

連立一次方程式の数値解に対する 精度保証の現状

荻田 武史

早稲田大学 教育学部

区間解析

- (1950年代) Sunaga : 実数の区間を基礎データ型とする区間演算という概念を導入した .
- (1960年代) Moore : 区間解析を学位論文のテーマとし , 専門書を出版した .
- (1980年代) Kulisch-Miranker : 完全精度内積演算 .
- (2000) Oishi-Rump : 区間演算の単位をベクトルの内積や行列の乗算に拡張した . 高速精度保証の始まり .

準備

$\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T \in \mathbb{R}^n$ に対し,

$$\|\mathbf{x}\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq n} |x_i|,$$

$$|\mathbf{x}| = (|x_1|, |x_2|, \dots, |x_n|)^T.$$

$A = (a_{i,j}), B = (b_{i,j}) \in \mathbb{R}^{m \times n}$ に対し,

$$\|A\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq m} \sum_{1 \leq j \leq n} |a_{i,j}|,$$

$$|A| = (|a_{i,j}|).$$

$A \leq B \iff$ すべての (i, j) に対し $a_{i,j} \leq b_{i,j}$.

連立一次方程式の数値解の精度保証

$A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$ に対して $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ を解く

$$\implies \begin{cases} \mathbf{x}^* & : \text{真の解 (厳密解)} \\ \tilde{\mathbf{x}} & : \text{近似解 (数値解)} \end{cases}$$

$A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ の近似解 $\tilde{\mathbf{x}}$ の精度保証

$$\begin{aligned} \|A^{-1}\|_{\infty} \leq \alpha &\implies \|\tilde{\mathbf{x}} - \mathbf{x}^*\|_{\infty} \leq \epsilon_{\text{ABS}} \implies \frac{\|\tilde{\mathbf{x}} - \mathbf{x}^*\|_{\infty}}{\|\mathbf{x}^*\|_{\infty}} \leq \epsilon_{\text{REL}} \\ &\implies |\tilde{\mathbf{x}} - \mathbf{x}^*| \leq \epsilon_{\text{ABS}} \quad (\text{要素毎評価}) \end{aligned}$$

高速精度保証の現状

密行列	直接解法	非対称	Oishi-Rump (2002)
		対称	Oishi-Rump (2002)
疎行列	直接解法	非対称	Rump (1994), Ogita et al.
		対称	Rump (1994), Ogita et al.
	反復解法	対角優位	Oishi
		単調行列	Ogita-Oishi-Ushiro (2001)
		H-行列	Ogita-Oishi
		TN 行列	Oishi-Ogita
		それ以外	unknown

概要

目的 連立一次方程式 $Ax = b$ の近似解と真の解の誤差を
IEEE 標準 754 に従う計算機上で**高速**かつ**厳密**に検証する

- 係数行列 A が**疎**で**単調行列** ($A^{-1} \geq 0$) の場合
- 係数行列 A が**疎**で**対称行列**の場合
- 近似解の精度をなるべく**シャープ**に保証する
- 近似解の精度を**要素毎**に保証する
- 近似解自身の精度を改善する

精度保証方法（一般密行列）

定理

$A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$, $R: A^{-1}$ の近似, $I: n \times n$ 単位行列.
 $\|RA - I\|_\infty < 1$ のとき A は正則で,

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

$$\|\tilde{\mathbf{x}} - \mathbf{x}^*\|_\infty \leq \frac{\|R(A\tilde{\mathbf{x}} - \mathbf{b})\|_\infty}{1 - \|RA - I\|_\infty} \leq \frac{\|R\|_\infty \|A\tilde{\mathbf{x}} - \mathbf{b}\|_\infty}{1 - \|RA - I\|_\infty}.$$

Oishi-Rump によって, 精度保証が $\frac{2}{3}n^3$ flops (近似解を得るのと同じ計算量) でできることが示された.

