反復解法ライブラリLisによる高精度演算とその効果

小武守　恒（JST／東京大学）

はじめに

- 大規模疎行列に対する線型方程式Ax=bを解く
- 反復解法ライブラリLis (a Library of Iterative Solvers for linear systems)を開発中
  - 12通りの反復解法，10通りの前処理，11通りの疎行列格納形式が組み合わせて利用できる
  - 反復解法としてCG, BiCG法などのクリロフ部分空間法を提供

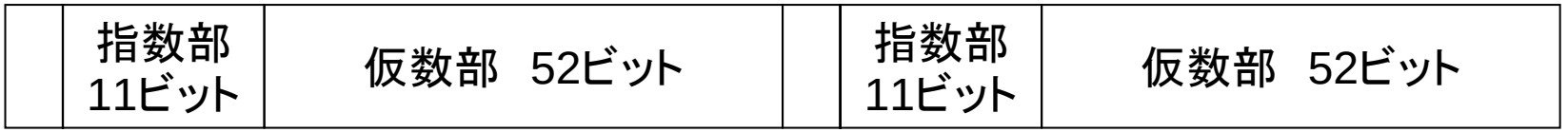
はじめに

- クリロフ部分空間法は，理論的には高々行列の次元数回の反復で収束
- 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

高速な4倍精度演算の実装

- 厳密な4倍精度ではなく
  - 倍精度浮動小数点数を2個用いるdouble-double精度演算を採用　a = a.hi + a.lo, |a.hi|>|a.lo|
  - 仮数部がIEEE準拠より8ビット少ない
  - 有効桁数　　double-double精度　　約32桁
    IEEE準拠4倍精度　　約33桁

double-double精度



IEEE準拠の4倍精度

Lisでの実装方針

- 係数行列A，右辺ベクトルbの入力は倍精度
- 倍精度と同一のインタフェース
  - 入力（係数行列A，右辺ベクトル b，初期ベクトル x_0 ）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
  - 出力は倍精度，4倍精度でも可能

実装方法

- 反復解法を4倍精度演算に置き換える
  - 行列ベクトル積（matvec）
  - ベクトルの内積（dot）
  - ベクトルおよびその実数倍の加減（axpy）
- matvec,dot,axpyの主な処理は積和演算
  - MULとADDの関数をまとめることでメモリストアを削減
- 2つの関数の作成
  - FMA：4倍精度の積和演算
    - dotとaxpyで利用
  - FMAD：混合精度（4倍精度と倍精度）の積和演算
    - matvecで利用

SSE2による高速化

- ベクトル単位（dot, axpy, matvec）のSSE2化
  - 2個同時に積和演算を
- ループ内に1回ずつFMAが使われているので2段のループアンローリングを行うとFMAが2回となる
  - すべてSSE2のpd命令で処理できる
- コードの最適化
  - Alignedアクセス
  - ループ内で不変な変数のロードをループの外に

スピードテスト

- 計算環境

CPU	Core 2 Duo 2.4GHz
OS	Linux 2.6.9smp 64Bit
Compiler	Intel C++ 9.1 Intel Fortran 9.1

  - 最適化オプションは -O3 -xW

- 2次元ポアソン方程式を有限差分で離散化
  - 行列A1（次数1,000,000）
  - 行列格納形式はCRS

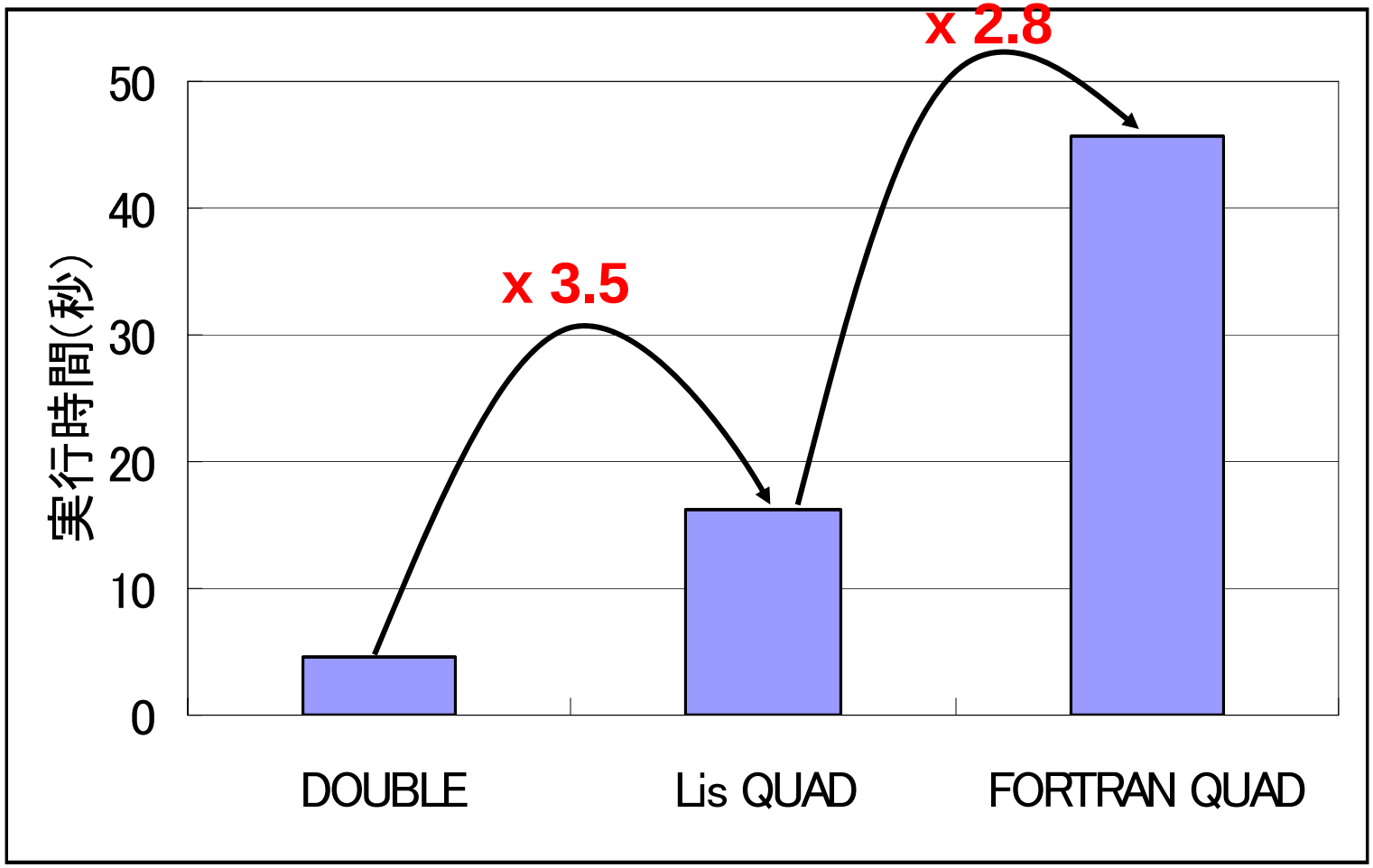
必要メモリ量

	倍精度	Lisの4倍精度	完全4倍精度
行列A(CRS)	4(n+nnz) +8nnz	4(n+nnz) +8nnz	4(n+nnz) +16nnz
ベクトルb	8n	8n	16n
ベクトルx	8n	16n	16n
補助ベクトル(BiCG)	6*8n	6*16n	6*16n
行列A1の場合の合計	121.9MB	175.8MB	221.6MB

n:次数　nnz:非零要素数

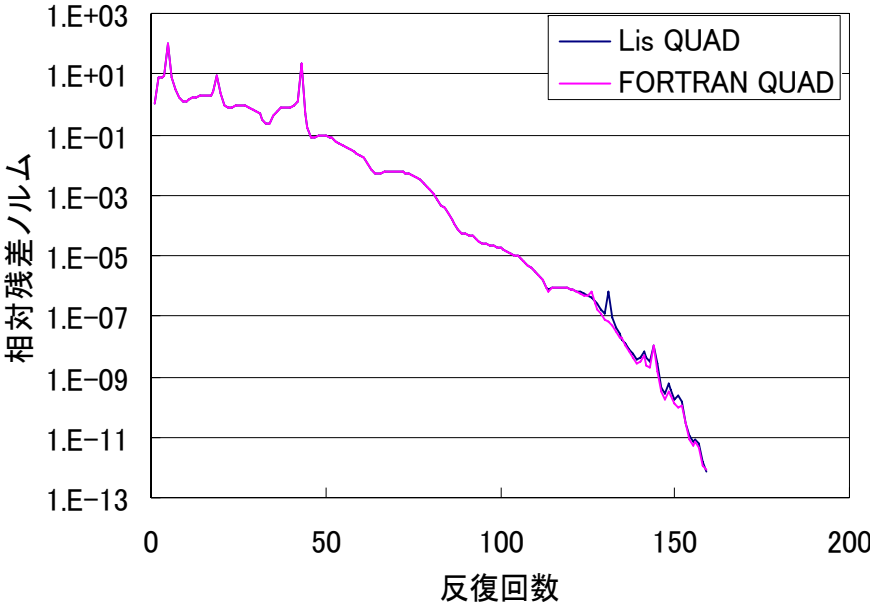
- 完全4倍精度:Fortranコンパイラによる4倍精度

実行時間（BiCG法50回反復）

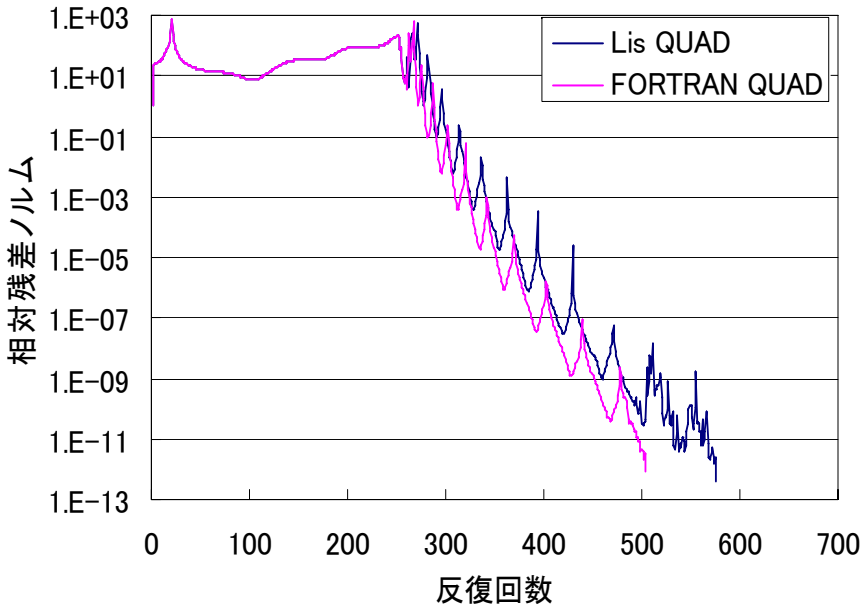


FORTRAN QUADとの差

rdb2048l
（n=2048,nnz=12032,cond=1.8E+3）



olm1000
（n=1000,nnz=3996,cond=3.0E+6）



- 反復回数の差は10%程度

4倍精度演算の有効性は？

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
  - 高精度演算による前処理付クリロフ部分空間法の収束特性の解析

