 10^9$ で改善が見られる

QUADの収束改善率 (非対称)

	条件数	BiCG	CGS	BiCGSTAB TAB	BiCGSTAB(2)	GPBiCG G	TFQMR R	BiCGSafe
x=(1,...,1)^T	~3	0.00%	18.75%	18.75%	15.63%	6.25%	18.75%	6.25%
	3~6	6.67%	13.33%	16.67%	13.33%	13.33%	13.33%	10.00%
	6~9	28.57%	21.43%	7.14%	7.14%	21.43%	21.43%	21.43%
	9~	15.63%	15.63%	9.38%	9.38%	12.50%	18.75%	12.50%
x=(1,-1,...,1,-1)^T	~3	0.00%	40.63%	18.75%	18.75%	9.38%	40.63%	3.13%
	3~6	3.33%	20.00%	20.00%	13.33%	10.00%	16.67%	16.67%
	6~9	28.57%	28.57%	7.14%	21.43%	28.57%	14.29%	28.57%
	9~	15.63%	21.88%	6.25%	6.25%	15.63%	28.13%	9.38%
x=random	~3	0.00%	0.00%	21.88%	15.63%	3.13%	0.00%	3.13%
	3~6	3.33%	3.33%	16.67%	10.00%	6.67%	3.33%	6.67%
	6~9	35.71%	21.43%	0.00%	21.43%	14.29%	35.71%	21.43%
	9~	9.38%	15.63%	6.25%	6.25%	9.38%	25.00%	12.50%

- 解法によって改善の傾向が異なる
- BiCG等は 10^9 までは条件数に比例して改善

実行時間最小の回数

対称		CG	BiCG	CGS	BiCGSTAB	BiCGSTAB(2)	GPBiCG CG	TFQMR MR	BiCGSafe
		x=(1,...,1)^T	DOUBLE	28	0	0	0	0	1
	QUAD	28	0	0	0	0	1	0	0
x=(1,-1,...,1,-1)^T	DOUBLE	28	0	0	0	0	0	0	1
	QUAD	29	0	0	0	1	0	2	0
x=random	DOUBLE	28	0	1	2	0	0	1	1
	QUAD	28	0	1	0	0	0	3	0

非対称		BiCG	CGS	BiCGSTAB	BiCGSTAB(2)	GPBiCG CG	TFQMR MR	BiCGSafe
		x=(1,...,1)^T	DOUBLE	21	24	21	18	2
	QUAD	46	29	12	3	1	5	1
x=(1,-1,...,1,-1)^T	DOUBLE	19	32	19	7	0	5	3
	QUAD	43	37	3	1	0	9	0
x=random	DOUBLE	15	40	16	7	0	4	2
	QUAD	37	44	2	1	0	10	0

まとめ

- QUADを利用すると
 - ブレイクダウンの低減
 - 条件数 $10^3 \sim 10^9$ で収束の改善が見られる
 - 条件数 $10^6 \sim 10^9$ では反復回数と誤差の大幅な改善
- 誤差は2つのグループに分けられてCGのグループのほうが誤差が小さい
 - CG, BiCG, CGS, TFQMR
 - BiCGSTAB, BiCGSTAB(2), GPBiCG, BiCGSafe
- QUADでは収束性、実行時間ともに対称ではCG、非対称ではBiCGがよい