

科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

平成25年 5月17日現在

機関番号：13401

研究種目：基盤研究（C）

研究期間：2011～2013

課題番号：22500044

研究課題名（和文） 反復型数値計算における収束過程の可視化による高速化支援

研究課題名（英文） Visual Analysis Tool for Acceleration of Convergence Process
in Iterative Numerical Computation

研究代表者

森 眞一郎 (MORI SHINICHIROU)

福井大学・大学院工学研究科・教授

研究者番号：20243058

研究成果の概要（和文）：

本研究では、大規模シミュレーションにおける反復型数値計算の高速化を支援することを目的として、反復型数値計算の収束過程における残差分布の時間変化をシミュレーションユーザに理解しやすい形で可視化し、多角的に解析する支援環境を構築した。解析支援環境の構築にあたっては、シミュレーションサーバと高精細可視化サーバの非同期協調型のシステムを実装し、実行中のプログラムに対する対話的な解析ならびに高速化のためのプログラム実行制御を可能とした。

研究成果の概要（英文）：

In order to accelerate the convergence process in iterative numerical computation, a visual analysis tool is developed in this research. This tool visualizes the time-varying distribution of residuals at each iterations in various fashions so that it improves the quality and ease of visual analysis by the simulation user. In this tool, a high resolution visualization server is attached to the simulation server for the asynchronous collaboration which realizes interactive analysis of ongoing simulation as well as on-the-fly acceleration of the simulation code execution.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2011年度	1,400,000	420,000	1,820,000
2012年度	1,100,000	330,000	1,430,000
2013年度	900,000	270,000	1,170,000
年度			
年度			
総計	3,400,000	1,020,000	4,420,000

研究分野：総合領域

科研費の分科・細目：情報学 ・ 計算機システム・ネットワーク

キーワード：ハイパフォーマンスコンピューティング、数値解析、可視化、分散処理
リアルタイム処理、ユーザインタフェース、計算科学、

1. 研究開始当初の背景

数値シミュレーションで多用されている反復型数値計算では、自分の解くべき問題が如何に少ない反復回数で目的の精度が得ら

れるかはユーザの最大の関心事である。しかしながら、反復型数値計算で用いる前処理手法ならびに反復計算手法（ソルバー）にどのような手法を用いればよいかの判断は、数値

解析の専門家を除いた一般ユーザには容易ではない。前処理手法とソルバーの組合せによる効果を評価するツール (Tis や Grid-TLSE Project 等)などが提案されていたが、実際に問題を解いた結果の評価を行うものであり、解くべき問題が与えられて解を得るまでの時間が限られている状況や、医用データ等の守秘義務で問題を外部に出せない場合などの状況では利用することができない。一方で、ユーザは解くべき問題の物理的な意義や性質を把握しているにも関わらず、数値解析の専門家でないために数値計算過程で起こっている現象を把握する手段が限られている、あるいは、そもそもこのような現象に注目する機会がなかった。

研究代表者らも、ある反復計算問題の高速化の検討に際して上述の Tis 等を利用して前処理手法、反復ソルバーの選択を行ったが、さらなる高速化手法を検討するために反復型数値計算における残差分布の時間変化に注目し残差の空間分布を時系列可視化するツールを開発した。その結果、従来の収束過程の評価に用いられてきた単純な残差ノルムの時系列解析では知り得ることのできなかった現象を発見し、アルゴリズムの改良に成功した。

本研究では、このような「収束過程の可視化によるアルゴリズム設計支援手法」をより一般的な問題に対して適用しその有効性を検証するとともに、より効果的な多次元可視化手法や反復ソルバーへのフィードバック法の検討を行うことを目的とする。

2. 研究の目的

本研究は、大規模シミュレーションにおける反復型数値計算の高速化を支援することを目的として、1)実行中のプログラムで現在起こっている現象 (特に収束過程に関する事象) をその場で「多角的に可視化」し、2)それにより高速化のためのアイデアを (数値解析の専門家ではない) ユーザが発見 (データマイニング) する機会をあたえ、3)その結果を実行中のプログラムにフィードバックするという「対話的な高速化手段」を提供するためのシミュレーションフレームワークを研究・開発するものである。

より具体的には、「収束過程の可視化によるアルゴリズム設計支援手法」をより一般的な問題に対して適用し、その有効性を検証するとともに、より効果的な多次元可視化手法や反復ソルバーへのフィードバック法の検討を行うことを目的とする。