精度保証方法（単調疎行列）

定理 (Ogita-Oishi-Ushiro)

$A \in \mathbb{R}^{n \times n}$: 単調行列 ($A^{-1} \geq O$) , $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$,
 $\mathbf{e} = (1, 1, \dots, 1)^T \in \mathbb{R}^n$, $\tilde{\mathbf{y}} : A\mathbf{y} = \mathbf{e}$ の近似解 .
 $\|A\tilde{\mathbf{y}} - \mathbf{e}\|_\infty < 1$ のとき ,

$$\|A^{-1}\|_\infty \leq \frac{\|\tilde{\mathbf{y}}\|_\infty}{1 - \|A\tilde{\mathbf{y}} - \mathbf{e}\|_\infty} .$$

- $A\mathbf{y} = \mathbf{e}$ を解くだけなので , $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ と同じソルバを適用できる .
- $\|A\tilde{\mathbf{y}} - \mathbf{e}\|_\infty < 1$ さえ満たせば良い (反復解法向き) .

定理の証明

$A^{-1} \geq 0$ より,

$$\begin{aligned}\|A^{-1}\|_{\infty} &= \|A^{-1}\mathbf{e}\|_{\infty} \\ &\leq \|\tilde{\mathbf{y}} - A^{-1}\mathbf{e}\|_{\infty} + \|\tilde{\mathbf{y}}\|_{\infty} \\ &\leq \|A^{-1}\|_{\infty}\|A\tilde{\mathbf{y}} - \mathbf{e}\|_{\infty} + \|\tilde{\mathbf{y}}\|_{\infty}.\end{aligned}$$

移項して整理すると

$$(1 - \|A\tilde{\mathbf{y}} - \mathbf{e}\|_{\infty})\|A^{-1}\|_{\infty} \leq \|\tilde{\mathbf{y}}\|_{\infty}.$$

よって, $\|A\tilde{\mathbf{y}} - \mathbf{e}\|_{\infty} < 1$ ならば,

$$\|A^{-1}\|_{\infty} \leq \frac{\|\tilde{\mathbf{y}}\|_{\infty}}{1 - \|A\tilde{\mathbf{y}} - \mathbf{e}\|_{\infty}}. \quad \square$$

数値例（単調疎行列）

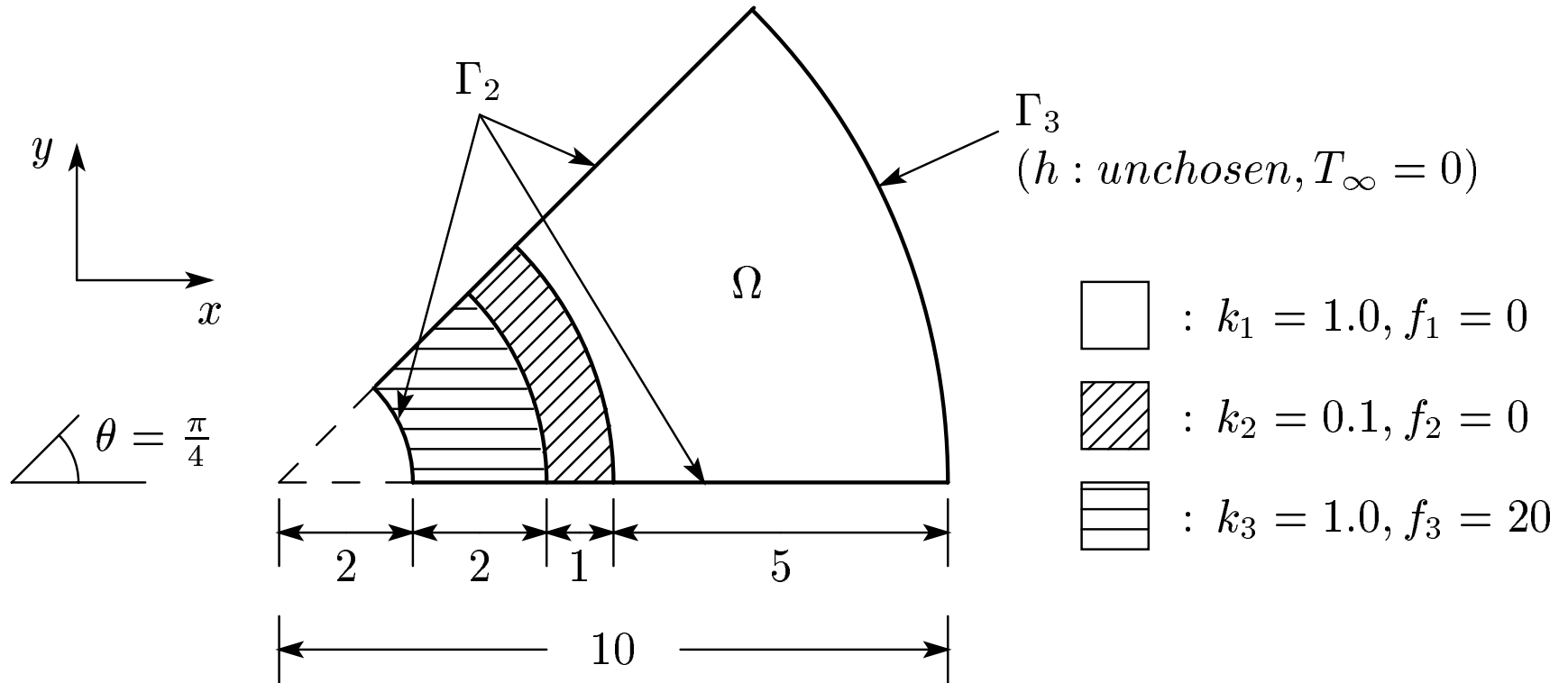
- A, b : 2次元 Poisson 方程式を有限要素法で離散化
- 問題サイズ n は 10,000 ~ 250,000
- MICCG (停止条件: $\frac{\|A\tilde{x} - b\|_2}{\|b\|_2} \leq 10^{-12}$, $\|A\tilde{y} - e\|_\infty \leq 10^{-3}$)