- 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
  - MatrixMarketの行列（対称：55，非対称：108）に対して演算精度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
    - $x = (1,\ldots,1)^T$
    - $x = (1,-1,1,\ldots,-1,1)^T$
    - x = random
- 初期ベクトル$x_0 = (0,\ldots,0)^T$
- 収束判定基準　10^{-12}
- 最大反復回数（Maxiter）　1万回

係数行列：MatrixMarket

- 対称：55個

条件数（1−norm）	個数
～1.0E+3	1
1.0E+3～1.0E+6	12
1.0E+6～1.0E+9	21
1.0E+9～	21

条件数はLAPACKのDGECONを利用

- 非対称：108個

条件数（1−norm）	個数
～1.0E+3	19
1.0E+3～1.0E+6	35
1.0E+6～1.0E+9	18
1.0E+9～	33

収束状況(対称)

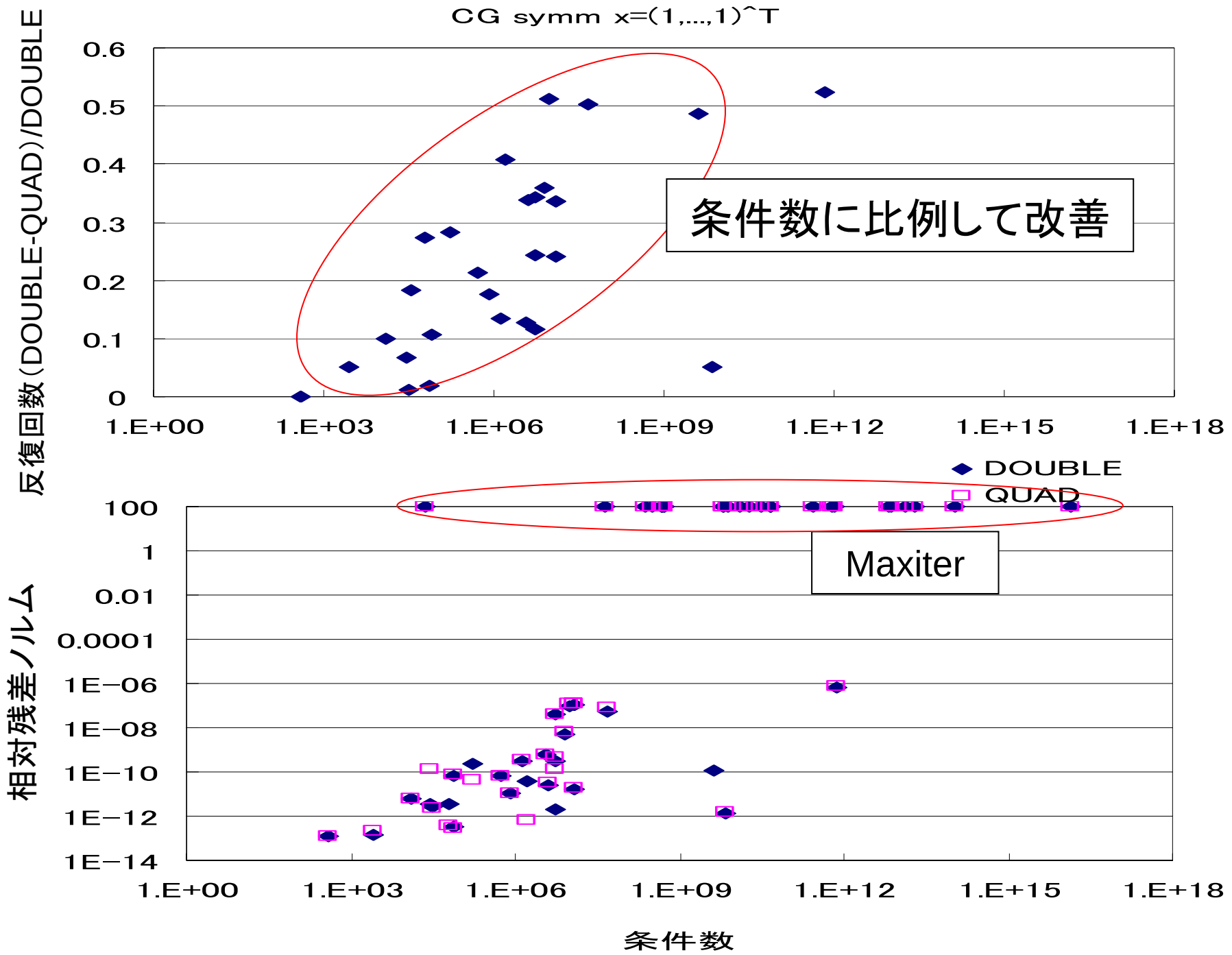
			CG	BiCG	CGS	BiCG STAB	BiCG STAB (2)	GPBi CG	TFQ MR	BiCG Safe
x=(1,⋯,1)^T	DOUBLE	Converge	28	28	18	21	21	25	18	26
		Break	0	0	3	2	2	1	3	2
		Maxiter	27	27	34	32	32	29	34	27
	QUAD	Converge	28	28	25	26	27	27	25	27
		Break	0	0	1	1	1	1	1	1
		Maxiter	27	27	29	28	27	27	29	27
x=(1,−1,⋯,1,−1)^T	DOUBLE	Converge	28	28	23	20	21	26	23	26
		Break	0	0	1	0	1	1	1	1
		Maxiter	27	27	31	35	33	28	31	28
	QUAD	Converge	30	29	28	24	27	28	29	28
		Break	0	0	0	0	0	0	0	0
		Maxiter	25	26	27	31	28	27	26	27
x=random	DOUBLE	Converge	28	29	25	20	20	26	26	26
		Break	0	0	1	2	1	0	1	2
		Maxiter	27	26	29	33	34	29	28	27
	QUAD	Converge	28	29	30	26	27	27	32	27
		Break	0	0	0	0	0	0	0	0
		Maxiter	27	26	25	29	28	28	23	28

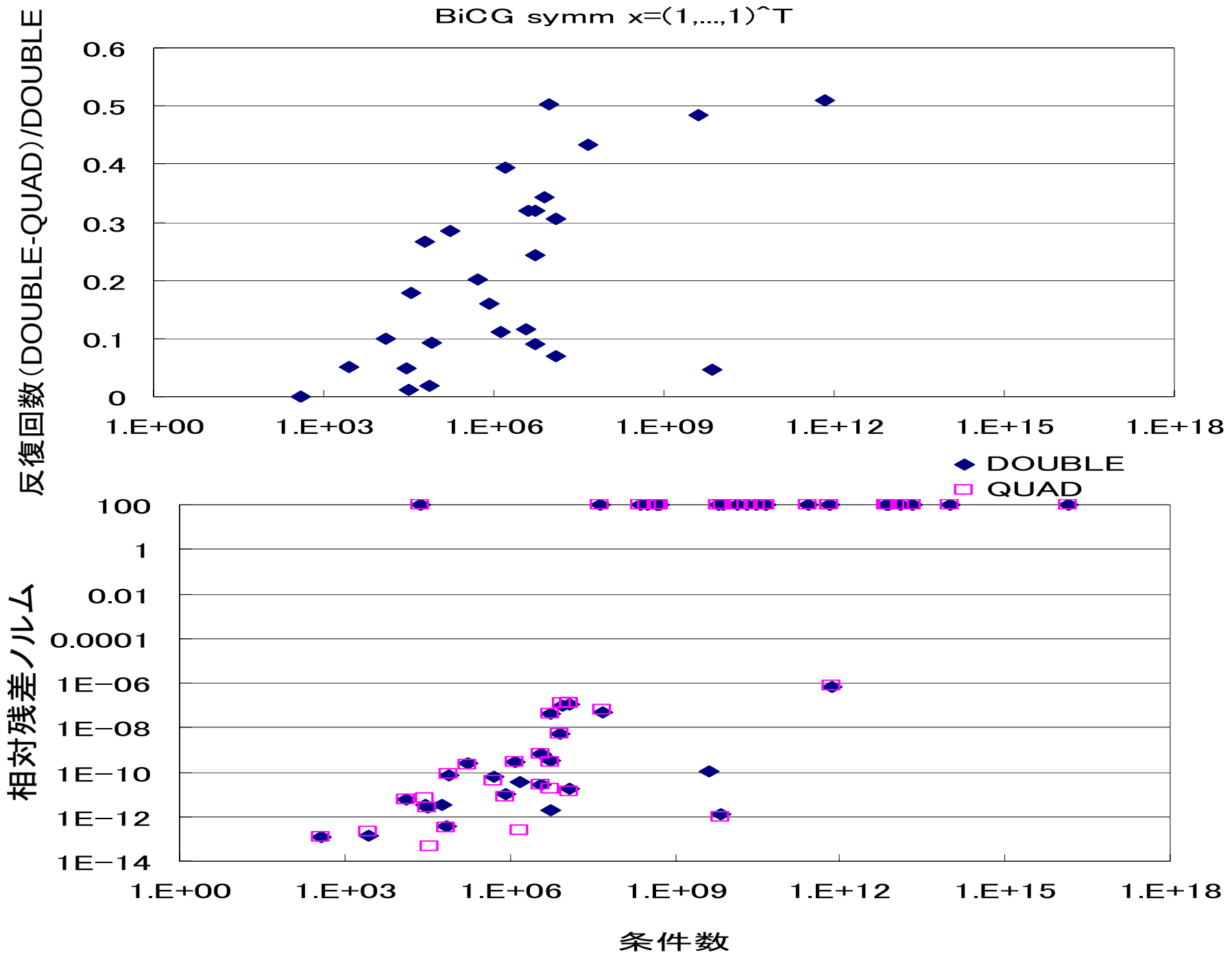
- QUADではブレイクダウンが減少、Maxiterは8%程度改善
- QUADでも半数程度収束していない
- 解x による収束状況ほぼ同程度