3. 研究の方法

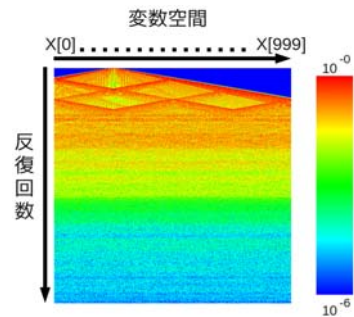
研究の第一ステップでは反復型数値計算過程の多次元可視化の有効性、一般性を検証することを目的として、大規模数値計算問題

に対応するための機能拡張、ならびに、多くの問題に対して提案手法の適用可能性の評価を行う。次のステップでは、反復型数値計算過程の多次元可視化結果に基づく解析を支援する応用システムの開発を行う。さらに、解析結果を実行中のシミュレーションに反映させシミュレーションの高速化を行うためのフレームワークを設計しプロトタイプシステムの構築を行う。以下は、具体的な個々の研究項目に対する研究方法である。

(1) 残差分布可視化システムの大規模数値計算問題への拡張

研究開始時点で試作中であった 5000 次元程度の問題までを対象とした可視化フレームワークは、縦軸に反復回数、横軸に変数空間をリニアスケールでとり、必要に応じて拡大・縮小表示ならびに縦/横スライド表示を行う簡易なものであり、数万次元を超える問題を対象とした場合、重要な現象を見落とす可能性があった。そこで、

ユーザからの指定あるいは観測現象の特異点情報等に基づく変数空間の非線形表現を導入し視認性の向上を図る。



(2) 残差拡散制御による高速化手法の適用可能性の評価と数学モデルの構築

研究開始時点で、ある反復型数値計算問題の初期値として真の解に極めて近い近似解を与えて残差分布の時間変化を観測したところ、問題の物理的性質を考えると本来不必要な残差拡散現象が発生することを発見し、その残差拡散を抑制する最適化処理を行ったところ収束までの反復回数を大幅に短縮することができていた。同様の物理現象に対して解像度 (次元数) を上げて評価した場合でも同様の効果がえられていた。

そこで、より多くの問題に対して残差拡散制御の効果を検証するとともに、不必要な残差拡散を抑制する制御法の改善を行う。

(3) 解くべき問題の物理現象と対応付けた多次元可視化による現象解析支援

ある問題を数値シミュレーションにより解く場合において、一旦シミュレーションモデルが構築されると、シミュレーション自体は元の問題が何かとは無関係に実行することが可能である。しかしながら、収束過程の多次元可視化による現象解析を支援するという観点では、本来解くべき問題と関連付け

て情報提供を行えば、ユーザ（解析者）により多くの現象を発見する契機を与えることが期待できる。

そこで、解くべき問題の物理現象を表現する3次元CGモデルに、残差分布等を対応付け3次元空間上での空間的広がりを俯瞰するための解析支援システムを構築し、時系列での多次元可視化と連動した時空間併用型の現象解析支援を可能とする。

(4)反復計算過程の多次元可視化によるデータマイニング

前処理法と反復ソルバの組合せと残差ノルムの収束過程との関連を調べる研究は今までにも多く実施されているが、多次元可視化により収束過程で発生している現象に新たな知見を与えることが出来ないかを調査、検討する。特に、収束過程で振動が発生し収束速度が遅くなる性質をもった応用問題に対して、多次元可視化結果において振動現象がどのように観測されるか、また、可視化結果から収束過程での振動の発生を検出できるかの検討を行う。

(5)タイルドディスプレイを用いた複合可視化システムの構築

多次元可視化による現象解析支援システムから得られた多量のデータを俯瞰的に解析するには超高精細な大規模ディスプレイが必要不可欠である。しかしながら一台のモニターでこの要求を満たすのは現実的に不可能である。そこで、比較的安価な高精度モニターを組合せ仮想的な大規模ディスプレイを構築する。この際、ネットワークを通して供給される入力ストリームに対して十分な通信帯域を確保するため、並列入力型のタイルドディスプレイシステムを構築し、時空間解析が可能な複合可視化システムを構築する。