Table 1: Results of verification of solution

Grid size (n)	Sol. time[s]	Ver. time[s]	Rel. error bound
10,000	3.3	1.7	4.1×10^{-10}
40,000	27.1	10.2	2.5×10^{-9}
90,000	90.7	32.3	7.1×10^{-9}
160,000	216.2	77.0	1.6×10^{-8}
250,000	458.5	146.8	3.3×10^{-8}

Intel Celeron 566MHz CPU

数値例（対象モデル）



$$\begin{cases}
 \operatorname{div}\{-k \cdot \operatorname{grad}(u)\} = f & \text{in } \Omega \\
 \{-k \cdot \operatorname{grad}(u)\} \times \mathbf{n} = 0 & \text{on } \Gamma_2 \\
 \{-k \cdot \operatorname{grad}(u)\} \times \mathbf{n} = h(u - T_\infty) & \text{on } \Gamma_3
 \end{cases}$$

精度保証方法（H-行列）

M-行列

$A = (a_{i,j}) \in \mathbb{R}^{n \times n}$ に対し, $a_{i,j} \leq 0$ for $i \neq j$, A が正則かつ $A^{-1} \geq O$.

H-行列

$A = (a_{i,j}) \in \mathbb{R}^{n \times n}$ の比較行列 $\mathcal{M}(A) = (\hat{a}_{i,j})$ が M-行列 .
ここで

$$\hat{a}_{i,j} = \begin{cases} |a_{i,j}| & (i = j) \\ -|a_{i,j}| & (i \neq j) \end{cases} .$$

A が H-行列ならば

$$|A^{-1}| \leq \mathcal{M}(A)^{-1} \implies \|A^{-1}\|_{\infty} \leq \|\mathcal{M}(A)^{-1}\|_{\infty}$$

精度保証方法（TN行列）

Totally Nonnegative 行列

$A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ に対し， A のすべての小行列式が非負．

$$A^{-1}(\text{要素の符号}) = \begin{bmatrix} + & - & + & - \\ - & + & - & + \\ + & - & + & - \\ - & + & - & + \end{bmatrix} .$$

$$\implies \|A^{-1}\|_{\infty} = \|A^{-1}\mathbf{e}\|_{\infty}$$

但し， $e_i = (-1)^{i+1}$ for $i = 1, 2, \dots, n$

精度保証方法（対称疎行列）

定理 (Rump, Ogita-Oishi-Ushiro)

