

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 29 年 6 月 14 日現在

機関番号：32689

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2015～2016

課題番号：15K15939

研究課題名(和文) デファクトスタンダードを基盤とする高精度高信頼な連立一次方程式の数値計算法の開発

研究課題名(英文) Development of Accurate Numerical Method of Linear Systems Based on De Facto Standard Library

研究代表者

森倉 悠介 (MORIKUARA, Yusuke)

早稲田大学・理工学術院・助教

研究者番号：10732240

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 1,800,000円

研究成果の概要(和文)：本研究では、大規模連立一次方程式の精度保証付き数値計算法におけるスーパーコンピュータ上でのデファクトスタンダードな数値計算ソフトウェアを用いた実装とその評価、大規模連立一次方程式用のアルゴリズムの考察を行った。大規模問題に対して、高精度な行列積計算アルゴリズム、浮動小数点演算の無誤差変換を組み合わせることで精度保証が可能であることを京コンピュータ上で明らかにした。本研究で得られた計算アルゴリズムは事前誤差評価を用いて丸め誤差を計算している。プログラムの実装はデファクトスタンダードな数値計算ライブラリで行っているため、IEEE754の規格であれば様々なスーパーコンピュータでも実行が可能である。

研究成果の概要(英文)：In this research, we implemented and evaluated numerical verification methods for large-scale systems of linear equations using de-facto standard numerical software libraries on super computer. In addition, we concerned with numerical verification algorithms for large-scale systems of linear equations. We clarified that accuracy can be guaranteed for large-scale problems by combining accurate computations for matrix multiplication and error-free transformation of floating-point arithmetic on K computer. Our algorithms obtained in this research estimates rounding error using a priori error estimate of floating-point arithmetic. Implementation of our programs are done by using de-facto standard numerical software libraries. Therefore, the program can be executed by any supercomputer based on the IEEE 754 standard.

研究分野：数値解析，ハイパフォーマンスコンピューティング

キーワード：精度保証 高精度計算 連立一次方程式 ハイパフォーマンス・コンピューティング

1. 研究開始当初の背景

数値計算において、丸め誤差や打ち切り誤差等を厳密に評価し、数学的に正しい結果を与える手法を精度保証付き数値計算法と呼ぶ。特に連立一次方程式において、解の存在を示し、真の解と近似解との定量的誤差評価を行う手法は、精度保証付き数値計算の基礎として幅広く利用されてきた。しかし、これまでの精度保証付き数値計算法の多くは、その特性上丸め誤差の把握が必要であったため演算ユニットにおける制限等、デファクトスタンダードなソフトウェアとの相性に問題があった。加えて、これまでの高精度な数値計算法は有理数計算など独自のアルゴリズムを用いているため、高速性が強く意識されたソフトウェアを利用することなどができなかった。

近年の科学技術計算は大規模化の一途をたどっている。また、それらの計算を行う数値計算環境も飛躍的な進化を遂げたことにより、計算技術は非常に様々な要素が複雑に絡み合っている。連立一次方程式は、科学技術計算の基本的な演算の一つであるため、様々な計算方法が提案されてきている。特にハイパフォーマンスコンピューティングの分野においては、いかに早く計算するか議論がよくなされている。その議論を反映したデファクトスタンダードである高速な基本線形ライブラリ BLAS (Basic Linear Algebra Subprograms), LAPACK (Linear Algebra PACKage) が科学技術計算を用いた多くの研究分野で用いられている。また、近年、計算機の大型化(国内:京コンピュータ, 中国:天河2号, アメリカ:タイタンなど)により取り扱える問題のサイズ(行列のサイズ)が大規模化しているため、百万次元の固有値問題が解かれる等、これまで不可能であった数十万・数百万次元という大規模問題の数値計算が盛んに行われはじめている。