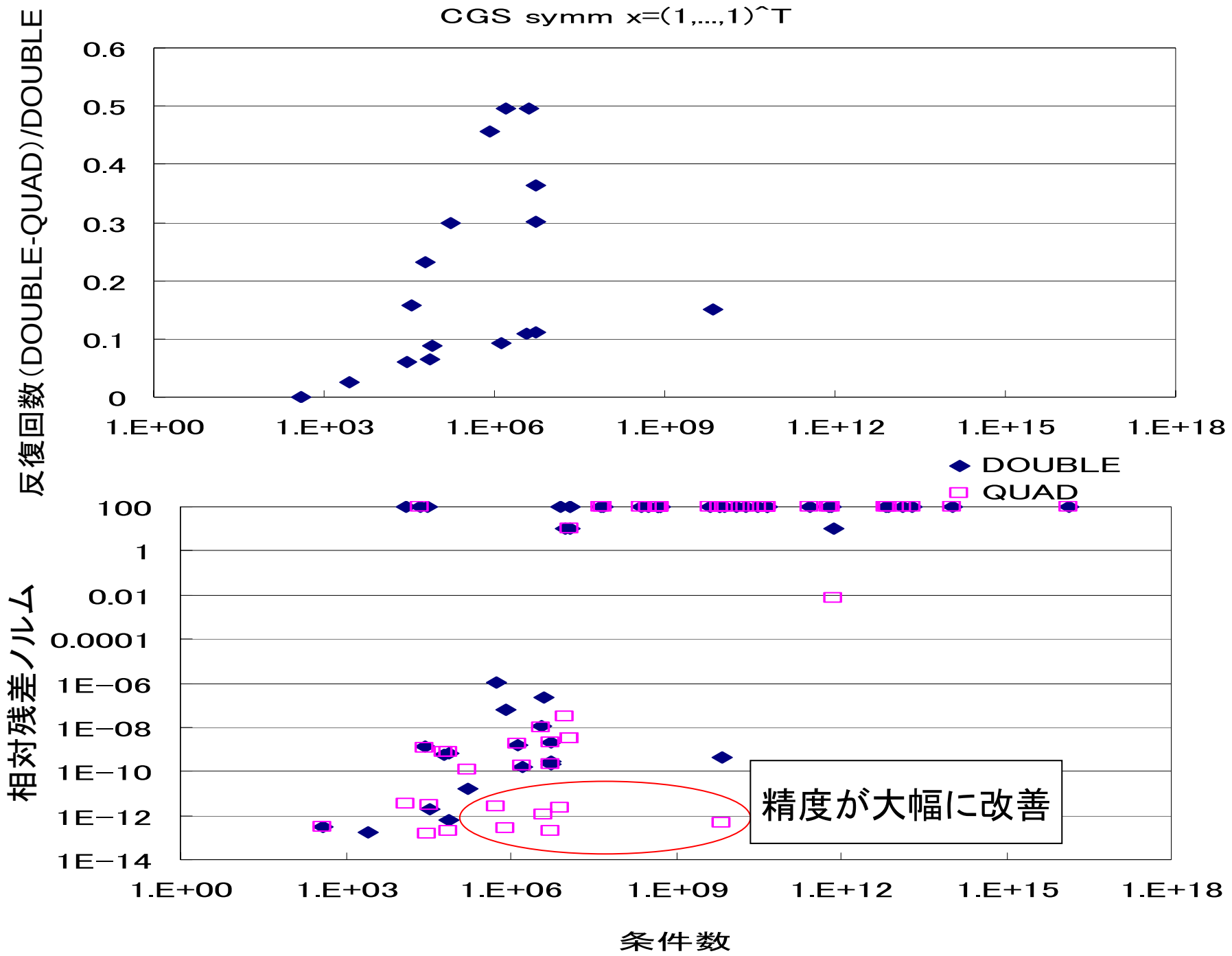
$x=(1,\ldots,1)^T$との反復回数差（対称）

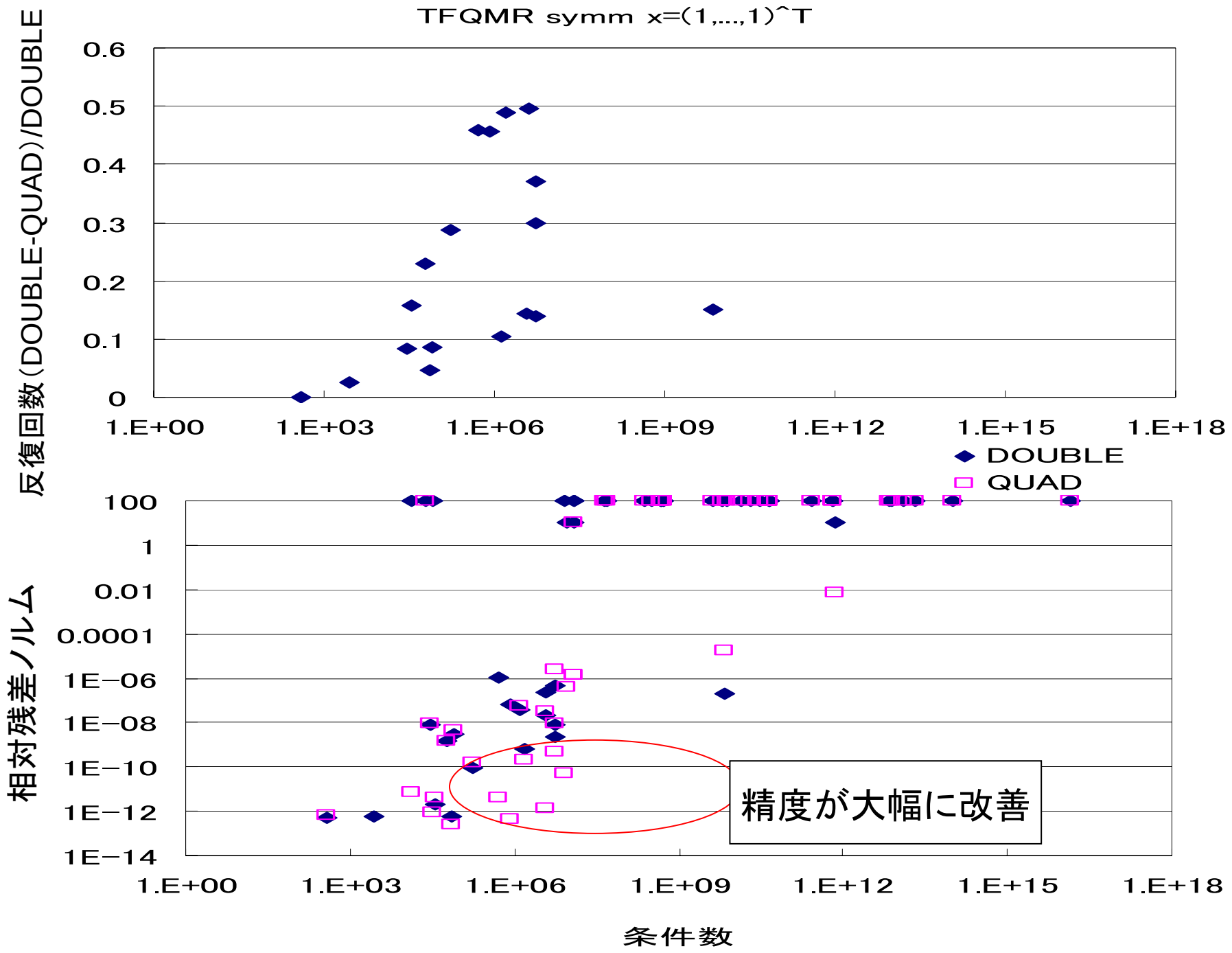
		CG	BiCG	CGS	BiCGSTAB	BiCGSTAB(2)	GPBiCG	TFQMR	BiCGSafe
x=(1,−1,⋯,1,−1)^T	DOUBLE	8.36%	8.36%	9.29%	19.20%	16.05%	12.29%	9.10%	13.43%
	QUAD	7.17%	8.20%	10.20%	14.32%	9.61%	8.49%	10.27%	10.00%
x=random	DOUBLE	11.24%	11.24%	14.29%	24.96%	19.85%	15.55%	14.11%	16.80%
	QUAD	9.80%	10.39%	11.76%	14.68%	14.85%	13.12%	12.70%	12.71%

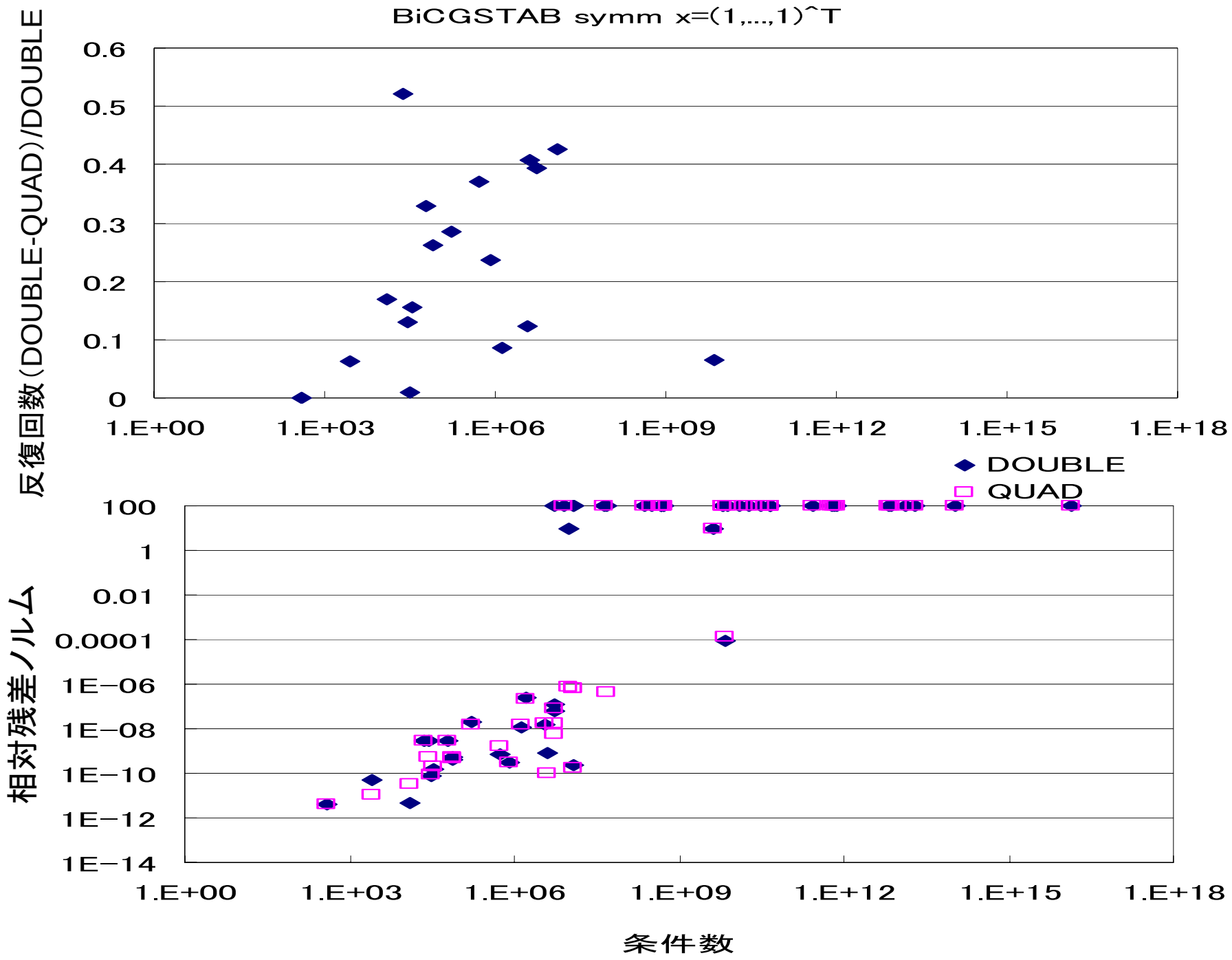
- QUADはほとんどの場合反復回数の差が減少
  - CGS, TFQMRは差が大きくなる場合がある