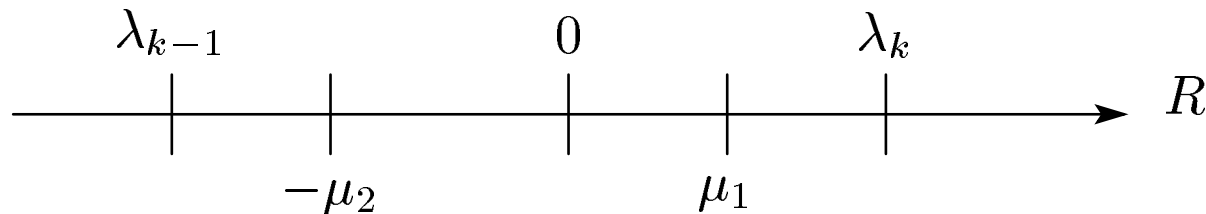
$A \in \mathbb{R}^{n \times n}$: 対称行列, μ_1, μ_2 : 正の数,
 \tilde{L}_1, \tilde{D}_1 : $A - \mu_1 I$ の近似 LDL^T 分解要素,
 $E_1 = A - \mu_1 I - \tilde{L}_1 \tilde{D}_1 \tilde{L}_1^T$,
 \tilde{L}_2, \tilde{D}_2 : $A + \mu_2 I$ の近似 LDL^T 分解要素,
 $E_2 = A + \mu_2 I - \tilde{L}_2 \tilde{D}_2 \tilde{L}_2^T$.

- (1) \tilde{D}_1 と \tilde{D}_2 の負の要素数が等しく,
- (2) $\mu_1 > \|E_1\|_2$ かつ $\mu_2 > \|E_2\|_2$ ならば,

$$\|A^{-1}\|_{\infty} \leq \frac{\sqrt{n}}{\min\{\mu_1 - \|E_1\|_2, \mu_2 - \|E_2\|_2\}}.$$

定理の証明の概要 (1)

対称行列 A の絶対値最小の固有値の下限を精度保証付きで計算する． A の小さいほうから k 番目の固有値を $\lambda_k(A)$ とする．



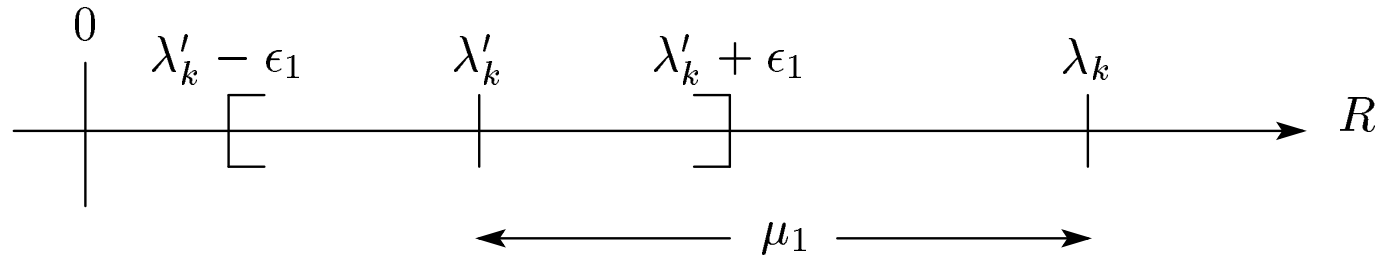
定理 (Weyl)