研究提案者は、科学技術計算における行列・連立一次方程式の精度保証付き数値計算の研究に従事してきた。その中でも、スーパーコンピュータや GPU (Graphics Processing Unit) などの演算ユニットに制約のある状況においても、デファクトスタンダードであるソフトウェア (BLAS, LAPACK) を基盤とし、常に正確な値を計算できる計算法を考案し、不安定な問題を扱う場合において、計算結果に一定の信頼性を与えるアルゴリズムの開発を行いハイパフォーマンスコンピューティングの分野からも注目を集めている。他方、ハイパフォーマンスコンピューティングの分野においては、高速な計算法に関する研究・議論が盛んに行われているが、計算結果の正確さに関する議論が不十分なことが多い。また、丸め誤差の影響により、問題が大規模化することによって計算結果の精度が悪化することが知られている。大規模問題が盛んに取り扱われるようになって

きているが、得られた結果に対する精度の保証・検証はほとんどなされていなかった。

2. 研究の目的

本研究の目的は、工学分野で頻繁に現れる連立一次方程式において、デファクトスタンダードであるソフトウェア (BLAS や LAPACK など) を直接利用することを強く念頭に置きつつ、高精度かつ高信頼という特徴を持つ、数十万次元以上の大規模数値計算アルゴリズムを構築することである。

本研究が達成されると、従来の計算環境のまま高品質な計算結果が得られるだけでなく、誤差の配慮という最も煩雑な部分からアルゴリズムの設計者を解放することが期待でき、工学の様々な分野で革新的な変革が起きると予想される。また多くのユーザーが高性能なアルゴリズムを容易に導入できるよう、デファクトスタンダードであるソフトウェアを基礎としているため、今後の高精度ソフトウェア開発の核となることが期待される。本研究で開発される手法は、倍精度数における高精度・高信頼な近似解とその誤差を出力する機能を持つ。数値計算ライブラリ LAPACK の基礎となる信頼性の高い結果に対しての保証付き関数が開発され、ユーザーは得られた結果の信頼性に関する情報を各研究に役立たせることができる。本研究によって得られた関数は計算環境に依存しないポータブルなものなので、特殊なスーパーコンピュータ (例えば、ポスト京コンピュータ、京コンピュータや FX100, TSUBAME など) への応用も容易である。また、本研究において、達成された成果をもとにすることで、高精度な固有値解法など高精度な線形代数アルゴリズムの構築が考えられる。加えて、本研究では、倍精度数のみを仮定した数値計算を行っているが、超大規模問題においては倍精度数の精度では不十分なことも考えられる。そのため、多倍長計算が必要になる。しかし、従来の有理数計算を用いた多倍長計算は計算速度を犠牲にしているため、速度の面において実用的ではない。しかし、本研究における手法を組み合わせることで、倍精度の高速な演算のみを用い、疑似的な多倍長計算が可能である。これは、有理数演算を用いた多倍長計算と比較すると非常に高速であるため、これからの大規模計算に要求される手法の一つと考えられる。このように、本研究は大規模線形問題における数値計算の重要な課題の基盤研究である。

3. 研究の方法

スーパーコンピュータを用い、大規模連立一次方程式において厳密に正しさが保証された近似解を得るためには、以下の問題があげられる：

問題点 1: 制約のある環境における実装

問題点 2: 大規模化による精度の悪化
問題点 3: 解の検証における速度の低減

問題点 1: 制約のある環境における実装 真の解と近似解の定量的な誤差評価を行い正しい近似解を得るためには、数値計算によって生じる誤差(丸め誤差)を評価する必要がある。この丸め誤差を評価するために最も用いられる手法は、演算ユニットの丸めモードを変更する手法である。しかし、スーパーコンピュータのような特殊な計算機においては、丸めモードの変更が大変困難である。そのため、本研究では、本研究提案者の開発した手法をベースに誤差評価を行う。本研究提案者の開発した手法は予め数値計算によって生じる誤差を解析し見積もることで、デファクトスタンダードな数値計算ソフトウェアをそのまま利用し丸め誤差を評価することができる。