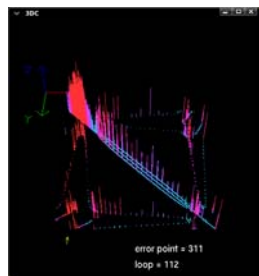
(6)大規模並列計算機上の反復計算ソルバとの連携

大規模並列計算機を用いた数値シミュレーションにおいて、実行中の数値計算課程を実時間モニタリングし、シミュレーションの目的に応じた「実用的な収束」の判定とシミュレーションの実行制御の手段をユーザに提供するための対話型ユーザインタフェースを開発し、その効果を検証する。

4. 研究成果

(1)残差分布可視化システムの大規模数値計算問題への拡張

従来から開発を行っている可視化フレームワークを拡張し、数万次元を超える大規模問題に対しても、収束過程での残差分布を可視化可能な機能拡張を行った。こ



の際、従来の2次元的情報提示だけでは重要な現象を見落とす可能性がある。そこで、解くべき問題を表現する行列データに対応するシェーディング上に変数毎の残差をマッピングするとともに、分布状況を3次元的に可視化するフレームワークを構築した。さらに、反復計算の進行とともに急激に減少する残差に対して、その分布状況の時系列を視覚的に追従可能とするための動的スケールリングの機能を追加した。これにより、200万円を超える大規模問題にたいしても収束過程の時系列可視化を可能とした。

(2)残差拡散制御による高速化手法の適用可能性の評価と数学モデルの構築

Matrix MarketやFlorida Matrix等の公開データを用いて、残差拡散制御の適用可能性を評価し複数のデータに対して有効性を確認した。この際、同一の行列データに対しても、初期値の与え方によって収束パターンが異なる様子が上述の可視化フレームワークを用いることで視覚的に確認可能となった。また、係数行列や右辺ベクトルの個々の要素の大きさを考慮した相対的な残差マッピングを行うことで、収束速度が低下した状態での個々の残差の重要度を再評価する枠組みを構築し、更なる高速化支援に結び付ける可能性があることを発見した。

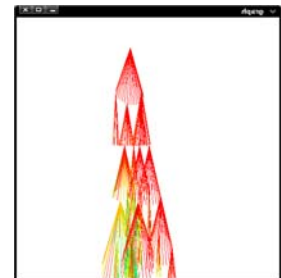
(3)解くべき問題の物理現象と対応付けた多次元可視化による現象解析支援

解くべき問題の物理現象を表現する3次元CGモデルが与えられた場合、残差分布等を対応付け3次元空間上での空間的広がりを俯瞰するための解析支援システムを構築するとともに、従来用いられてきた残差ノルムの時系列可視化と同時に解析可能とすることで、時空間併用型の現象解析支援を可能とした。時空間併用型の解析支援については、解くべき問題の構造情報が与えられない場合にも、係数の絶対値を考慮したシェーディングへの残差マッピングとの併用を可能とした。



(4)反復計算過程の多次元可視化によるデータマイニング

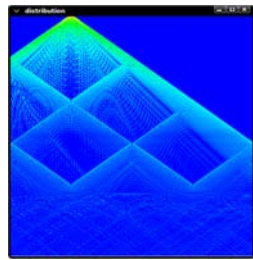
収束過程での残差拡散の様子を多角的に解析する手法の一つとして、係数行列をグラフ表現と見なして係数行列の非ゼロ要素をグラフのエッジと考えた時に、ある特定の変数に



注目した時の残差分布を表現する方法としてコーンツリーを用いた残差分布の可視化を行うモジュールを開発した。

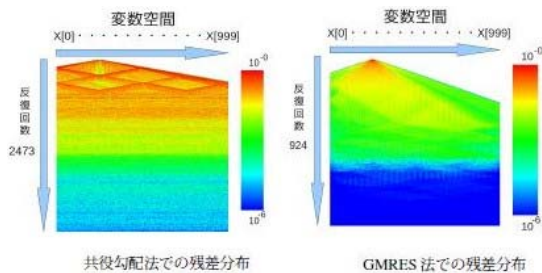
また、注目領域とそれ以外の領域で収束条件を変えることで、系全体での残差ノルムの値自体は等しくても、注目領域内での残差を低く抑えけるとともに実行時間も短縮できることが確認できた。この性質を利用して対話的に注目領域を指定する方法の検討を行った。

このような多次元可視化ツールを用いることで収束速度が変化する状況が目視で観測可能となった。一方で、これまでの研究において高速化の成功例を示した残差拡散制御は必ずしも全ての条件において普遍的な有効性を示す訳ではないことも目視で観測できるようになった。そこで、残差拡散制御が逆に収束の障害となる例を見つけ収束過程でどの