A, E が $n \times n$ 実対称行列のとき，

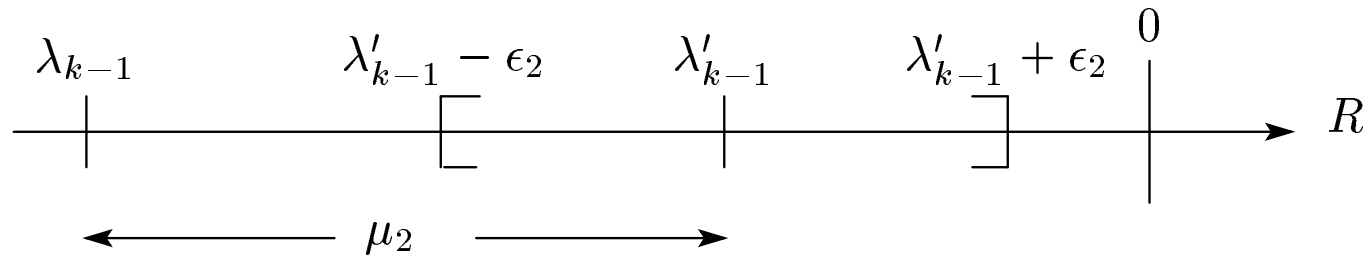
$$|\lambda_i(A) - \lambda_i(A + E)| \leq \|E\|_2 \text{ for } i = 1, 2, \dots, n$$

定理の証明の概要 (2)

$$\text{i) } A - \mu_1 I = \tilde{L}_1 \tilde{D}_1 \tilde{L}_1^T + E_1, \quad \|E_1\|_2 \leq \epsilon_1$$



$$\text{ii) } A + \mu_2 I = \tilde{L}_2 \tilde{D}_2 \tilde{L}_2^T + E_2, \quad \|E_2\|_2 \leq \epsilon_2$$



数値例（対称疎行列）

- A, b : Matrix Market から入手
- ダイレクトスパースソルバー（ LDL^T 分解）で解く

Table 2: Results of verification of solution

Problem (n)	Sol. time[s]	Ver. time[s]	Error bound
BCSSTK21 (3600)	0.13	0.12	6.2×10^{-14}
BCSSTK23 (3134)	2.5	6.6	2.4×10^{-14}
BCSSTK25 (15439)	5.8	14	3.9×10^{-12}
S1RMQ4S1 (5489)	1.7	1.2	4.4×10^{-12}
S1RMT3M1 (5489)	1.1	0.84	5.6×10^{-12}

Intel Pentium III 1GHz CPU

シャープな評価

前提条件

$$\|A^{-1}\|_{\infty} \leq \alpha.$$

従来方式

$$\begin{aligned}\|\tilde{\mathbf{x}} - \mathbf{x}^*\|_{\infty} &\leq \|A^{-1}\|_{\infty} \|A\tilde{\mathbf{x}} - \mathbf{b}\|_{\infty} \\ &\leq \alpha \|A\tilde{\mathbf{x}} - \mathbf{b}\|_{\infty}.\end{aligned}$$

