多倍長計算手法

平成26年度第3四半期

目次

1.はじめに

ファインマンループ積分,量子モンテカルロ法
による物性スペクトル計算での精度上の問題
が解決を見ましたので,その結果のまとめを
中心に記述しました。
また今後,行列計算における反復解法が問題
になってくる事が考えられますので,その精度
に関して記述しました。

これらの問題はieee754-2008形式の
4倍精度及び拡張精度演算が必要になって
くる場合が多く,サーバーx5570,e5430
で主に実行しています。

2.Hadamard積分

積分法は二重指数関数型積分法を使用しています。

2.1　端点特異点の積分

$\int_0^1 \frac{1}{x}dx$の計算

$$\int_0^1 \frac{1}{x(1-x)}dx = \int_0^1 \frac{1}{x}dx + \int_0^1 \frac{1}{1-x}dx = 2\int_0^1 \frac{1}{x}dx$$

$$\int_0^1 \frac{1}{x}dx = \int_0^1 \frac{1}{1-x}dx$$

積分変数変換区間$[\varepsilon, 1-\varepsilon]$対応するtの値を$[-a, a](a > 0)$とする。

$$\int_0^1 \frac{1}{x(1-x)}dx = \lim_{\varepsilon \to 0}\left[\int_{\varepsilon}^{1-\varepsilon} \frac{1}{x(1-x)}dx\right]$$

$$= \lim_{a \to \infty}\left[\int_{-a}^{a} \pi \cosh(t)dt = \pi(e^{a} - e^{-a})\right]$$

$$\int_0^1 \frac{1}{x(1-x)}dx$$ **の積分結果**

二重指数関数型積分

$\varepsilon = 10^{-n}, h = 0.5^{16}$

n	tmax		積分値
30	3.78125	実行結果	0.1377527175764281Q+03
		解析解	0.1377527175737553Q+03
40	4.06250	実行結果	0.1825335145091959Q+03
		解析解	0.1825335145056543Q+03
50	4.28125	実行結果	0.2271904668671839Q+03
		解析解	0.2271904668627759Q+03
60	4.46875	実行結果	0.2740603967483030Q+03
		解析解	0.2740603967429856Q+03
70	4.62500	実行結果	0.3204203634779741Q+03
		解析解	0.3204203634717572Q+03
80	4.75000	実行結果	0.3630915590459988Q+03
		解析解	0.3630915590389539Q+03
90	4.87500	実行結果	0.4114434511893274Q+03
		解析解	0.4114434511813443Q+03
100	5.00000	実行結果	0.4662325224569613Q+03
		解析解	0.4662325224479152Q+03

2.2　一般式計算

Hadamard積分は

$$n=1 \quad \lim_{\varepsilon->0}[\int_0^1 \frac{1}{x}dx-\log(\frac{1}{\varepsilon})]$$

$$n>1 \quad \lim_{\varepsilon->0}[\int_0^1 \frac{1}{x^n}dx-\frac{1}{n-1}(\frac{1}{\varepsilon})^{n-1}]$$

で定義されます。

今二重指数関数数型積分で分点が$[\varepsilon,1-\varepsilon]$にありそれに対応するtの値を$[-a,a] \quad (a>0)$とします。

$I_1=\int_\varepsilon^{1-\varepsilon}\frac{1}{x}dx, I_2=\int_\varepsilon^{1-\varepsilon}\frac{1}{x^2}dx, I_n=\int_\varepsilon^{1-\varepsilon}\frac{1}{x^n}dx(n\geq 3)$とします。

$$\frac{1}{\varepsilon}=1+e^{\pi\sinh(a)}$$

$n=1$では$\int_\varepsilon^{1-\varepsilon}\frac{1}{x(1-x)}dx=2\int_\varepsilon^{1-\varepsilon}\frac{1}{x}dx=\int_{-a}^{a}\pi\cosh(t)dt$　より

$$I_1=\frac{1}{2}\int_{-a}^{a}\pi\cosh(t)dt=\int_0^a\pi\cosh(t)dt=\pi\sinh(a)$$

$$I_2=\int_{-a}^{a}\pi\cosh(t)e^{-\pi\sinh(t)}dt=e^{\pi\sinh(a)}-e^{-\pi\sinh(a)}$$