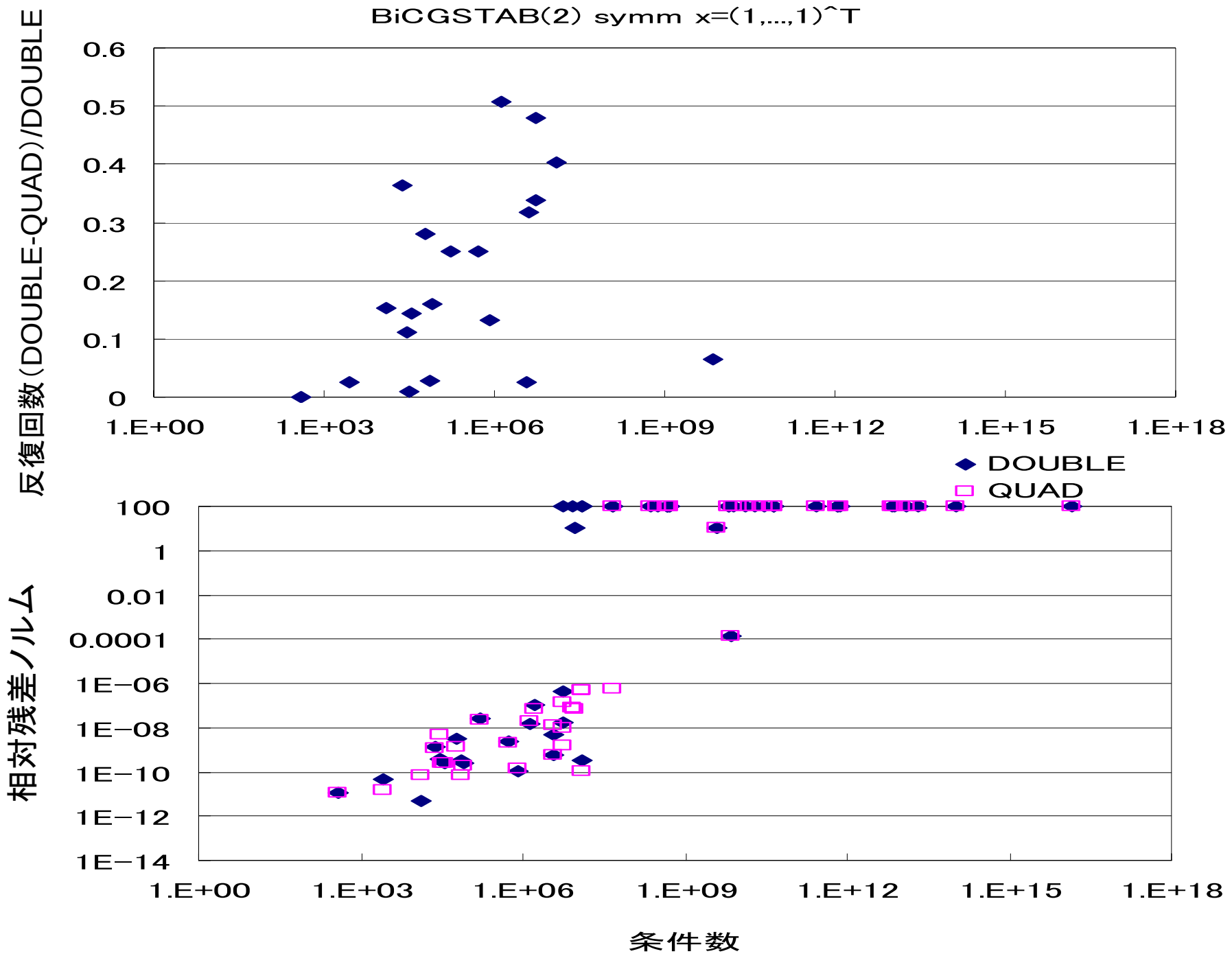

CG symm x=(1,...,1)^T
反復回数(DOUBLE-QUAD)/DOUBLE
0.6
0.5
0.4
0.3
0.2
0.1
0
1.E+00
1.E+03
1.E+06
1.E+09
1.E+12
1.E+15
1.E+18
条件数に比例して改善
DOUBLE
QUAD
Maxiter
相対残差ノルム
100
1
0.01
0.0001
1E−06
1E−08
1E−10
1E−12
1E−14
1.E+00
1.E+03
1.E+06
1.E+09
1.E+12
1.E+15
1.E+18
条件数

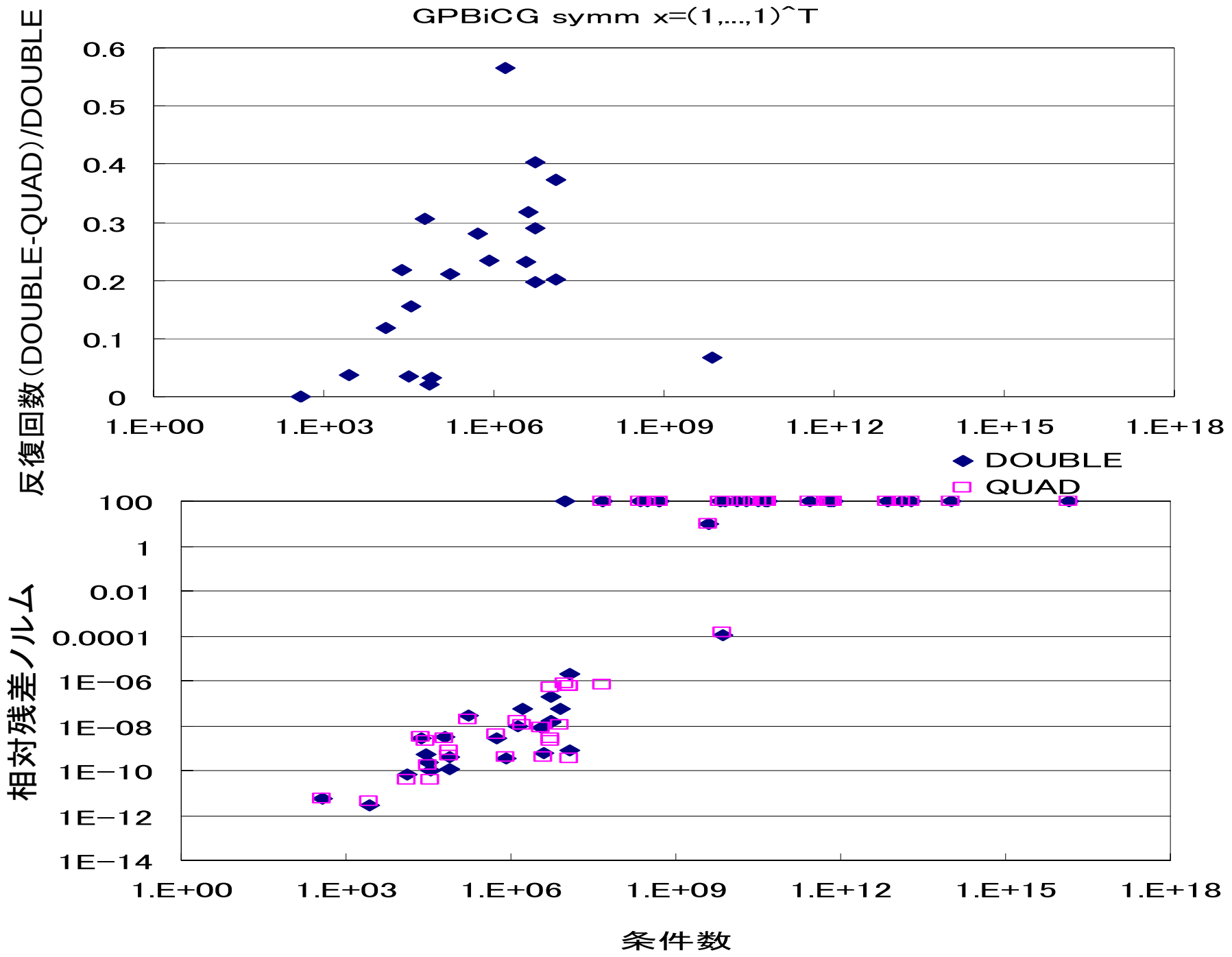

BiCG symm x=(1,...,1)^T
反復回数(DOUBLE-QUAD)/DOUBLE
0.6
0.5
0.4
0.3
0.2
0.1
0
1.E+00
1.E+03
1.E+06
1.E+09
1.E+12
1.E+15
1.E+18
DOUBLE
QUAD
相対残差ノルム
100
1
0.01
0.0001
1E−06
1E−08
1E−10
1E−12
1E−14
1.E+00
1.E+03
1.E+06
1.E+09
1.E+12
1.E+15
1.E+18
条件数

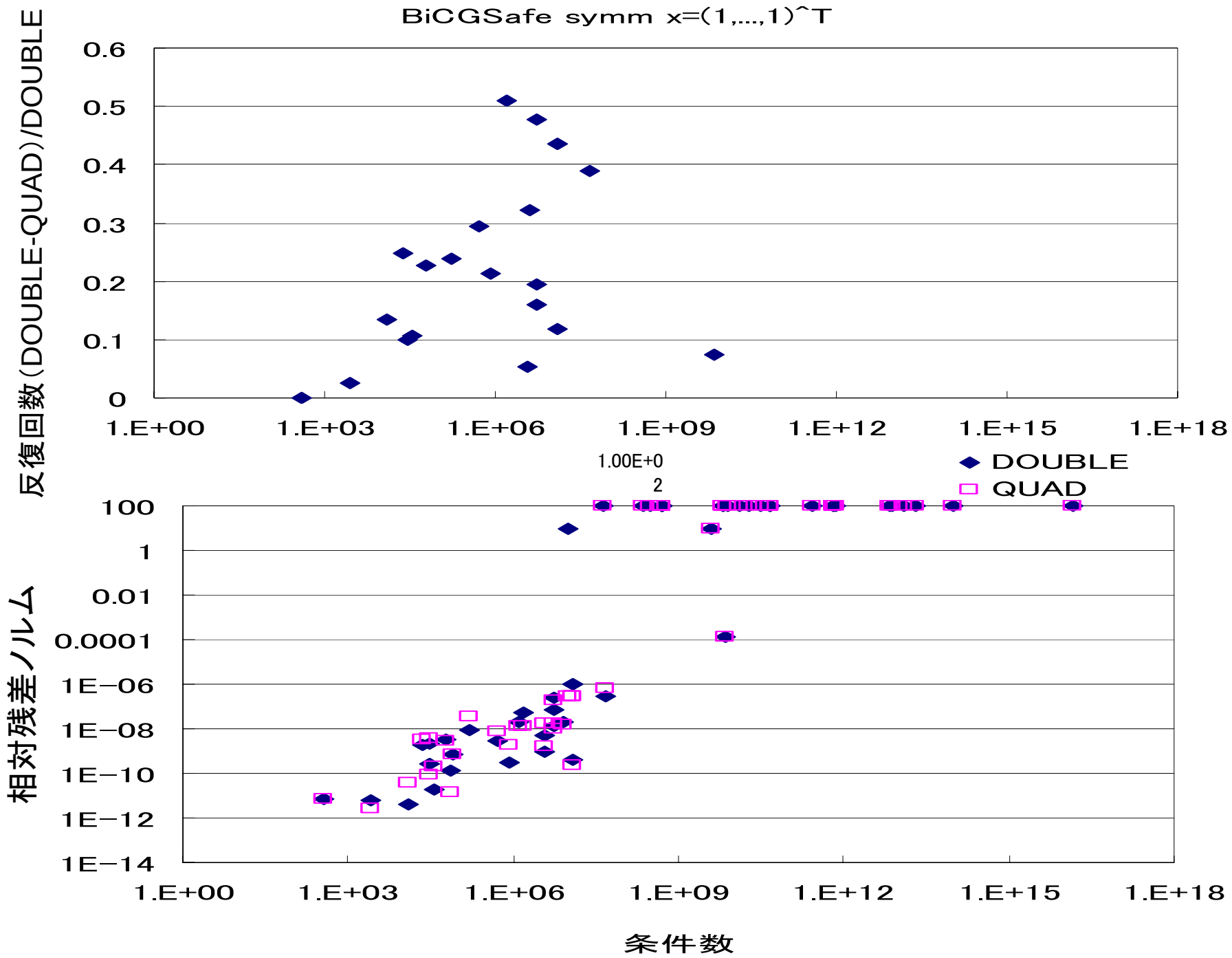

CGS symm x=(1,...,1)^T
反復回数(DOUBLE-QUAD)/DOUBLE
0.6
0.5
0.4
0.3
0.2
0.1
0
1.E+00
1.E+03
1.E+06
1.E+09
1.E+12
1.E+15
1.E+18
DOUBLE
QUAD
相対残差ノルム
100
1
0.01
0.0001
1E−06
1E−08
1E−10
1E−12
1E−14
精度が大幅に改善
条件数