⇒ 過大評価

提案方式

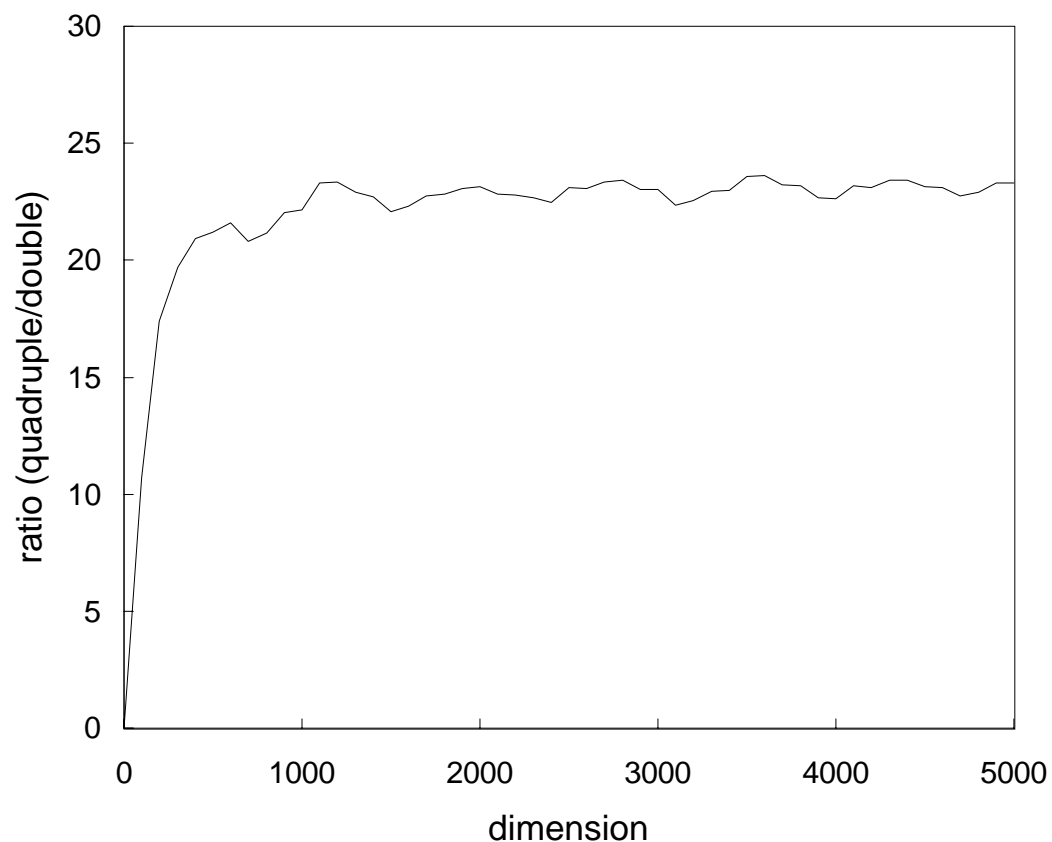
$\mathbf{r} = A\tilde{\mathbf{x}} - \mathbf{b}$, $\underline{\mathbf{r}} \leq \mathbf{r} \leq \bar{\mathbf{r}}$, $\tilde{\mathbf{z}}$ を $A\mathbf{z} = \underline{\mathbf{r}}$ の近似解とする (ここで, $\underline{\mathbf{r}}$, $\bar{\mathbf{r}}$ は高精度に計算する)

$$\begin{aligned}\|\tilde{\mathbf{x}} - \mathbf{x}^*\|_{\infty} &\leq \|\tilde{\mathbf{z}}\|_{\infty} + \|A^{-1}\|_{\infty} \|A\tilde{\mathbf{z}} - \mathbf{r}\|_{\infty} \\ &\leq \|\tilde{\mathbf{z}}\|_{\infty} + \alpha (\|A\tilde{\mathbf{z}} - \underline{\mathbf{r}}\|_{\infty} + \|\bar{\mathbf{r}} - \underline{\mathbf{r}}\|_{\infty}).\end{aligned}$$