問題点 2: 大規模化による精度の悪化 問題が大規模化することによって、数値計算結果の精度が悪化することが広く知られている。大規模問題において得られた近似解の精度の悪化が考えられる。そのため、まずは近似解の改善が必要となる。改善を行うために、
・近似解を改善するアルゴリズム(残差反復)
・残差を高精度に計算、その誤差評価を行うを行う。残差反復と呼ばれる近似解を改善するアルゴリズムが知られている。このアルゴリズムにおける残差の計算を高精度に行うことで近似解が大きく改善する。高精度な計算パートにおいては、和と乗算の無誤差変換と呼ばれるアルゴリズムを用いる。無誤差変換を用いて計算された結果は、数値計算においても情報をロスすることがない。無誤差変換アルゴリズムを用いて倍精度数を必要精度において組み合わせることで計算結果における精度の向上を達成する。また、数十万次元の問題に対しては、倍精度数を超えて倍々精度出力を用いて近似解の高精度化を達成する。

問題点 3: 解の検証による速度の低減 これまで、研究提案者は解の検証に関する研究を行ってきた。解の検証には、行列積の計算が必要である。これまでの手法は、行列単位で計算を分ける特殊な無誤差変換アルゴリズムにより高精度な計算を行っている。このアルゴリズムは行列積を誤差なく計算することができるような形に行列を分けるように設計されている。そのため、最適化された高速な数値計算ライブラリの恩恵を受け世界最高速の環境での構築を達成している。

また、問題が大規模化することによって、問題が不安定になり解の存在における検証が難しくなることがわかっている。そのため、上記の手法を含め問題の条件に応じた数種の手法が開発されたが、検証できる問題範囲と計算時間においてトレードオフが生じている。本方針では、数十万円における問題に対処するため、上述した検証法より検証範囲

の広い手法を提案に加え、問題の条件に応じて最適な評価へ分岐を行うアルゴリズムを構築し従来手法と比較した高速化を達成する。

共同研究その他に関して、これまで精度保証付き数値計算を発展させてきた早稲田大学 大石教授、高精度な行列積計算を専門とする芝浦工業大学 尾崎准教授と共同研究を行い、適宜打ち合わせを重ねることで研究計画の修正を行い、研究をより有意義なものとする。また、ハイパフォーマンスコンピューティング分野における専門家である北海道大学 深谷助教、理化学研究所 椋木特別研究員との共同研究を行い、幅広い知見から本研究を行う。

また、外部への研究発表活動を行い数値計算・ハイパフォーマンスコンピューティングの分野問わず意見・助言を求め、より研究を完成されたものとする。

4. 研究成果

本研究では、大規模連立一次方程式の精度保証付き数値計算法におけるスーパーコンピュータ上でのデファクトスタンダードな数値計算ソフトウェアを用いた実装とその評価、大規模連立一次方程式用のアルゴリズムの考察を行った。大規模問題に対して、高精度な行列積計算アルゴリズム、浮動小数点演算の無誤差変換を組み合わせることで精度保証が可能であることを京コンピュータ上で明らかにした。また、本研究で得られた計算アルゴリズムは事前誤差評価を用いて丸め誤差を計算している。プログラムの実装はデファクトスタンダードな数値計算ライブラリで行っているため、IEEE754 の規格であればどのようなスーパーコンピュータでも実行が可能である。