TFQMR symm x=(1,...,1)^T
反復回数(DOUBLE-QUAD)/DOUBLE
0.6
0.5
0.4
0.3
0.2
0.1
0
1.E+00
1.E+03
1.E+06
1.E+09
1.E+12
1.E+15
1.E+18
DOUBLE
QUAD
相対残差ノルム
100
1
0.01
0.0001
1E−06
1E−08
1E−10
1E−12
1E−14
精度が大幅に改善
条件数


BiCGSTAB symm x=(1,...,1)^T
反復回数(DOUBLE-QUAD)/DOUBLE
0.6
0.5
0.4
0.3
0.2
0.1
0
1.E+00
1.E+03
1.E+06
1.E+09
1.E+12
1.E+15
1.E+18
DOUBLE
QUAD
相対残差ノルム
100
1
0.01
0.0001
1E−06
1E−08
1E−10
1E−12
1E−14
1.E+00
1.E+03
1.E+06
1.E+09
1.E+12
1.E+15
1.E+18
条件数


BiCGSTAB(2) symm x=(1,...,1)^T
反復回数(DOUBLE-QUAD)/DOUBLE
0.6
0.5
0.4
0.3
0.2
0.1
0
1.E+00
1.E+03
1.E+06
1.E+09
1.E+12
1.E+15
1.E+18
DOUBLE
QUAD
相対残差ノルム
100
1
0.01
0.0001
1E−06
1E−08
1E−10
1E−12
1E−14
1.E+00
1.E+03
1.E+06
1.E+09
1.E+12
1.E+15
1.E+18
条件数


GPBiCG symm x=(1,...,1)^T
反復回数(DOUBLE-QUAD)/DOUBLE
0.6
0.5
0.4
0.3
0.2
0.1
0
1.E+00
1.E+03
1.E+06
1.E+09
1.E+12
1.E+15
1.E+18
DOUBLE
QUAD
相対残差ノルム
100
1
0.01
0.0001
1E−06
1E−08
1E−10
1E−12
1E−14
1.E+00
1.E+03
1.E+06
1.E+09
1.E+12
1.E+15
1.E+18
条件数


BiCGSafe symm x=(1,...,1)^T
反復回数(DOUBLE-QUAD)/DOUBLE
0.6
0.5
0.4
0.3
0.2
0.1
0
1.E+00
1.E+03
1.E+06
1.E+09
1.E+12
1.E+15
1.E+18
DOUBLE
QUAD
相対残差ノルム
100
1
0.01
0.0001
1E−06
1E−08
1E−10
1E−12
1E−14
条件数

QUADによる反復回数改善の分布（対称）

	条件数	CG	BiCG	CGS	BiCGSTAB	BiCGSTAB(2)	GPBiCG	TFQMR	BiCGSafe
x=(1,…,1)^T	～3	0.00%	0.00%	0.00%	0.00%	0.00%	0.00%	0.00%	0.00%
	3～6	13.48%	12.87%	22.19%	21.05%	15.92%	13.65%	20.33%	12.85%
	6～9	30.74%	27.35%	28.16%	38.17%	38.86%	32.08%	29.17%	30.85%
	9～	35.39%	34.62%	15.16%	6.50%	6.41%	6.76%	15.16%	7.34%

- どの解法も条件数10^3～10^9までは条件数が増加すれば改善率も増加

相対残差ノルムの分布(対称)

		条件数	CG	BiCG	CGS	BiCGSTAB	BiCGSTAB(2)	GPBiCG	TFQMR	BiCGSafe
x=(1,…,1)^T	DOUBLE	～3	1.21E-13	1.21E-13	3.17E-13	3.96E-12	1.01E-11	5.60E-12	5.38E-13	6.68E-12
		3～6	4.00E-11	4.00E-11	1.19E-07	2.60E-09	3.02E-09	3.32E-09	1.20E-07	1.67E-09
		6～9	3.02E-08	3.02E-08	3.41E-08	6.31E-08	8.06E-08	3.84E-07	1.04E-07	2.15E-07
		9～	2.34E-07	2.34E-07	4.03E-10	8.71E-05	1.37E-04	1.00E-04	2.09E-07	1.26E-04
	QUAD	～3	1.21E-13	1.21E-13	3.17E-13	3.96E-12	1.07E-11	5.60E-12	6.79E-13	6.68E-12
		3～6	3.43E-11	3.44E-11	3.47E-10	2.10E-09	2.68E-09	2.75E-09	1.82E-09	4.57E-09
		6～9	3.80E-08	3.64E-08	1.99E-09	4.86E-08	3.39E-08	1.55E-07	3.89E-07	1.26E-07
		9～	3.79E-07	3.78E-07	4.55E-13	1.35E-04	1.31E-04	1.44E-04	1.77E-05	1.26E-04

- QUADではCGS，TFQMRの精度が条件数10^3～で大幅に向上
- 2つのグループに分けられてCGのグループのほうが精度がよい
  - CG,BiCG,CGS,TFQMR
  - BiCGSTAB,BiCGSTAB(2),GPBiCG,BiCGSafe

実行時間最小の個数(対称)

- 各精度で実行時間が最小であった解法の個数

対称		CG	BiCG	CGS	BiCG STAB	BiCG STAB (2)	GPBi CG	TFQ MR	BiCG Safe
x=(1,…,1)^T	DOUBLE	28	0	0	0	0	1	0	0
	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

- CG法が最もよい

4倍精度でのみ収束する行列(対称)

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

QUADによる収束改善の分布（対称）

	条件数	CG	BiCG	CGS	BiCGSTAB	BiCGSTAB(2)	GPBiCG	TFQMR	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%	16.67%	0.00%	0.00%	0.00%	16.67%	0.00%
	6～9	0.00%	0.00%	19.05%	23.81%	28.57%	9.52%	19.05%	4.76%
	9～	0.00%	0.00%	4.76%	0.00%	0.00%	0.00%	4.76%	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%	0.00%	0.00%	0.00%	0.00%	0.00%	0.00%
	6～9	0.00%	0.00%	14.29%	19.05%	28.57%	4.76%	14.29%	4.76%
	9～	9.52%	4.76%	9.52%	0.00%	0.00%	4.76%	14.29%	4.76%
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%	0.00%	0.00%	0.00%	0.00%	0.00%	0.00%
	6～9	0.00%	0.00%	14.29%	28.57%	33.33%	4.76%	9.52%	4.76%
	9～	0.00%	0.00%	9.52%	0.00%	0.00%	0.00%	19.05%	0.00%

- CG,BiCGは収束の改善は見られない
- CGS,TFQMRは条件数10^3～10^9で改善が見られる
- その他の解法は条件数10^6～10^9で改善が見られる

収束状況(非対称)

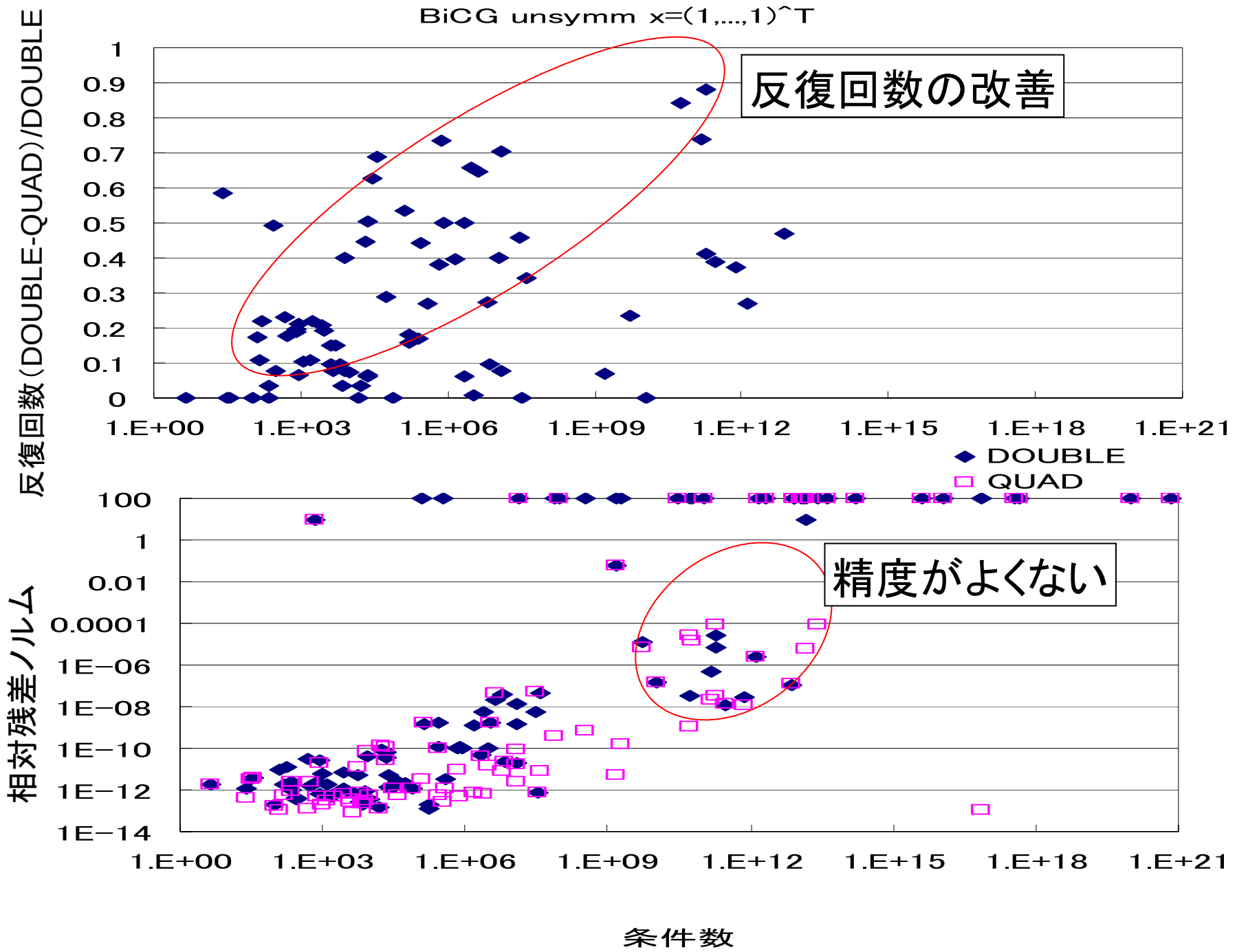
			BiCG	CGS	BiCG STAB	BiCG STAB (2)	GPBi CG	TFQ MR	BiCG Safe
x=(1,…,1)^T	DOUBLE	Converge	76	58	61	66	67	58	68
		Break	2	8	17	8	6	8	5
		Maxiter	30	42	30	34	35	42	35
	QUAD	Converge	87	76	76	79	80	77	80
		Break	1	5	3	1	1	5	1
		Maxiter	20	27	29	28	27	26	27
x=(1,-1,…,1,-1)^T	DOUBLE	Converge	81	55	62	67	67	59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