$$I_1-\log(\frac{1}{\varepsilon})=\pi\sinh(a)-\log(1+e^{\pi\sinh(a)})=-e^{-\pi\sinh(a)}$$

$$I_2-\frac{1}{\varepsilon}=-1-e^{-\pi\sinh(a)}$$

$$I_n=\sum_{i=0}^{n-2}\frac{1}{i+1}{}_{n-2}C_i(e^{\pi(i+1)\sinh(a)}-e^{-\pi(i+1)\sinh(a)})$$

$$\frac{1}{n-1}(\frac{1}{\varepsilon})^{n-1}=\frac{1}{n-1}(1+\sum_{i=1}^{n-1}{}_{n-1}C_i(e^{\pi i\sinh(a)}))$$

よって$I_n-\frac{1}{n-1}(\frac{1}{\varepsilon})^{n-1}=-\frac{1}{n-1}+\sum_{i=0}^{n-2}\frac{1}{i+1}{}_{n-2}C_i(e^{-\pi(i+1)\sinh(a)})$

$\varepsilon=2^{-53}$なら$a=3.15 \quad e^{-\pi\sinh(a)}=10^{-15.89}$で

Hadamard　$I_1=0$

Hadamard　$I_n=-\frac{1}{n-1}(n\geq 2)$

となり,ε算法での値とも一致する。

3.3次元反復法の反復回数

問題は3次元ポアソン方程式

$$\Delta u + R\frac{\partial u}{\partial x} = -f$$

領域$[0,1]\times[0,1]\times[0,1]$

解析解$u(x,y,z) = e^{xyz}\times\sin(\pi x)\times\sin(\pi y)\times\sin(\pi z)$

非対称問題。

解法

bcg(biconjugate gradient)法

$R = 100, nx = ny = nz = 129$

cgs(conjugate gradient square)法

$R = 100, nx = ny = nz = 65$

収束判定値は共役残差10^{-12}

初期値$u(x,y,z) = 0$

3.1 bcg法

bcg法反復回数

精度	反復回数	正規化	実測/正規化
56ビット	50001	none	none
60ビット	4315	node	none
64ビット	1579	931	1.696
68ビット	938	826	1.136
72ビット	784	738	1.062
76ビット	593	664	0.893
3倍精度	482	600	0.803
84ビット	439	545	0.806
88ビット	396	497	0.797
92ビット	368	455	0.809
96ビット	336	418	0.804
100ビット	325	386	0.842
104ビット	319	357	0.894
108ビット	313	331	0.946
4倍精度	308	308	1

(注)50001回は50000回反復
で収束しなかった事を示しています。

正規化
P有効ビット数=精度のビット数+1

正規化反復回数

$$308 \times \left(\frac{113}{P}\right)^2$$

性能的には3倍精度が最も効率が良いと言えます。

3.2 cgs法

e5430 cgs 反復回数

倍精度は10000回で収束せず。

反復回数

精度	ieee	ieee smp	dd
4倍精度	392	448	670
5倍精度	226	155	none
6倍精度	130	131	144
7倍精度	128	128	none
8倍精度	128	128	128

実行時間(秒)

精度	ieee	ieee smp	dd
4倍精度	159.2898	105.5012	95.3938
5倍精度	221.2924	75.4942	none
6倍精度	144.4976	68.8694	39.1221
7倍精度	171.5329	69.8044	none
8倍精度	213.6745	61.7321	70.0613

q4sum,q5sum 使用

精度	反復回数	実行時間
4倍精度	378	160.5706
5倍精度	155	157.2171

(1) ieee形式,dd形式ともに6倍精度演算が最も効率が良い事を示しています。

(2) q4sum,q5sumの様に総和演算を無限精度演算を使用すると,5倍精度の収束が良くなり,ieeeでのsmp実行と同じ反復回数となっています。

dd形式cgs反復回数

ビット数	反復回数
95	4931
96	2155
97	3506
98	2811
99	1250
100	1103
101	1080
102	1027
103	815
104	702
105	630
106	670

