

**科学研究費助成事業 研究成果報告書**

平成 29 年 6 月 26 日現在

機関番号：17102

研究種目：挑戦的萌芽研究

研究期間：2014～2016

課題番号：26540028

研究課題名(和文)反復型数値解法の宣言的記述による形式手法

研究課題名(英文)A formal method for iterative numerical algorithms using declarative descriptions

研究代表者

嶋吉 隆夫(Shimayoshi, Takao)

九州大学・情報基盤研究開発センター・准教授

研究者番号：60373510

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,800,000円

研究成果の概要(和文)：反復処理により問題を解く数値解法を対象にした形式言語を用いた数値解法の形式記述から、数値計算のソースコードを自動生成する枠組みを開発した。形式言語では、数値解法を手続きではなく数学的に漸化式として定義し、プログラミング言語に依存しない表現として数式を用いて宣言的に記述する。この宣言的記述で定義される数式とそこに含まれる数学変数の依存関係を解析することで、記述した数値解法の計算手続きが、半順序関係として抽象的な形式で得られる。この抽象的計算手続きから、具体的なプログラミング言語によるプログラムコードを出力可能である。

研究成果の概要(英文)：A framework to generate program source codes using formal languages for numerical algorithms which solve problems with iterative processing were introduced. In these formal language, an algorithm is not defined as a procedure but as a set of mathematical recurrence formulas, and declaratively described as mathematical equations independently of any programming languages. By analyzing relationships among mathematical equations in the description and mathematical variables referred in the equations, an abstract calculation procedure of the described algorithm can be obtained as a partial order relation. From the abstract procedure, program codes in concrete programming languages can be generated.

研究分野：ソフトウェア工学

キーワード：形式手法 数値計算 アルゴリズム 形式言語 ドメイン特化言語 自動プログラミング ソースコード生成

### 1. 研究開始当初の背景

数値解法アルゴリズムは一般的に手続き型言語による参照実装と共に公開される。実際の数値解析では、解析対象に応じて最適なアルゴリズムを選び出す必要がある。そのとき多くの場合、解析対象と言語環境・実行環境に応じて自らコードを実装する必要がある。しかし、手続き型言語による参照実装は、高度なアルゴリズムでは手続きが複雑であるため移植性に欠けるとともに、多くの場合、部分問題に対する解法の交換が困難であり保守性に欠けるという課題がある。

ソフトウェアの品質と生産性の向上を目的とした手法として、形式仕様記述からプログラムを自動生成する形式手法が注目されている。そこで、従来課題の解決のため、数値計算アルゴリズムのコード実装に対する形式手法の適用が着想される。我々が既に開発していた細胞モデル計算コード生成手法 [Punzalan, 嶋吉, 天野他. Source Code Biol. Med., 2012] は、数式の集合として宣言的に記述された細胞モデルに対して、形式記述された常微分方程式解法を適用したコードを自動生成するものである。ただし、対象とする解法は非常に限定しており、部分問題に対するモジュール化も考慮していなかった。幅広い数値解析を対象にソフトウェア品質と生産性を向上するためには、この手法の一般化・高度化を考える必要がある。

### 2. 研究の目的

本研究は、数値解法アルゴリズムのソースコードを自動生成する形式手法を開発することを目的とする。対象とする数値解法アルゴリズムは、内部で反復処理を行う数値解法（以下、反復型数値解法と呼ぶ）とする。具体的には、微分方程式の初期値問題・境界値問題、非線形連立方程式の求根、非線形最小化問題などの解法アルゴリズムである。ただし、連立線形方程式解法などの代数計算は対象としない。

### 3. 研究の方法

反復型数値解法アルゴリズムを宣言的に記述する形式言語を考案する。また、考案言語による形式記述から計算対象と実行環境に応じて最適化されたコードを自動生成する手法を開発する。

### 4. 研究成果

#### (1) 偏微分方程式有限差分法の記述形式

偏微分方程式の解法の一分類である有限差分法を対象に、数値計算スキームを宣言的に記述する形式を提案した。この記述形式では、微分の離散化における差分式への置き換えスキームを以下のように宣言的に定義する。