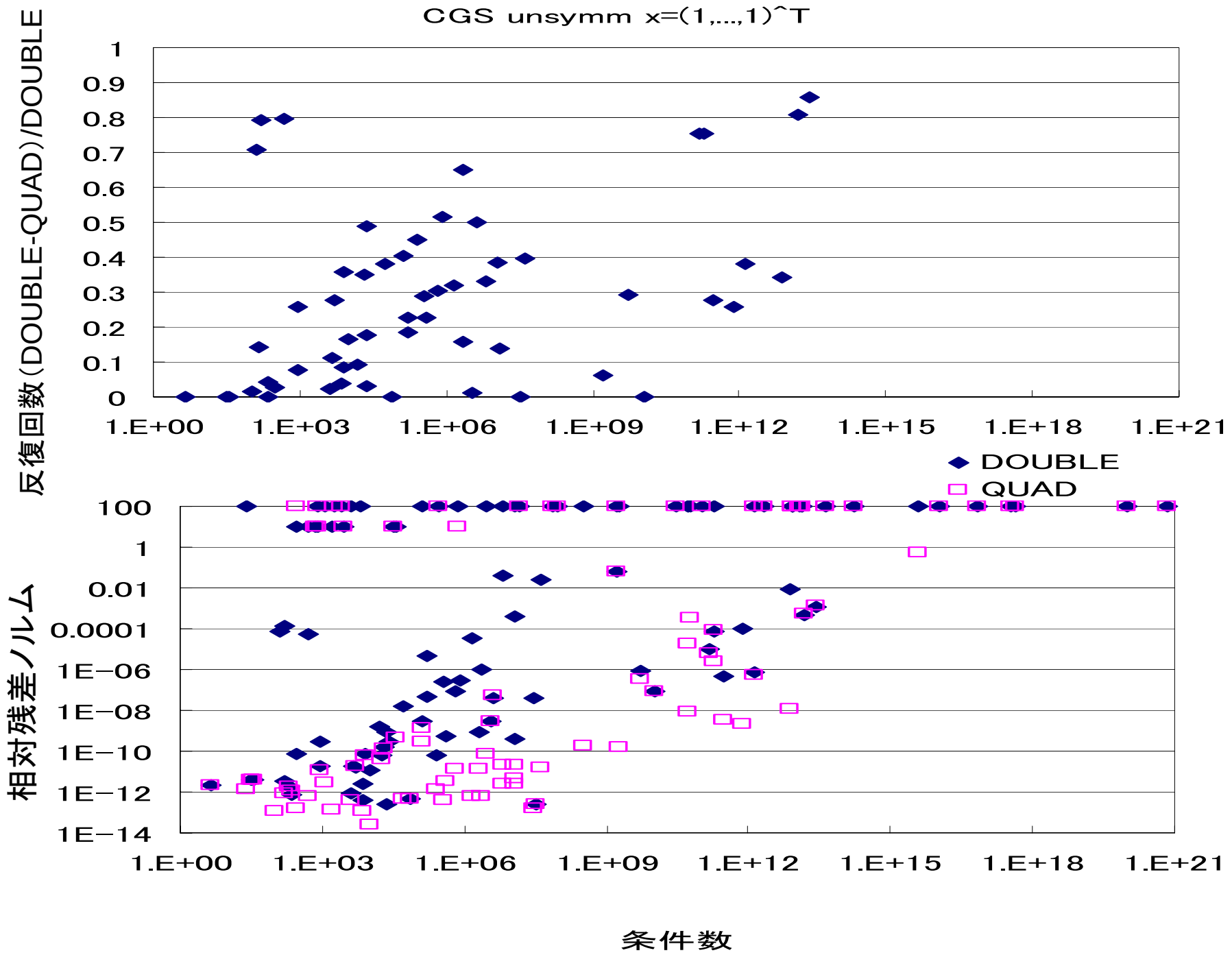
- QUADではブレイクダウンが減少、Maxiterが25%程度改善
- QUADでも約2割程度収束していない
- 解x による収束状況ほぼ同程度

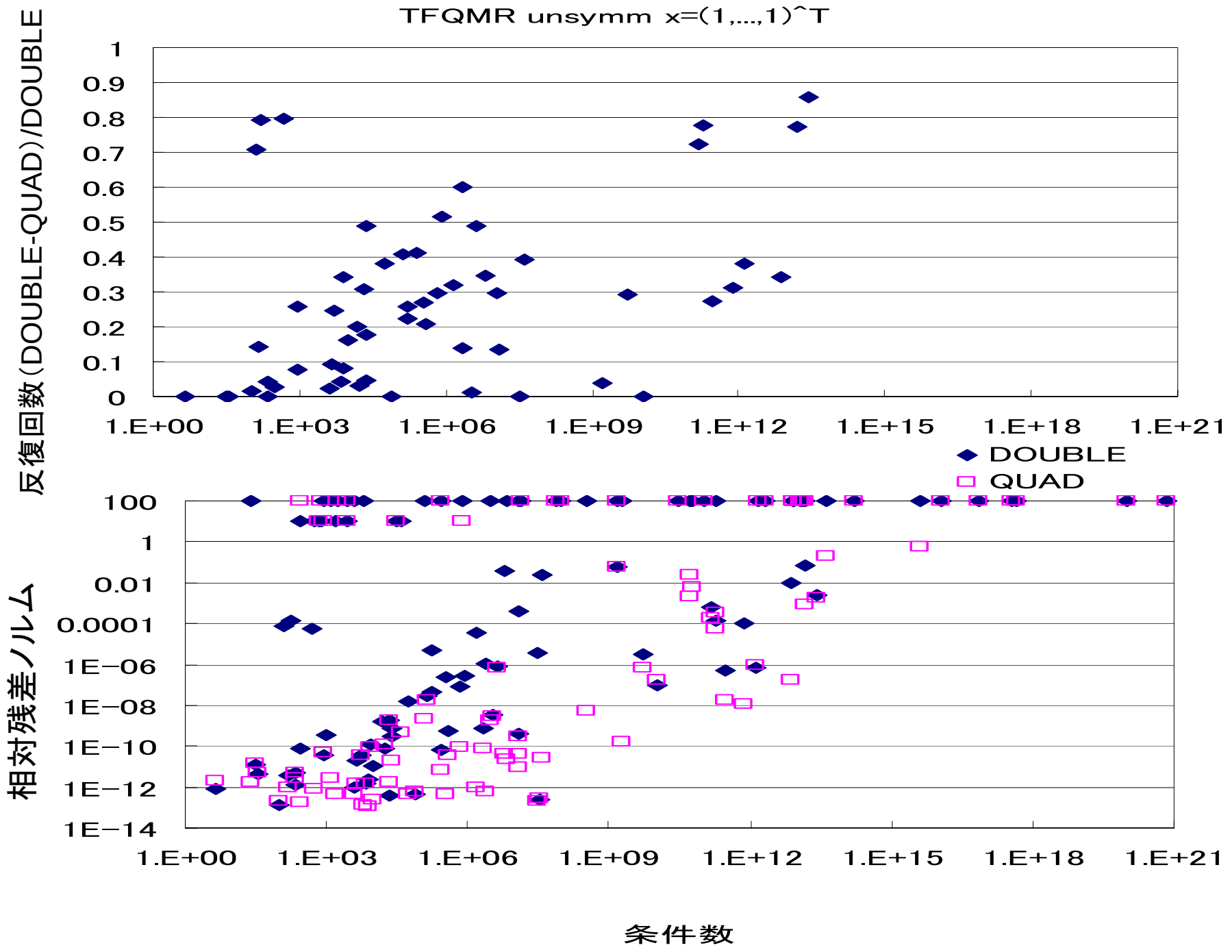
x=(1,…,1)^{T}との反復回数差（非対称）

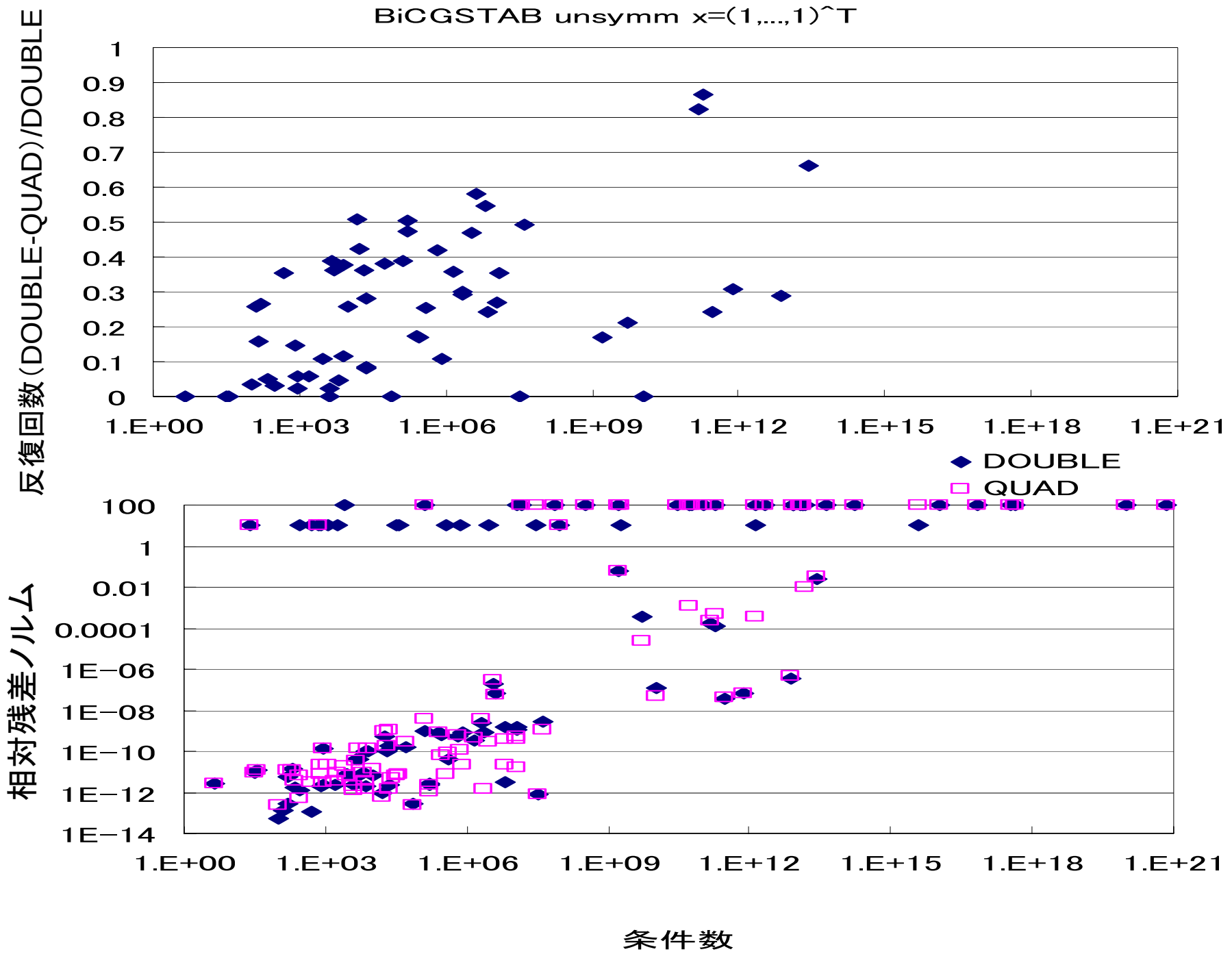
		BiCG	CGS	BiCGSTAB	BiCGSTAB(2)	GPBiCG	TFQMR	BiCGSafe
x=(1,−1,･･･,1,−1)^T	DOUBLE	15.13%	14.51%	15.08%	16.74%	13.63%	14.72%	21.99%
	QUAD	7.33%	12.09%	19.83%	18.13%	15.23%	13.30%	12.50%
x=random	DOUBLE	23.44%	19.72%	24.85%	20.34%	25.57%	19.67%	25.57%
	QUAD	28.00%	10.19%	41.31%	33.95%	35.96%	10.35%	33.24%