以下、各年度の成果について述べる。

【2015年度】

本研究は高信頼・高精度な大規模連立一次方程式の精度保証付き数値計算法におけるスーパーコンピュータ上での強スケーリング性の調査・評価とその応用を行う。連立一次方程式の精度保証付き数値計算法を行うにあたって、近似解の計算に加えて、近似逆行列の計算、行列積の計算が必要になる。現在もっとも一般的な問題を解く高速な手法においても近似計算の2倍の計算量を必要とする。また、高速な手法は適応範囲が狭いため、大規模な問題に対して有向でない。そのため、適応範囲も広く比較的高速な手法を用いる。その手法は6倍の計算時間が必要となる。通常の共有メモリマシンでは、計算量に依存した計算時間がかかる。しかし、スーパーコンピュータ環境では並列数に依存し精度保証パートの計算時間と、近似計算の時間の割合(精度保証/近似計算)が小さくなる。そのため、スーパーコンピュータにおける性能評価を行うことで、スーパーコンピュータに向

けての、新しい連立一次方程式、数値線形代数計算における精度保証付き数値計算法の開発を行う。現状、京コンピュータにて4096ノードを利用した計算では、6倍の計算量を必要とする計算の計算時間が2倍程度の計算時間で実行できることを明らかにした。

【2016年度】

2016年度では大規模連立一次方程式の精度保証付き数値計算法におけるスーパーコンピュータ上でのデファクトスタンダードな数値計算ソフトウェアを用いた実装とその評価、大規模連立一次方程式用のアルゴリズムの考察、NVIDIA GPU (Graphics Processing Unit) における高速な行列積の包含アルゴリズムの開発と実装を行った。

[大規模連立一次方程式における実装の評価] 2015年度より実装を行っている事前誤差評価を用いたロバストなプログラムにより、一般的な条件の良い大規模連立一次方程式においては64万次元程度まで、基本的な精度保証法で精度保証することが可能であることを検証した。それ以上の大規模なサイズの問題では高精度な行列積計算に利用することで精度保証可能なことを示した。また、本アルゴリズムは計算の初期段階で問題の難しさを判定することで、問題の難しさに合わせて計算方法が分岐するようになっており、計算の無駄が少ない。

[単精度近似逆行列を用いた前処理を用いた高速アルゴリズムの考察] 問題が大規模化することにより丸め誤差の影響が大きくなることが知られている。そのため、大規模な問題においては精度保証を行うことが困難である。提案アルゴリズムでは、倍精度演算と比較して高速な単精度演算を用いて近似逆行列を求め、求めた単精度近似逆行列を用いて前処理を行うことで高速に精度保証が可能な範囲の改善が可能なことを示した。今後は大規模環境において実装を行う。

[NVIDIA GPU における高速な行列積の包含アルゴリズムの開発] 現在のスーパーコンピュータの開発においてはアクセラレーターとして、GPU などの超並列計算が可能なデバイスが盛んに用いられている。そのため、本研究では、線形問題における精度保証付き数値計算の基礎となる行列積の包含を高速に行う手法を開発した。本手法では、データの利用率をあげることにより行列積の高速な包含を達成している。

また今後、本研究で達成されたアルゴリズムの公開を進めていく。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

〔雑誌論文〕(計1件)

【査読有り】

- ① Siegfried M. Rump, Takeshi Ogita, Yusuke Morikura and Shin'ichi Oishi, Interval arithmetic with fixed rounding mode, Nonlinear Theory and its Applications, IEICE, 7(3):362-373, 2016. doi 10.1587/nolta.7.362.

[学会発表](計11件)

国際会議発表【査読有り】

- ① Yusuke Morikura, Yusuke Nozawa, Kouta Sekine, Masahide Kashiwagi and Shin'ichi Oishi, Fast enclosure for matrix multiplication on a GPU, The 17th International Symposium on Scientific Computing, Computer Arithmetic and Verified Numerical Computations (SCAN2016), August 2016.