4 infra 問題

4.1 3次元積分計算

$$I=\int_0^1\int_0^{1-x_1}\int_0^{1-x_1-x_2}\int_0^{1-x_1-x_2-x_3}\int_0^{1-x_1-x_2-x_3-x_4}\frac{1}{D^2}d\Omega$$

$$d\Omega=dx_5dx_4dx_3dx_2dx_1$$

$$\begin{aligned}D=&C(x_3M^2+x_6\lambda^2)\\&+(x_1+x_2+x_3)(x_4+x_5)^2\\&+(x_1+x_2)^2(1-x_1-x_2)\\&+2x_3(x_1+x_2)(x_4+x_5)\end{aligned}$$

$$C=x_3(1-x_1-x_2-x_3)+(x_1+x_2)(1-x_1-x_2)$$

$$x_6=1-x_1-x_2-x_3-x_4-x_5$$

で$\lambda_n=10^{-n}$での積分値I_nの一次差分，
二次差分が10進10桁一致する事を検証。

3次元化

$$I=\int_0^1\int_0^1\int_0^1\frac{J}{D^2}dxdydz$$

$$J=(1-x)^2yz$$

$$\begin{aligned}D=&[(1-x+xy(1-y)]\\&\times[x(1-y)M^2+(1-x)(1-z)\lambda^2]\\&+[xy^2(1-xy)+(1-x)^2z^2\\&+2x(1-x)y(1-y)z]\end{aligned}$$

M=0の場合をcase1,M=91.19/0.1057の場合をcase2,M=125.5/0.1057の場合をcase3としています。

	case1 2次差分一覧表		
n	N=728	N=1456	N=2912
16	5.3018776181	5.3018981105	5.3018981105
17	5.3020175196	5.3018981105	5.3018981105
18	5.3020700159	5.3018981101	5.3018981105
19	5.3016335118	5.3018981100	5.3018981105
20	5.3023935051	5.3018981077	5.3018981105
21	5.3029475759	5.3018981216	5.3018981105
22	5.2971188923	5.3018980753	5.3018981105
23	5.3041142583	5.3018982336	5.3018981105
24	5.3093273173	5.3018981250	5.3018981105
25	5.2943816325	5.3018976075	5.3018981105
26	5.2794768170	5.3018979849	5.3018981105
27	5.3558839326	5.3019004772	5.3018981105
28	5.3091134086	5.3018977130	5.3018981105

Case1　の場合は

積分値は $\log(\frac{1}{\lambda^2})$ **の2次式になるので**

二次差分を求めています。

$\lambda_n = 10^{-n}$

	case2 一次差分一覧表		
n	N=728	N=1456	N=2912
16	0.000038733241268	0.000038733248507	0.000038733248507
17	0.000038733234064	0.000038733248507	0.000038733248507
18	0.000038733266331	0.000038733248507	0.000038733248507
19	0.000038733326864	0.000038733248507	0.000038733248507
20	0.000038733174086	0.000038733248506	0.000038733248507
21	0.000038733353236	0.000038733248506	0.000038733248507
22	0.000038733544343	0.000038733248510	0.000038733248507
23	0.000038731850666	0.000038733248499	0.000038733248507
24	0.000038732625311	0.000038733248540	0.000038733248507
25	0.000038734471892	0.000038733248546	0.000038733248507
26	0.000038731896322	0.000038733248424	0.000038733248507
27	0.000038724804488	0.000038733248425	0.000038733248507
28	0.000038738845469	0.000038733249112	0.000038733248507
29	0.000038740941884	0.000038733249063	0.000038733248507

	case3 一次差分一覧表		
n	N=728	N=1456	N=2912
16	0.000021493099355	0.000021493102821	0.000021493102821
17	0.000021493093286	0.000021493102821	0.000021493102821
18	0.000021493115638	0.000021493102821	0.000021493102821
19	0.000021493142483	0.000021493102821	0.000021493102821
20	0.000021493082925	0.000021493102821	0.000021493102821
21	0.000021493117428	0.000021493102821	0.000021493102821
22	0.000021493302447	0.000021493102823	0.000021493102821
23	0.000021492401183	0.000021493102817	0.000021493102821
24	0.000021492629664	0.000021493102839	0.000021493102821
25	0.000021493704654	0.000021493102844	0.000021493102821
26	0.000021492781172	0.000021493102769	0.000021493102821
27	0.000021488800060	0.000021493102792	0.000021493102821
28	0.000021495565878	0.000021493103126	0.000021493102821
29	0.000021496356431	0.000021493103198	0.000021493102821