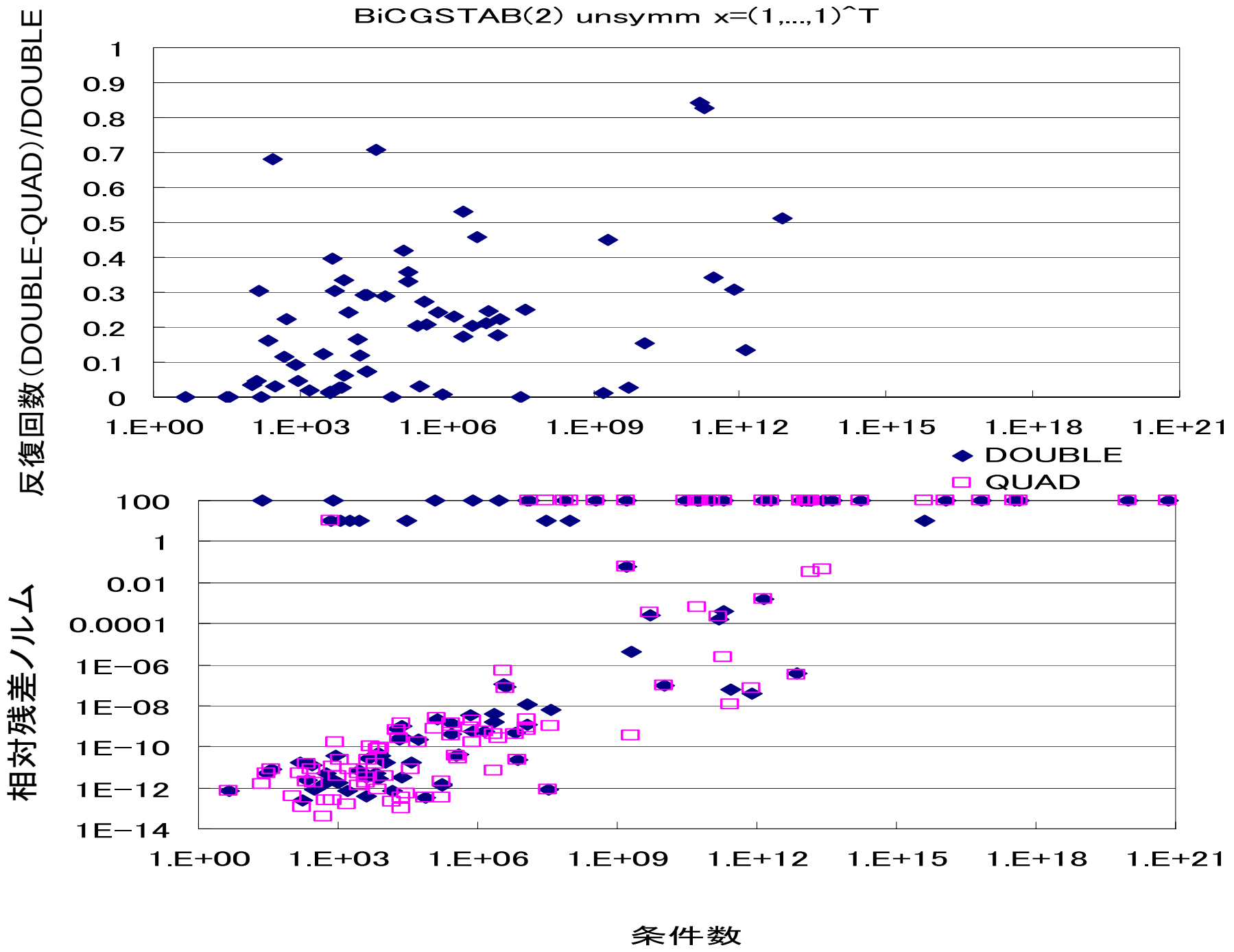
- 解法によってQUADでの反復回数の差の傾向が異なる
  - CGS, TFQMRは差が減少
  - BiCGSTAB,BiCGSTAB(2),GPBiCGは差が増加
  - BiCG,BiCGSafeは差が減少または増加

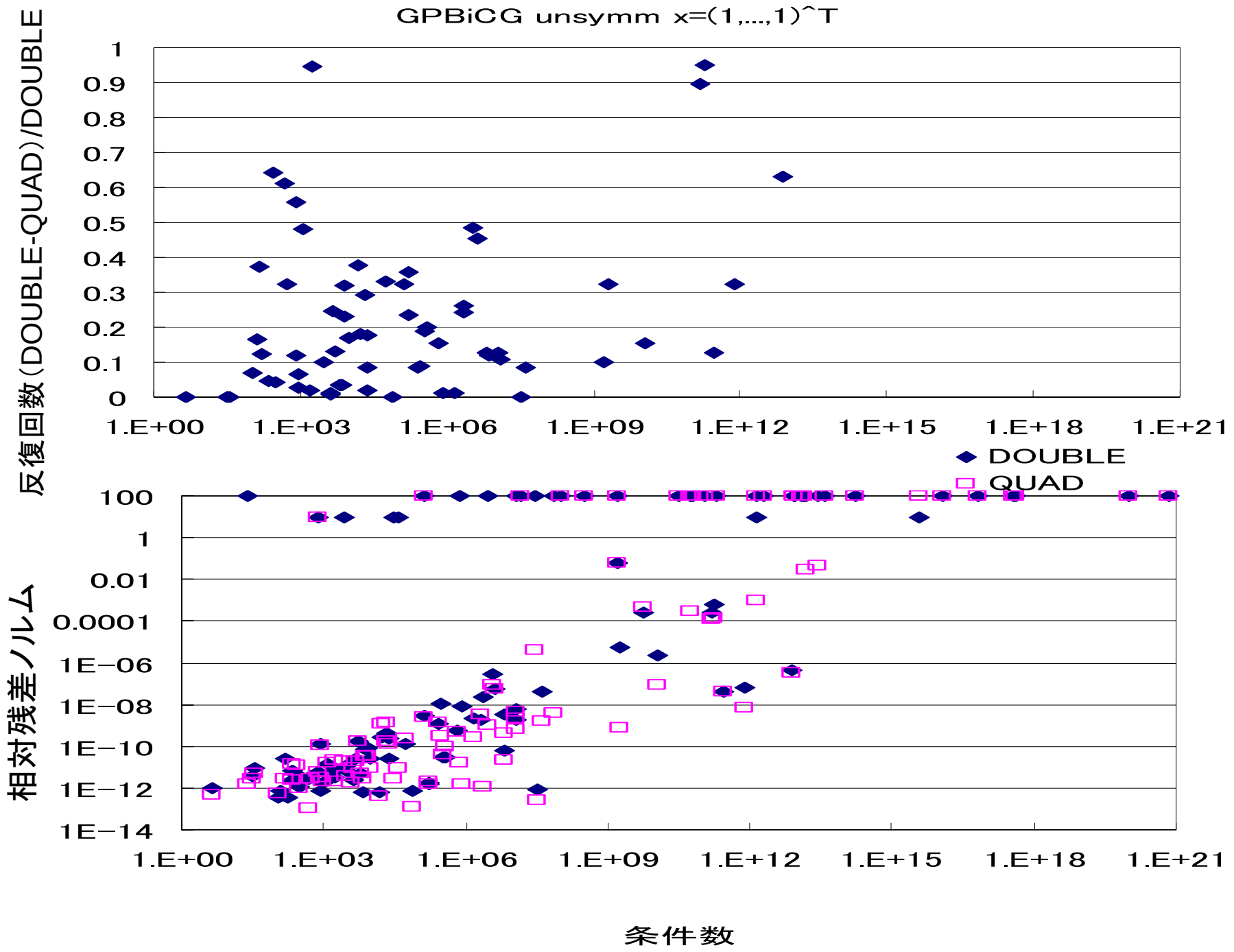

BiCG unsymm x=(1,...,1)^T
反復回数の改善
反復回数(DOUBLE-QUAD)/DOUBLE
1
0.9
0.8
0.7
0.6
0.5
0.4
0.3
0.2
0.1
0
1.E+00
1.E+03
1.E+06
1.E+09
1.E+12
1.E+15
1.E+18
1.E+21
DOUBLE
QUAD
精度がよくない
相対残差ノルム
100
1
0.01
0.0001
1E−06
1E−08
1E−10
1E−12
1E−14
条件数