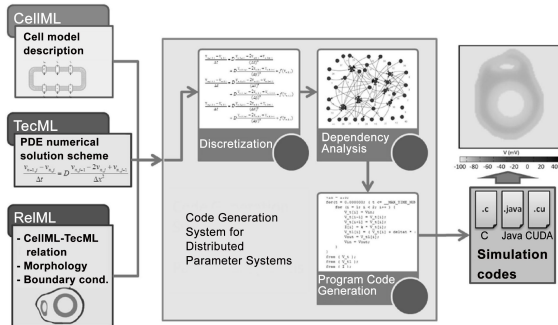
$$\frac{dv}{dt} \rightarrow \frac{v_{n+1,x} - v_{n,x}}{\delta_t}$$

$$\frac{d^2v}{dx^2} \rightarrow \frac{v_{n,x+1} - 2v_{n,x} + v_{n,x-1}}{\delta_x^2}$$

Crank-Nicolson 法などの陰的解法も含めて、離散化置換式の記述という形式で、有限差分法一般の離散化公式が記述可能である。また、偏微分方程式の数値計算に必要な境界条件式などの情報を記述する形式を提案した。

#### (2) 分布定数系モデルのコード生成システム

シミュレーション対象のモデル式 (CellML) に加えて、前述の偏微分方程式の有限差分法についての形式記述 (TecML)、境界条件式など (ReIML) を入力として与えることで、計算プログラムのソースコードを生成するシステムを開発した。



doi:10.1371/journal.pone.0136821.g001

プロトタイプとして作成していた、連立線形方程式を対象とするシミュレーションのソースコードを生成するシステムを拡張し、連立非線形方程式のシミュレーションも含めてソースコード生成が可能なシステムを開発した。

本システムでは、入力ファイルを漸化式に展開し、どの数式からどの変数を導出すべきかを決定して数式間の依存関係を解析することで、添字間の関係を解析してループ構造を抽出して、最終的にプログラムを生成する。本システムでは、大規模な形状モデルにも対応可能である。

本システムは出力として、C, Java, CUDA に加えて、MPI 並列プログラムを自動生成することが可能である。

#### (3) CUDA 最適化コードの生成

常微分方程式の初期値問題の求解の対象となる常微分方程式モデルでは、そのモデル式の計算順序は変数間の依存関係から半順序関係として得られ、計算順序に任意性を含む部分がある。このとき、半順序関係を満たす範囲では、どのような計算順序を用いても計算結果は変わらないが、局所参照性などの影響で計算性能は変化する。特に、GPU はメモリが階層化されておりアクセス速度が大きく異なることから、計算順序が計算性能に与える影響は大きい。

そこで、NVIDIA CUDA C ソースコードの生成処理を対象に、任意性がある数式の計算順序について、変数の局所参照性が高くなるような順序をヒューリスティックに決定する手

法を導入した。本手法により、概ね数%の実行時間短縮を達成した。

(4) 反復型数値解法の一般化した記述形式  
反復型数値解法一般を統一的に記述可能な形式言語を考案した。それまでに提案していた記述形式では、例えば常微分方程式の初期値問題解法といった分類において、その中で共通する形式を記述の前提としていたため、解法の分類ごとに記述形式を変更する必要があった。新しく考案した形式言語では、反復型数値解法を、空間の元を要素とする列を規定する漸化式として、直接的に記述する設計としたことで、任意の反復型数値解法を記述する能力を持つ。この記述形式では、単一の添字だけを用いる漸化式が記述できるが、これを1モジュールとして別のモジュールから使用できる形式とすることで、多重反復の数値解法が記述できる。

```
<iterative id="GlobalNewtonMethod.example">
  <input> f, x0 </input>
  <output> xi </output>
  <condition type="continuation">
    convtest(f(xi))
  </condition>
  <formula>
    xi+1 = update (f, xi, |f(xi)|,  $\frac{f(x_i)}{f'(x_i)}$ )
  </formula>
  <introduce href="#dumped.update">
    update
  </introduce>
  <introduce href="#nonzero.test">
    convtest
    εc
  </introduce>
  <parameter> εc </parameter>
</iterative>
<iterative id="dumped.update"> <!-- A -->
  <input> f, x0, fprev, p </input>
  <output> xj </output>
  <condition type="termination">
    |f(xj)| < fprev
  </condition>
  <formula>
    xj = x0 - γj p
    γj = γj-1 / 2
    γ0 = 1
  </formula>
</iterative>
<test id="nonzero.test"> <!-- B -->
  <input> x </input>
  <output> |x| > ε </output>
  <parameter> ε </parameter>
</test>
```

大域ニュートン法の記述例

(5) 陽的漸化式を対象とした数値計算コード生成  
前述の反復型数値解法一般を記述する形式

について、漸化式が陽的に定義されるものを対象としたコード生成システムを開発した。それには、非線形方程式の求根アルゴリズムや、常微分方程式の初期値問題の陽解法などが含まれる。宣言的に与えられた漸化式から、反復計算部分とその計算順序を解析し、さらに、初期処理の計算手続きを解析する。その解析結果から、C言語またはFortranのソースコードを生成する。

## 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7件)

Yuki Hasegawa, Takao Shimayoshi, Akira Amano, and Tetsuya Matsuda.