積分値は$\log\left(\frac{1}{\lambda^2}\right)$の一次式となるので一次差分を求めています。$\lambda_n = 10^{-n}$

4.2 bsgamma計算

bsgamma planar

$$D = c(x_1(p_1{}^2 - m_1{}^2) + x_2(p_2{}^2 - m_2{}^2) - x_3 m_3{}^2 - x_6 m_6{}^2)$$
$$- c_1(x_5{}^2 p_2{}^2 + x_4{}^2 p_1{}^2 + x_4 x_5 (p_1{}^2 + p_2{}^2))$$
$$- c_2(x_2{}^2 p_2{}^2 + x_1{}^2 p_1{}^2 + x_1 x_2 (p_1{}^2 + p_2{}^2))$$
$$- 2x_2 x_3 x_5 p_2{}^2 - 2x_1 x_3 x_4 p_1{}^2 - x_3(x_2 x_4 + x_1 x_5)(p_1{}^2 + p_2{}^2)$$

$$x_6 = 1 - x_1 - x_2 - x_3 - x_4 - x_5$$

$$c_1 = x_1 + x_2 + x_3$$

$$c_2 = 1 - x_1 - x_2$$

$$c = x_3(1 - x_1 - x_2 - x_3) + (x_1 + x_2)(1 - x_1 - x_2) = x_3(c_2 - x_3) + (1 - c_2)c_2$$

$$p_1{}^2 = m_b{}^2, p_2{}^2 = m_s{}^2, m_1 = m_2 = 1.5, m_3 = 80.3477, m_b = 4.7, m_s = 0.094$$

$$m_6 = \lambda$$

$$I = \int_0^1 \int_0^{1-x_1} \int_0^{1-x_1-x_2} \int_0^{1-x_1-x_2-x_3} \int_0^{1-x_1-x_2-x_3-x_4} \frac{1}{D^2} dx_5 dx_4 dx_3 dx_2 dx_1$$

これを4次元化して計算しています。

	bsgamma 一次差分結果		
n	N=728	N=1024	N=1456
16	0.000881676036303	0.000881676024318	0.000881676024308
17	0.000881675957819	0.000881676024256	0.000881676024308
18	0.000881676127056	0.000881676024379	0.000881676024308
19	0.000881676192593	0.000881676024096	0.000881676024308
20	0.000881675929067	0.000881676025850	0.000881676024307
21	0.000881675933258	0.000881676026869	0.000881676024308
22	0.000881675979610	0.000881676024874	0.000881676024305

積分値は $\log(\frac{1}{\lambda^2})$ **の一次式となりますので**

一次差分を求めています。

$\lambda_n = 10^{-n}$

5.量子モンテカルロ法による物性スペクトル計算

5.1 248倍精度演算結果

x5570 L=20β ,U=10		実行時間(秒)		
精度	有効ビット数	β	n=20	n=100
68倍精度	2161	100	2790	254609
128倍精度	4081	180	16956	1528008
188倍精度	6001	250	50123	4375879
248倍精度	7921	300	100222	9036094

絶対値最小値一覧

精度	n=20	n=100
68倍精度	0.330D-307	0.330D-307
128倍精度	0.514D-553	0.512D-553
188倍精度	0.476D-768	0.468D-768
248倍精度	0.126D-921	0.121D-921

N=20とN=100での実測値では大きな差は見られません。

5.2 超多倍長計算の演算量

演算量計算

ここで演算量は実行時間に比例すると仮定しています。

演算量I(n)

$$\boxed{I(100) = I(20)^{m}}$$

行列積m=3

精度	m
68倍精度	2.805
128倍精度	2.797
188倍精度	2.777
248倍精度	2.797

68倍精度演算のLで正規化した演算量

I(P) P有効ビット数

$$\boxed{I(P) = \left(\frac{P}{2161}\right)^{m} I(2161)}$$

乗算　m=2

精度	m
128倍精度	1.894
188倍精度	1.888
248倍精度	1.902