精度保証のための線形計算基盤の構築に向けて

尾崎 克久[1,a)]

概要：本発表では，精度保証付き数値計算のために，どのように計算関数が設計されていることが望ましいかを主に行列積について解説する．精度保証付き数値計算では，数値計算による結果と真の結果との差である誤差の上限を定量的に求めるための技術が必要であり，その手法の１つに事前誤差解析と呼ばれる手法がある．事前誤差解析により求められた誤差の上限は計算順序に大きく依存する．長さが n のベクトル x, y に対する内積 $x^T y$ を考えるが，計算順序に依存しない解析を行った場合は n に比例する誤差の上限を得る．一方で計算方法を限定すれば，約 $\log_2 n$ に比例する誤差の上限を得ることができ，大きく改善できることが知られている．ただし，数値計算に使用するライブラリは HPC の専門家により高度に最適化されたものを使用するのが良いが，詳細が公開されていない場合もある．その場合は計算順序が特定できないために，n に比例する誤差解析の結果を使用せざるを得ない現状がある．発表当日は，著者らによる折衷案であるブロック実装による行列積計算のパフォーマンスとその精度保証への効果について紹介する．

キーワード：精度保証付き数値計算，線形計算ソフトウェア，事前誤差解析

High Performance Functions of Numerical Linear Algebra specialized for Verified Numerical Computations

Katsuhisa Ozaki[1,a)]

Abstract: This talk is concerned with verified numerical computations. Verified numerical computations output an upper bound of an error of a numerical solution. To obtain the error bound, an option is a priori error estimation. The upper bound of the error by a priori error estimation strongly depends on computational order. For a dot product of n-vectors, if order of computation is not known, then a priori error bound is related to n. However, for the best computational order, the a priori error bound is related to approximately $\log_2 n$. It is recommended for numerical computations to use a library which is highly optimized by researcher in the field of high performance computing (HPC). However, if details for the libraries are not open, then the computational order is unknown. Thus, the constant with n should be used for the a priori error bound. In the presentation, we introduce a compromise method which bridges a gap between a priori error bound and computational order by using block implementation of matrix multiplication.

Keywords: Verified Numerical Computations, BLAS, A Priori Error Estimation

[1] 芝浦工業大学
307 Fukasaku, Minama-ku, Saitama-shi, Saitama 337–8570, Japan
[a)] ozaki@sic.shibaura-it.ac.jp