

令和 2 年 6 月 7 日現在

機関番号：14301

研究種目：挑戦的研究（萌芽）

研究期間：2018～2019

課題番号：18K18719

研究課題名（和文）演算順の非決定性に対する信頼性解析のための並列計算状態の数理モデルの構築

研究課題名（英文）Mathematical Reliability of Parallel Computations with Indefinite-order Operations

研究代表者

藤原 宏志 (Fujiwara, Hiroshi)

京都大学・情報学研究科・准教授

研究者番号：00362583

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 4,700,000円

研究成果の概要（和文）：大規模連立一次方程式の反復数値解法を例に、その並列計算の信頼性を論じた。数値解法の中には、逐次計算を念頭においたアルゴリズムも多く、逐次計算で収束する場合も並列制御なく並列計算をおこなうと結果が正しいとは限らない。このような問題点に対し、Gauss-Seidel法の場合に、理論的な視点から(1)並列数値計算の実行過程の数理モデル化、(2)並列計算が収束する十分条件の証明、(3)逐次計算では収束するが分散処理を明示せず並列計算を行った場合に解に収束しない例の構成をおこなった。また具体的な輻射輸送方程式の並列計算に適用し、得られた十分条件の実用性を確認した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

数値計算は、現代社会を支える基盤技術であり、その理論的な信頼性の担保は必須である。従来、このような分野は理論数値解析学で扱われてきたが、昨今の急速な計算機ハードウェアの高性能化、特に並列計算環境の進歩との乖離も否めない。特に処理速度のみに着目して無秩序な並列化がおこなわれると、従来理論・手法では信頼性があったものが正しく動かず、数値計算が支える生活や技術開発の停滞が危惧される。この点に対し、本研究では数値計算の「正しさ」の枠組みを再考するとともに、大学学部教育での問題意識の提示、実用性、昨今のデータ科学における「再現性」との共通点など、多様な話題を包含する研究テーマである。

研究成果の概要（英文）：We discussed the reliability of parallel execution of numerical schemes. The main target in numerical computations is solving systems of linear equations, and we treated the Gauss-Seidel iteration in the current research. The results are (1) construction of a mathematical model of parallel execution status, (2) proving a sufficient condition for convergence, and (3) constructing a counter example where the serial computation converges and the parallel execution diverges. Practicality of the proposed criteria is also shown by applying it to computation appeared in science and technology.

研究分野：数値解析学

キーワード：数値解析学 並列計算 信頼性

## 様式 C-19、F-19-1、Z-19 (共通)

### 1. 研究開始当初の背景

科学・技術数値計算は、決して最先端の研究でのみもちいられているわけではなく、我々の現代社会を支える基盤技術であり、いずれにおいても確固とした信頼性が求められる。「理論数値解析学」とよばれる分野では、数値解法の信頼性を厳密に論じ、現代の数値計算の利用を根底で支えている。数値解法の正しさという問題意識は、電子計算機の登場以前から各種の数値解法の提案と同時に起こってきたものであり、スキーム(数値解法)の提案、安定性解析、誤差解析などのために、多様な数学理論と密接に関連しながら発展してきた。一方近年では、先端科学・技術や日常生活で解くべき問題の多様化、問題規模の増大、数値解法の複合・複雑化、ソフトウェア・ライブラリやハードウェアの高性能化などが進展し、数値計算への期待と普及が一層高まっている。特にソフトウェア・ライブラリやハードウェア進展は目覚ましく、エンドユーザが特に計算機の構成を意識せずとも高パフォーマンスを引き出せるよう、工夫がなされている。そのような状況であっても、従来の数値解法の幾つかは有力な手法として利用されているが、その信頼性解析は逐次計算が念頭におかれて計算順序を厳密に指定したもとのスキームの信頼性が論じられることも多い。最新の並列計算機の実情から乖離し始めた場面もあるが、種々の並列計算過程を全て念頭におき、これまで逐次計算で展開されてきた計算の信頼性を、理論数値解析学の視点から厳密に論じるのは、数値計算環境の多様性を考慮すると非現実的である。これに代えて「逐次計算が正しいので、並列計算も正しい」「テスト問題で計算したところ、結果が正しいようである」という、経験的な希望から並列計算が行われているのが実情である、しかしながら、並列計算過程における厳密な正しさの追求をあきらめ、計算速度の高速化のみを目的として並列化した場合、計算のたびに計算結果が異なったり、理論的に正しさの保障されない数値結果が出力され、数値計算という手法に対する信頼性の低下が懸念される。一方で、従来型の計算の信頼性に固執するあまり、最新の並列計算環境のパフォーマンスを活用できなければ、問題の複雑化や多様性を解決する手段がなく、科学・技術の停滞も懸念され、そのバランスをとる新たな価値観が求められている。