Application of the kalman filter for faster strong coupling of cardiovascular simulations.

IEEE Journal of Biomedical and Health Informatics, Vol. 20, No. 4, pp. 1100-1106, July 2016.

doi: 10.1109/JBHI.2015.2436212

嶋吉隆夫, 小川貴史, 松田哲也.

左心室拍動シミュレーションにおけるメッシュ分割の影響.

電子情報通信学会論文誌, Vol. J99-D, No. 5, pp. 571--578, May 2016.

doi: 10.14923/transinfj.2015JDP7077

Yukari Takeda, Takao Shimayoshi, George G. Holz, and Akinori Noma.

Modeling analysis of inositol 1,4,5-trisphosphate receptor-mediated Ca<sup>2+</sup> mobilization under the control of glucagon-like peptide-1 in mouse pancreatic  $\beta$ -cells.

American Journal of Physiology - Cell Physiology, Vol. 310, No. 5, pp. C337--C347, March 2016.

doi: 10.1152/ajpcell.00234.2015

天野晃, ラスティ プンザラン フロレンシオ, 嶋吉隆夫, 國枝義敏.

複雑な計算スキームを必要とする多階層生体機能モデルのシミュレーションシステム.

生体医工学, Vol. 53, No. 3, pp. 115--122, October 2015.

doi: 10.11239/jsmbe.53.115

Punzalan FR, Kunieda Y, Amano A.

Program Code Generator for Cardiac Electrophysiology Simulation with Automatic PDE Boundary Condition Handling.

PLoS ONE, Vol. 10, No. 9, p. e0136821, September 2015.

doi: 10.1371/journal.pone.0136821

Takao Shimayoshi, Chae Young Cha, and Akira Amano.

Quantitative decomposition of

dynamics of mathematical cell models:  
Method and application to ventricular  
myocyte models.  
PLOS ONE, Vol. 10, No. 6, p. e0124970,  
June 2015.  
doi: 10.1371/journal.pone.0124970  
長谷川雄基, 三島充晴, 嶋吉隆夫, 天  
野晃, 松田哲也.  
貫壁性不均一性が心エネルギー効率に  
与える影響に関する理論的解析.  
生体医工学, Vol. 52, No. 3, pp.  
129--135, June 2014.  
doi: 10.11239/jsmbe.52.129

研究者番号 : 60373510

(2)研究分担者

天野 晃 (AMANO, Akira)  
立命館大学・生命科学部・教授  
研究者番号 : 60252491

〔学会発表〕(計 12 件)

嶋吉隆夫, 天野晃.  
非線形方程式求根アルゴリズムの宣言  
的形式言語の設計.  
情報処理学会プログラミング研究会,  
A.R.Kビル(福岡県福岡市), 2016/1/13.  
Yohei Suzuki, Takeru Arita, Shigeru  
Komiya, Florencio Rusty Punzalan,  
Takao Shimayoshi, Yoshitoshi Kunieda,  
and Akira Amano.  
Cellcompiler: Multiscale biological  
function model simulator which can  
use complex calculation schemes.  
第 92 回日本生理学会大会, 神戸国際会  
議場(兵庫県神戸市), 2015/3/21.  
小見山繁, 多々良泰基, Florencio  
Rusty Punzalan, 嶋吉隆夫, 國枝義敏,  
天野晃. 複雑な数値計算スキームに対  
応する漸化式からの計算プログラム多  
重ループ構造抽出アルゴリズム. 電子  
情報通信学会 MBE 研究会, 玉川大学(東  
京都町田市), 2015/3/17.

〔産業財産権〕

出願状況(計 1 件)

名称 : 計算コード生成装置、方法及びプログラ  
ム  
発明者 : 嶋吉 隆夫, 天野 晃  
権利者 : 京都大学  
種類 : 特許  
番号 : 特願 2 0 1 5 - 2 4 7 6 9 3  
出願年月日 : 2015 年 12 月 18 日  
国内外の別 : 国内

〔その他〕

ホームページ等  
CellCompiler <http://www.cellcompiler.org>  
TecML <http://www.tecml.org>

6. 研究組織

(1)研究代表者

嶋吉 隆夫 (SHIMAYOSHI, Takao)  
九州大学・情報基盤研究開発センター・准  
教授