⇒ シャープな評価

残差の高精度計算

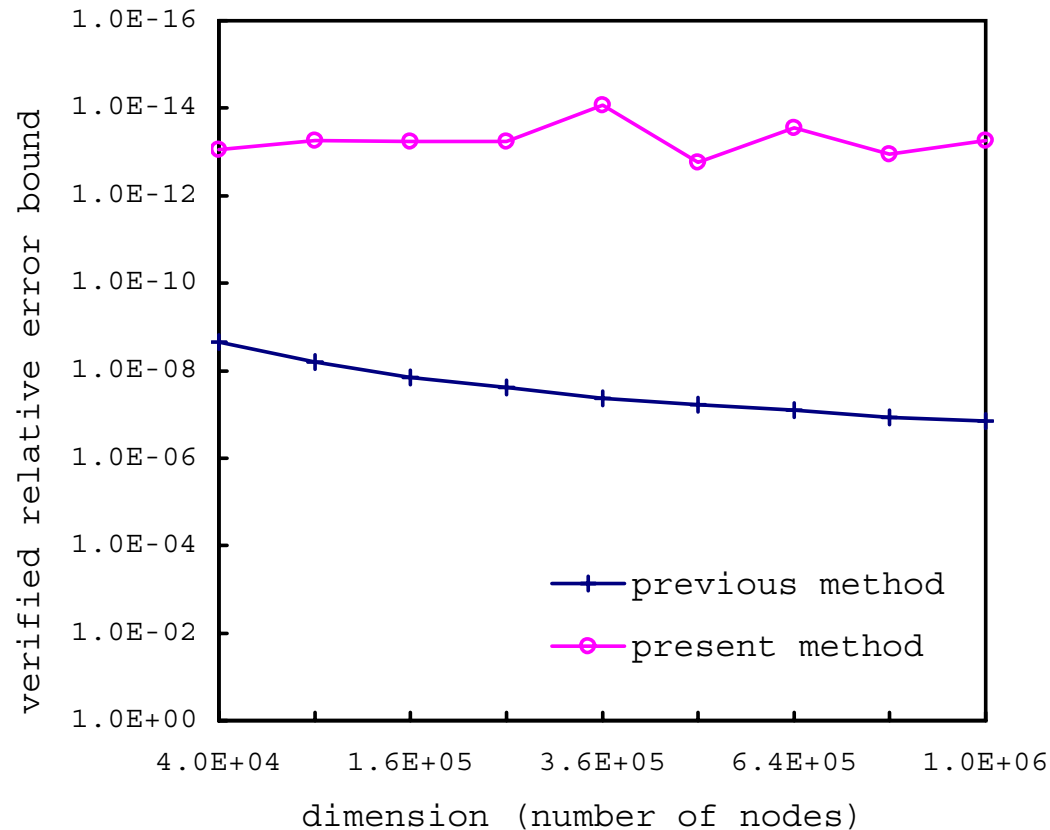
$A\tilde{x} - b$ の計算時間の比較 (倍精度 vs. 4 倍精度)



HITACHI SR8000 (8 proc., 8GFLOPS)

数値例（シャープな評価）(1)

（単調行列の数値例と同じ評価モデル）



HITACHI SR8000 (8 proc., 8GFLOPS)

数値例（シャープな評価）(2)

Table 3: Results of elapsed time[sec]

(A) Time for solving $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$

(B) Time for verifying $\|A^{-1}\|_{\infty}$

(C) Time for verifying $\frac{\|\tilde{\mathbf{x}} - \mathbf{x}^*\|_{\infty}}{\|\mathbf{x}^*\|_{\infty}}$

Dimension	(A)	(B)	(C)	(B) + (C)	Total
40,000	0.97	0.54	0.65	1.19	2.16
160,000	2.92	1.65	1.97	3.62	6.54
360,000	20.36	10.54	15.99	26.53	46.89
640,000	51.97	24.34	34.62	58.96	110.93
1,000,000	99.23	46.52	65.76	112.28	211.51

HITACHI SR8000 (8 proc., 8GFLOPS)

要素毎評価

ノルム評価

$$\|\tilde{\mathbf{x}} - \mathbf{x}^*\|_{\infty} \leq \|\tilde{\mathbf{z}}\|_{\infty} + \alpha (\|A\tilde{\mathbf{z}} - \underline{\mathbf{r}}\|_{\infty} + \|\bar{\mathbf{r}} - \underline{\mathbf{r}}\|_{\infty}).$$

要素毎評価

$$|\tilde{\mathbf{x}} - \mathbf{x}^*| \leq |\tilde{\mathbf{z}}| + \alpha (\|A\tilde{\mathbf{z}} - \underline{\mathbf{r}}\|_{\infty} + \|\bar{\mathbf{r}} - \underline{\mathbf{r}}\|_{\infty}) \mathbf{e},$$

但し, $\mathbf{e} = (1, 1, \dots, 1)^T$.