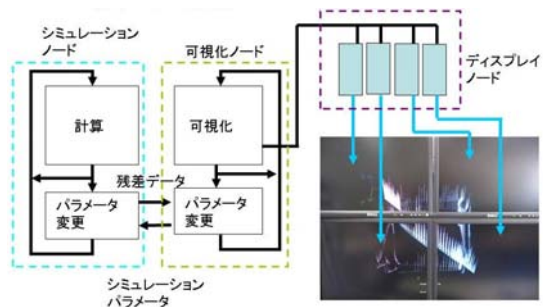
ような現象が発生しているかを多次元可視化により解析した。その結果、不適切な境界条件や初期条件の設定を行うと残差の震動現象が発生し収束の妨げとなる状況を視覚的に発見することができた。

また、共役勾配法においては収束過程において残差分布の時系列に特異な周期構造が現れる事例を発見した。さらに、同一の問題にたいして共役勾配法と GMRES 法では収束までの反復における残差分布の時系列特性が全く異なることを視覚的に示すことができた。本研究課題の当初目標にはないが発展的な研究課題として、これらの視覚的解析結果に基づく高速化アルゴリズムの検討にも着手したが、新しいアルゴリズムの提案に至る十分な結論は得られなかった。



(5) タイルドディスプレイを用いた複合可視化システムの構築

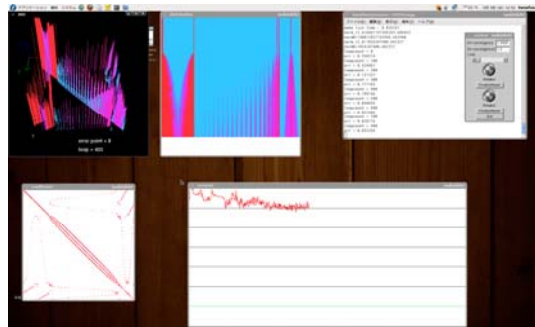
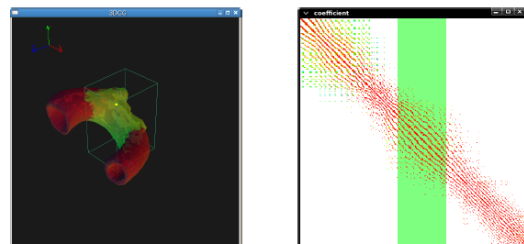
多次元可視化による現象解析支援システムから得られた多量のデータを俯瞰的に解析するには超高精細な大規模ディスプレイが必要不可欠である。そこで、研究初年度にタイルドディスプレイの利用環境を構築し、次年度には反復計算過程の多次元可視化



システムとの連携を行い収束過程の残差マッピング結果を高精細タイルドディスプレイに表示するシステムを構築した。また、計算過程の対話的な実時間解析を可能とするため、シミュレーション実行モジュールと解析支援モジュールを分離し、非同期インタラクションを可能とした。

(6) 大規模並列計算機上の反復計算ソルバとの連携およびフィードバック手法の検討

大規模並列計算機を用いた数値シミュレーションにおいて、実行中の数値計算課程を実時間モニタリングし、シミュレーションの目的に応じた「実用的な収束」の判定とシミュレーションの実行制御の手段をユーザに提供するための対話型ユーザインタフェースを開発した。GUIを用いて問題の物理空間上の注目領域を対話的に指定可能とすることで、シミュレーション空間の境界周辺等実用上重要ではない空間に対して収束判定条件を緩和し、注目領域に対して「実用的な収束」を加速できる可能性を示した。また、GMRES法におけるリスタートタイミングの影響を反復回数だけではなく実行時間を考慮した可視化により解析可能とすることで、動的なリスタートタイミング制御の可能性を示した。



5. 主な発表論文等

[雑誌論文] (計 10 件)