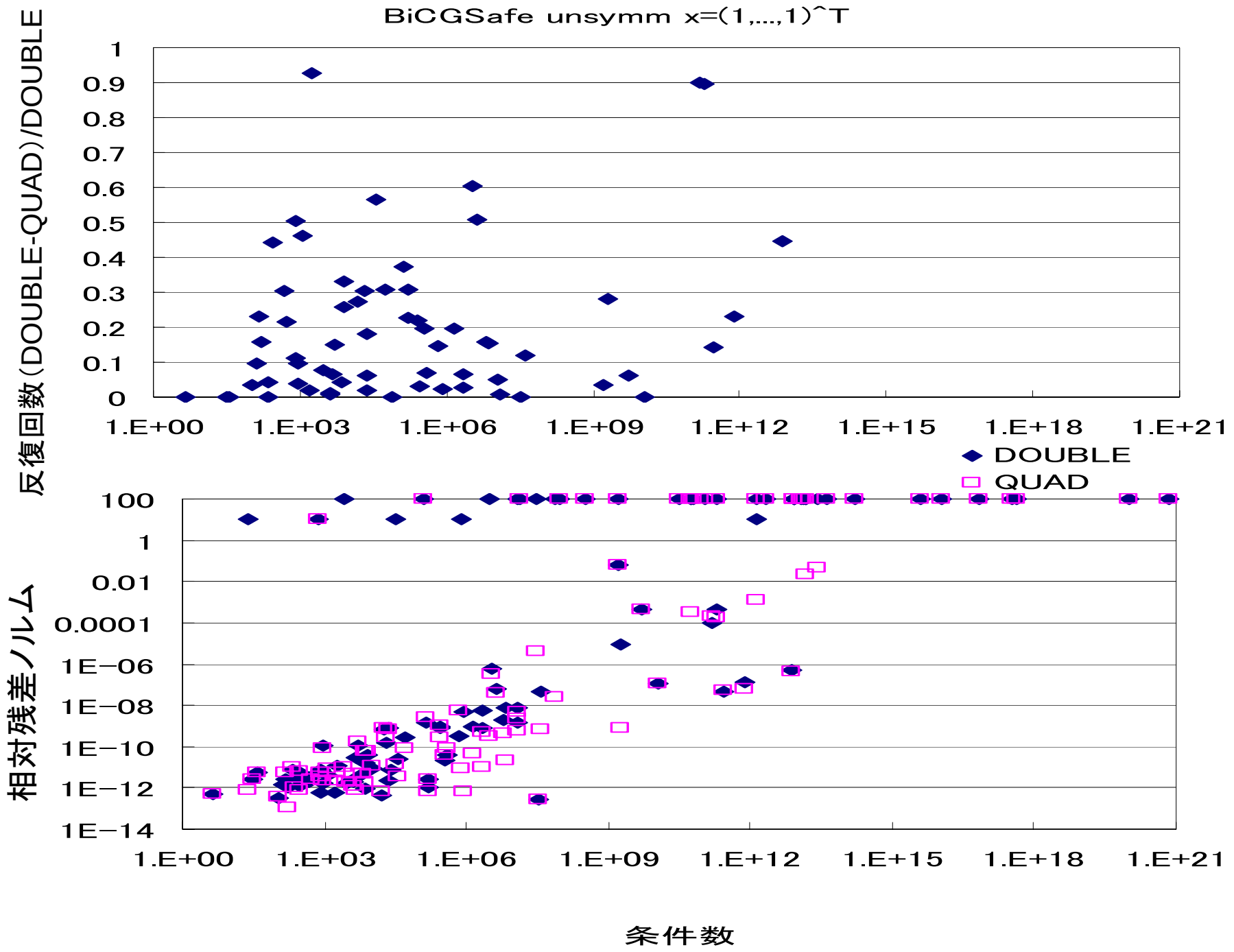

CGS unsymm x=(1,...,1)^T
反復回数(DOUBLE-QUAD)/DOUBLE
1
0.9
0.8
0.7
0.6
0.5
0.4
0.3
0.2
0.1
0
1.E+00
1.E+03
1.E+06
1.E+09
1.E+12
1.E+15
1.E+18
1.E+21
DOUBLE
QUAD
相対残差ノルム
100
1
0.01
0.0001
1E−06
1E−08
1E−10
1E−12
1E−14
1.E+00
1.E+03
1.E+06
1.E+09
1.E+12
1.E+15
1.E+18
1.E+21
条件数


TFQMR unsymm x=(1,...,1)^T
反復回数(DOUBLE-QUAD)/DOUBLE
1
0.9
0.8
0.7
0.6
0.5
0.4
0.3
0.2
0.1
0
1.E+00
1.E+03
1.E+06
1.E+09
1.E+12
1.E+15
1.E+18
1.E+21
DOUBLE
QUAD
相対残差ノルム
100
1
0.01
0.0001
1E−06
1E−08
1E−10
1E−12
1E−14
1.E+00
1.E+03
1.E+06
1.E+09
1.E+12
1.E+15
1.E+18
1.E+21
条件数


BiCGSTAB unsymm x=(1,...,1)^T
反復回数(DOUBLE-QUAD)/DOUBLE
1
0.9
0.8
0.7
0.6
0.5
0.4
0.3
0.2
0.1
0
1.E+00
1.E+03
1.E+06
1.E+09
1.E+12
1.E+15
1.E+18
1.E+21
DOUBLE
QUAD
相対残差ノルム
100
1
0.01
0.0001
1E−06
1E−08
1E−10
1E−12
1E−14
1.E+00
1.E+03
1.E+06
1.E+09
1.E+12
1.E+15
1.E+18
1.E+21
条件数


BiCGSTAB(2) unsymm x=(1,...,1)^T
反復回数(DOUBLE-QUAD)/DOUBLE
1
0.9
0.8
0.7
0.6
0.5
0.4
0.3
0.2
0.1
0
1.E+00
1.E+03
1.E+06
1.E+09
1.E+12
1.E+15
1.E+18
1.E+21
DOUBLE
QUAD
相対残差ノルム
100
1
0.01
0.0001
1E−06
1E−08
1E−10
1E−12
1E−14
1.E+00
1.E+03
1.E+06
1.E+09
1.E+12
1.E+15
1.E+18
1.E+21
条件数


GPBiCG unsymm x=(1,...,1)^T
反復回数(DOUBLE-QUAD)/DOUBLE
1
0.9
0.8
0.7
0.6
0.5
0.4
0.3
0.2
0.1
0
1.E+00
1.E+03
1.E+06
1.E+09
1.E+12
1.E+15
1.E+18
1.E+21
DOUBLE
QUAD
相対残差ノルム
100
1
0.01
0.0001
1E−06
1E−08
1E−10
1E−12
1E−14
1.E+00
1.E+03
1.E+06
1.E+09
1.E+12
1.E+15
1.E+18
1.E+21
条件数


BiCGSafe unsymm x=(1,...,1)^T
反復回数(DOUBLE-QUAD)/DOUBLE
1
0.9
0.8
0.7
0.6
0.5
0.4
0.3
0.2
0.1
0
1.E+00
1.E+03
1.E+06
1.E+09
1.E+12
1.E+15
1.E+18
1.E+21
DOUBLE
QUAD
相対残差ノルム
100
1
0.01
0.0001
1E−06
1E−08
1E−10
1E−12
1E−14
1.E+00
1.E+03
1.E+06
1.E+09
1.E+12
1.E+15
1.E+18
1.E+21
条件数

QUADによる反復回数改善の分布（非対称）

	条件数	BiCG	CGS	BiCGSTAB	BiCGSTAB(2)	GPBiCG	TFQMR	BiCGSafe
x=(1,…,1)^T	～3	15.32%	22.00%	9.41%	10.24%	18.47%	22.02%	13.22%
	3～6	24.44%	22.41%	23.23%	19.47%	19.47%	22.64%	17.90%
	6～9	32.98%	23.32%	35.47%	24.55%	18.34%	21.26%	17.15%
	9～	42.54%	43.54%	39.61%	36.06%	38.68%	43.39%	33.20%

- BiCG，BiCGSTAB，BiCGSTAB(2)は条件数が増加すれば改善率も増加
- CGS，TFQMR，GPBiCG，BiCGSafeは条件数10^3～10^9まではほぼ一定

相対残差ノルムの分布(非対称)

		条件数	BiCG	CGS	BiCGSTAB	BiCGSTAB(2)	GPBiCG	TFQMR	BiCGSafe
x=(1,…,1)^T	DOUBLE	～3	5.92E-12	2.05E-05	1.28E-11	7.64E-12	1.14E-11	2.02E-05	8.66E-12
		3～6	1.23E-10	2.36E-07	1.97E-10	3.64E-10	8.44E-10	2.37E-07	3.57E-10
		6～9	9.84E-09	5.66E-03	2.53E-08	1.86E-08	3.68E-08	5.66E-03	6.36E-08
		9～	7.91E-03	9.28E-03	1.46E-02	9.36E-03	1.07E-02	1.81E-02	1.07E-02
	QUAD	～3	2.67E-12	2.58E-12	1.85E-11	1.34E-11	1.13E-11	9.02E-12	8.88E-12
		3～6	8.29E-11	1.22E-10	3.12E-10	3.47E-10	2.83E-10	1.07E-09	4.29E-10
		6～9	6.87E-09	5.14E-09	3.18E-08	5.60E-08	1.34E-08	6.36E-08	3.57E-08
		9～	7.92E-03	8.16E-03	1.65E-02	9.32E-03	1.07E-02	8.30E-03	1.07E-02

- QUADではCGS，TFQMRの精度が大幅に向上
- 2つのグループに分けられてBiCGのグループのほうが精度がよい
  - BiCG,CGS
  - TFQMR,BiCGSTAB,BiCGSTAB(2),GPBiCG,BiCGSafe

実行時間最小の個数(非対称)

非対称		BiCG	CGS	BiCG STAB	BiCG STAB (2)	GPBi CG	TFQ MR	BiCG Safe
x=(1,…,1)^T	DOUBLE	21	24	21	18	2	3	3
	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

- DOUBLEではCGSが最もよく、BiCG, BiCGSTABが次点
- QUADではBiCGが最もよく, CGSが次点。BiCGSTABは大幅に減少

4倍精度でのみ収束する行列(非対称)

非対称:33個

行列名	条件数
rdb968	2.50E+01
rdb200l	2.84E+02
rdb450l	5.30E+02
rdb800l	7.97E+02
rdb1250l	1.17E+03
rdb450	1.64E+03
rdb2048l	1.81E+03
rdb3200l	2.71E+03
rdb1250	3.98E+03
rdb2048	6.21E+03
olm100	3.06E+04
dwa512	3.72E+04
hor_131	1.27E+05
af23560	3.50E+05
olm500	7.60E+05
olm1000	3.04E+06
saylr4	6.92E+06

行列名	条件数
olm2000	1.21E+07
steam1	2.99E+07
olm5000	7.58E+07
pores_2	3.31E+08
saylr1	1.59E+09
utm5940	1.91E+09
fidap002	5.48E+10
steam3	5.51E+10
fidap003	6.11E+10
fidap007	1.93E+11
watt_2	1.37E+12
fs_183_1	1.51E+13
fs_183_3	2.69E+13
fidap009	4.05E+13
fidap013	3.94E+15
sherman3	6.90E+16

QUADの収束改善率（非対称）

	条件数	BiCG	CGS	BiCGSTAB	BiCGSTAB(2)	GPBiCG	TFQMR	BiCGSafe
x=(1,…,1)^T	～3	0.00%	10.53%	15.79%	10.53%	5.26%	10.53%	5.26%
	3～6	5.71%	17.14%	20.00%	17.14%	11.43%	17.14%	8.57%
	6～9	11.11%	22.22%	11.11%	11.11%	22.22%	22.22%	22.22%
	9～	21.21%	18.18%	9.09%	9.09%	12.12%	21.21%	12.12%
x=(1,−1,…,1,−1)^T	～3	0.00%	36.84%	15.79%	15.79%	5.26%	36.84%	5.26%
	3～6	2.86%	28.57%	20.00%	17.14%	11.43%	28.57%	11.43%
	6～9	11.11%	27.78%	16.67%	16.67%	22.22%	16.67%	22.22%
	9～	21.21%	24.24%	6.06%	9.09%	18.18%	27.27%	12.12%
x=random	～3	0.00%	0.00%	21.05%	10.53%	0.00%	0.00%	0.00%
	3～6	2.86%	2.86%	17.14%	14.29%	5.71%	2.86%	5.71%
	6～9	16.67%	11.11%	11.11%	5.56%	16.67%	16.67%	16.67%
	9～	15.15%	18.18%	6.06%	15.15%	9.09%	30.30%	15.15%

- BiCG, GPBiCG,BiCGSafeは条件数～10^9に対して条件数が増加すれば改善率も増加
- CGS,TFQMRは解xよって改善率にばらつきが生じている
- BiCGSTAB,BiCGSTAB(2)は条件数10^6～で改善率が減少

まとめ

- 高速な4倍精度演算を実装
  - FORTRAN4倍精度より2.8倍高速
  - 倍精度の3.5倍程度の実行時間
  - 反復回数はFORTRAN4倍精度と同じ～10%増

まとめ

- QUADを利用することで
  - 倍精度では収束しないものが収束
    - 対称：16%　　非対称：30%
    - 条件数～10^6で多く発生していたブレイクダウンが減少
  - 倍精度で収束するものでも反復回数の改善
    - 対称：平均16%（最大50%）　　非対称：平均25%（最大90%）
    - 解法によって条件数に比例または一定
  - 解の精度の向上
    - CGS,TFQMRは精度が大幅に向上
- QUADでは収束性、解の精度、実行時間ともに対称ではCG、非対称ではBiCGがよい