⇒ 要素毎にシャープな評価

数値例（要素毎評価）(1)

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} 5 \\ 6 \end{bmatrix}.$$

$$\implies A^{-1} = \begin{bmatrix} -2 & 1 \\ 1.5 & -0.5 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{x}^* = A^{-1}\mathbf{b} = \begin{bmatrix} -4 \\ 4.5 \end{bmatrix}.$$

ここで, $\tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{x}^* + (10^{-6}, 10^{-9})^T$ とすると

$$\begin{bmatrix} 1.001999997 \times 10^{-6} \\ 3.003999994 \times 10^{-6} \end{bmatrix} \leq \mathbf{r} \leq \begin{bmatrix} 1.002000003 \times 10^{-6} \\ 3.004000007 \times 10^{-6} \end{bmatrix}.$$

$\tilde{\mathbf{r}} = (1.002 \times 10^{-6}, 3.004 \times 10^{-6})^T$ とする.

数値例（要素毎評価）(2)

$$A^{-1}\tilde{\mathbf{r}} \approx \begin{bmatrix} 10^{-6} \\ 10^{-9} \end{bmatrix} = \tilde{\mathbf{z}}.$$

$$\begin{bmatrix} -2.97 \times 10^{-15} \\ -6.97 \times 10^{-15} \end{bmatrix} \leq A\tilde{\mathbf{z}} - \mathbf{r} \leq \begin{bmatrix} 2.36 \times 10^{-15} \\ 5.47 \times 10^{-15} \end{bmatrix}.$$

従来方式

$$|\tilde{\mathbf{x}} - \mathbf{x}^*| \leq \|A^{-1}\|_{\infty} \|\mathbf{r}\|_{\infty} \mathbf{e} \leq \begin{bmatrix} 9.1 \times 10^{-6} \\ 9.1 \times 10^{-6} \end{bmatrix}.$$

提案方式

$$\begin{aligned} |\tilde{\mathbf{x}} - \mathbf{x}^*| &\leq |\tilde{\mathbf{z}}| + \|A^{-1}\|_{\infty} \|A\tilde{\mathbf{z}} - \mathbf{r}\|_{\infty} \mathbf{e} \\ &\leq \begin{bmatrix} 1.000000003 \times 10^{-6} \\ 1.00002091 \times 10^{-9} \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

近似解の精度の改善

残差反復を用いて近似解の精度を改善する。

$$Ax = b \implies \boxed{x^* = \tilde{x} - A^{-1}(A\tilde{x} - b)}$$

残差反復

Step 1: $\tilde{r} \leftarrow A\tilde{x}^{(k)} - b$ (残差を高精度に計算)

Step 2: $Az = \tilde{r}$ を解く (得られた近似解を \tilde{z} とする)

Step 3: $\tilde{x}^{(k+1)} \leftarrow \tilde{x}^{(k)} - \tilde{z}$

\implies **Step 1, Step 2** は精度保証プロセスで実行済み

\implies 近似解の精度保証と同時に精度自体も改善できる

数値例（残差反復と精度保証）

- A, b : 数値例（単調疎行列）と同じ Poisson 方程式
- 行列サイズ: 160000×160000 （条件数: $\text{cond}_\infty(A) \approx 10^{12}$ ）
- 反復解法（MICCG 法）で解く

Table 4: Results of verification with residual iteration

(R) Upper bound of $\|A\tilde{x} - b\|_\infty$, (V) Relative error bound.

Number of iterations	Previous method		Present method	
	(R)	(V)	(R)	(V)
0	7.9×10^{-5}	1.7×10^{-1}	7.9×10^{-5}	1.4×10^{-7}
1	5.5×10^{-6}	1.1×10^{-2}	2.9×10^{-6}	5.8×10^{-14}
2	5.4×10^{-6}	1.0×10^{-2}	2.9×10^{-6}	1.2×10^{-16}

HITACHI SR8000 (8 proc., 8GFLOPS)

結言・今後の課題

- 係数行列が特殊な構造を持つ連立一次方程式に適応した高速な精度保証方式を提案
- 近似解の精度をほとんど正確に保証する方式を提案
- 残差反復と精度保証を組み合わせた新しい方式を提案
- 数値実験では良好な結果
- 適用範囲の拡張（特に反復解法の場合）
- 分散型並列計算機に実装
- 実際の数値計算ライブラリへの組み込み