- ① 花房秀光, 小寺晋, 木内俊介, 山崎勇輔, 福間慎治, 森眞一郎: 大規模反復型数値計算過程の視覚的解析支援ツールの開発, 情処研報, Vol. 2013-HPC-138, No. 1, pp. 1-9, Feb. 2013. [査読無]
- ② 松井祐太, 福間慎治, 森眞一郎: 実時間シミュレーションへの応用を前提とした SMW 公式を用いた逆行列計算のハイブリッド並列処理の評価, 情処研報, Vol. 2013-HPC-138, No. 9, pp. 1-6, Feb. 2013. [査読無]
- ③ 岩永 翔太郎, 永井 翔, 福間 慎治, 森眞一郎: SMW 公式を用いた逆行列計算の並列化と実時間時系列シミュレーションへの応用, 電子情報通信学会論文誌 D, Vol. J996-D, No. 3, pp. 484-494(2013). [査読有]
- ④ 松井 祐太, 福間 慎治, 森眞一郎: 実時間シミュレーションへの応用を前提とした SMW 公式を用いた逆行列計算のハイブリッド並列処理の予備評価, ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム, p. 75, Jan. 2013 [査読有]
- ⑤ Iwanaga, S., Fukuma, S., Mori, S.: Hybrid Parallel Implementation of Inverse Matrix Computation by SMW Formula for Interactive Simulation, IEICE Trans. Inf. & Syst. Vol. E95-D, No. 12, pp. 2952-2953, 2012. [査読有]
- ⑥ Henmi, R., Nishimura, Y., Suzuki, H., Fukuma, S., Mori, S., Yamaguchi, A., Tomita, S., Int'l Conf. on Software Engineering, Artificial Intelligence, Networking and Parallel/Distributed Computing, pp. 721-725, 2012. [査読有]
- ⑦ 橋本 健介, 手塚 俊作, 森眞一郎, 富田 眞治: シミュレーションキャッシングと遠隔インタラクティブ流体シミュレーションへの応用, 情報処理学会論文誌: コンピューティングシステム (ACS39), Vol. 5, No. 4, pp. 76-86, 2012. [査読有]
- ⑧ 坂井 陽平, 浅野 琢也, 福間 慎治, 森眞一郎: 高精細タイルドディスプレイを用いた並列ボリュームレンダリングシステムの実装, 情報処理学会論文誌: コンピューティングシステム (ACS38), Vol. 5, No. 3, pp. 124-136, 2012. [査読有]
- ⑨ 花房秀光, 小寺晋, 木内俊介, 山崎勇輔, 福間慎治, 森眞一郎: 大規模反復型数値計算の高速化支援のための可視化ツールの開発, 先進的計算基盤システムシンポジウム (SACSYS' 12),

pp. 79-80, 2012. [査読有]

- ⑩ 岩永翔太郎, 福間慎治, 森眞一郎: 実時間シミュレーションへの応用を前提とした SMW 公式を用いた逆行列計算のマルチコア並列処理, 電子情報通信学会論文誌 D, Vol. J94-D, No. 7, pp. 1165-1168, 2011. [査読有]

[学会発表] (計 5 件)

- ① 森眞一郎: 「ユビキタスなインタラクティブ・スーパーコンピューティング環境の構築に向けて」, 電気関係学会北陸支部連合大会 招待講演, 2012/9/1(射水市).
- ② 森眞一郎: 視覚協創学(3): 対話型の実時間遠隔シミュレーションによる視考支援, 計算工学講演会論文集, Vol. 17, B-6-3, 2012/5/30(京都市).
- ③ 花房秀光, 福間慎治, 森眞一郎: 大規模反復型数値計算の高速化支援のための可視化手法の検討 電気関係学会北陸支部連合大会講演論文集, F-2, 2011/9/18(福井市).
- ④ 花房秀光, 小寺晋, 木内俊介, 山崎勇輔, 福間慎治, 森眞一郎: 大規模反復型数値計算の高速化支援のための可視化ツールの開発, 第 10 回 情報科学技術フォーラム, Vol. 1, No. C-007, pp. 397-400, 2011/9/8(函館市).
- ⑤ 岩永翔太郎, 福間慎治, 森眞一郎: インタラクティブシミュレーションへの応用を前提とした マルチコアプロセッサ上での SMW 公式を用いた高速逆行列計算: 第 9 回情報科学技術フォーラム, Vol. 1, pp. 75-79, 2010/9/7(福岡市)

[その他]

ホームページ等

<http://sylph.fuis.u-fukui.ac.jp/~moris/>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

森 眞一郎 (MORI SHINICHIROU)

福井大学・大学院工学研究科・教授

研究者番号: 20243058

(2) 研究分担者

なし

(3) 連携研究者

なし

(4) 研究協力者

坂井 陽平 (SAKAI YOUHEI)

福井大学・大学院工学研究科・

博士前期課程学生(H22)

花房 秀光 (HANAFUSA HIDEAKI)
福井大学・大学院工学研究科・
博士前期課程学生 (H23-H24)