国際会議発表【査読無し】

- ② Yusuke Morikura, Katsuhisa Ozaki and Shin'ichi Oishi, "Verification method for large-scale linear systems without directed rounding", Crest Workshop, Hotel:powell, Ito-city, Japan, October 2015.
- ③ Yusuke Morikura, Katsuhisa Ozaki and Shin'ichi Oishi, "Verification method for large-scale linear systems", Seto-Inland-Sea-Rim Workshop on Mathematical Sciences, Hotel:read azzurro, Hachijo-Island, Japan, September 2015.
- ④ Yusuke Morikura, "GPU computation in verified computation", Joint Seminar on Numerical Analysis at Niigata University, Niigata University, Niigata, Japan, September 2015.

招待講演

- ⑤ 森倉 悠介, 事前誤差評価を用いた線形計算の精度保証 誤差解析から大規模計算まで, 三部会連携「応用数理セミナー」, 東京大学本郷キャンパス, 2015年12月.

国内会議発表【査読無し】

- ⑥ 森倉 悠介, 大石 進一, 行列の正則性の判定における単精度近似逆行列を用いた前処理の評価, 第5回 大規模並列数値計算技術に関する研究集会- 多倍長計算と精度保証 -, 理化学研究所計算科学研究機構, 2017年3月27日.
- ⑦ 森倉 悠介, 椋木 大地, 深谷 猛, 山中 脩也, 大石 進一, 大規模並列計算機における連立1次方程式の精度保証付き

数値計算に対する性能評価, 第 157 回
ハイパフォーマンスコンピューティン
グ研究発表会, 沖縄県, 2016 年 12 月 21
日.

- ⑧ 森倉 悠介, 野澤 優介, 関根 晃大, 柏
木 雅英, 大石 進一, CUDA の丸めモー
ド指定演算を用いた行列積の高速な包
含方法, 2016 年度日本応用数理学会 年
会, 2016 年 9 月.
- ⑨ 南畑 淳史, 森倉 悠介, 荻田 武史, 大
石 進一, "LU 分解の事前誤差評価を用
いた連立一次方程式の精度保証付き数
値計算法における H 行列の性質を用い
た正則性の検証法と誤差評価式の提案",
金沢大学, 2015 年 9 月.

ポスター発表【査読有り】

- ⑩ Yusuke Morikura, Daichi Mukunoki,
Takeshi Fukaya, Naoya Yamanaka and
Shin'ichi Oishi, "Performance
Evaluation of Verified Computation
for Linear Systems on Parallel
Computers", ACSI2016 (Annual
Meeting on Advanced Computing System
and Infrastructure 2016), Centennial
Hall, Kyushu University School of
Medicine, January 2016.

ポスター発表【査読無し】

- ⑪ 森倉 悠介, 尾崎 克久, 大石 進一, "
Verification method for large-scale
linear systems", JST/CREST-さきがけ
数学シンポジウム 2015『22 世紀社会創
造のための数学』"Mathematics for the
22nd Century", ステーションコンファ
レンス東京, 2015 年 9 月.

〔図書〕(計 1 件)

- ① 下司雅章 編/片桐孝洋, 中田真秀, 渡
辺宙志, 山本有作, 吉井範行, Jaewoon
Jung, 杉田有治, 石村和也, 大石進一,
関根晃太, 森倉悠介, 黒田久泰 著, 大
阪大学出版, 計算科学のための HPC 技術
1, 2017, 300

〔産業財産権〕

○出願状況 (計 0 件)

○取得状況 (計 0 件)

〔その他〕

ホームページ等

該当なし

6. 研究組織

(1) 研究代表者

森倉 悠介 (MORIKURA, Yusuke)

早稲田大学・理工学術院・助教

研究者番号 : 10732249

(2) 研究分担者

該当なし

(3) 連携研究者

該当なし

(4) 研究協力者

大石 進一 (OISHI, Shin'ichi)

Siegfried M. Rump

荻田 武史 (OGITA, Takeshi)

尾崎 克久 (OZAKI, Katsuhisa)

深谷 猛 (HUKAYA, Takeshi)

椋木 大地 (MUKUNOKI, Daichi)

山中 脩也 (YAMANAKA, Naoya)