### 2. 研究の目的

本研究の目的は、種々の並列計算システムにおいて、計算結果が異なっても、その計算結果が正しいことを保証する枠組みと事例の考察にある。計算機システムの複雑化に伴い、現在では、数値計算ライブラリや数値計算ライブラリ、ハードウェアといったレイヤ毎に「計算結果が同一である(計算結果の一貫性)」ことを指標として計算が正しいとされてきた。一方、特に科学・技術を対象とする数値計算のユーザが必要としているのは、如何なる計算環境で、どのような負荷状況で計算しても「結果が同一であること」ではなく、「解くべき問題の設定において、結果が正しい、あるいは正しい近似結果が得られている」ことであると考えられる。並列計算においては、高速性の達成のために実行時の動的負荷分散や演算順序の交換などが効果的と考えられる。このような非決定的な動的最適化のうち、特に演算順序が動的に変更される場合や、共有メモリ計算機での競合状態(race condition)は昨今の計算機ハードウェアでは頻繁に起こると考えられるため、これらを対象とした動的最適化に対する信頼性解析は、数値計算の基礎技術として極めて重要と考えられる。

### 3. 研究の方法

目的を達成するために、大規模連立一次方程式の反復数値解法である Gauss-Seidel 法を例に、その並列計算の正しさを論じる。この Gauss-Seidel 法は、疎行列であらわされる連立一次方程式の基本的な数値解法である。特に超大規模問題においては、メモリの使用量とメモリアクセスの軽減が重要であるが、そのアルゴリズムではメモリへの書き込み・読み込みが、すなわち演算順序が厳密に指定され、本質的に逐次計算が要求される。係数行列が物理的あるいは工学的に自然な設定のもとで、Gauss-Seidel 法で生成される列が連立方程式の厳密解に収束することはよく知られており、その実装の容易さもあって、大規模問題において有力な数値解法として利用されている。一方、近年普及している共有メモリ計算機において制御なく並列計算をおこなった場合に、もしメモリアクセスの競合状態(race condition)が生じると、計算のたびに結果が異なり、見かけの信頼性が低下する。計算結果の信頼性を論じるために、どのように計算しても計算結果が同じであること(結果の一貫性)は明快である反面、極めて許容範囲の狭いものである。一方、超大規模連立一次方程式が現れる場合、その近似解が得られれば満足されることも多い。このような数値計算を利用する立場からは必ずしも結果の一貫性は必要ではない。本研究でもこの視点から信頼性評価に取り組んだ。

研究の本質は以下のとおりである。昨今普及している共有メモリ型並列計算を考える。演算順序が指定された漸化式において、漸化式の各項をメモリ中に別々に保持するのではなく、同じメモリ位置に保持する実装を考える。あるスレッドが漸化式にしたがって更新された値を読み込むためには、この読み込みの前に、更新値がメモリに書き込まれていなければならない。しかし、この更新値を別のスレッドが計算している状況で書き込みが遅れた場合、更新値を必要とするスレッドは更新前の値を読み込む可能性があり、理論的な演算順序にしたがった計算がなされ

ない。これを防ぐために、一般にはスレッド間同期や排他制御がもちいられるが、それらを多用すると、計算の一貫性は担保されるものの、計算機の実用性を最大限に活用することができない。そこで、計算の信頼性を、結果の一貫性という指標で評価するのではなく、科学・技術計算のユーザ視点からの評価をおこなうことに意味があると考え、この立場から研究に取り組む。そのために、自然現象をあらわす具体的な数理モデルの数値計算もおこない、得られたフレームワークの実現性を確認する。

#### 4. 研究成果

並列計算過程のモデルを構築するための事例研究、数理モデルの確立と解析をおこなった。まずメモリ共有型並列計算を実現する典型的なハードウェアであるマルチコアの中央演算処理装 (Central Processing Unit; CPU) と画像処理用プロセッサ (Graphics Processing Unit; GPU) による並列計算環境の構築をおこなった。次に、この環境をもちい、並列数値計算の事例研究として、藤原 (代表者) は光伝播に現れる微分積分方程式の離散化で得られる連立一次方程式を、吉川 (分担者) は音響問題に表れる積分方程式の離散化方程式に対して、種々の並列数値計算をおこない、事例を積み重ねた。さらにそれらの結果に基づき、基本的な定常反復法であり逐次計算が前提とされている Gauss-Seidel 法を取り上げて、(1) 並列計算過程を記述する数理モデルを構成し、(2) その収束性のためのある十分条件を示し、(3) 研究背景として危惧される、逐次計算では収束する Gauss-Seidel 法を、分散処理を明示せず並列計算を行った場合に計算が収束しない例 (反例) を具体的に構成した。Gauss-Seidel 法の計算手順や収束解析は、逐次計算を前提として論じられる。そのため、逐次実行を前提として実装した計算機プログラムを並列計算機で実行しても収束するとは限らず、実行毎に収束・発散の双方がみられる場合が起こりうるものが経験的に知られている。(2) の結果は、逐次計算を前提とする Gauss-Seidel 法が並列計算でもある条件下で有効であることを示すものの、(3) の結果は無条件では収束を保証できないことを意味している。この結果、(1) のフレームワークにのっとり、(2) で示した以外の Gauss-Seidel 法の並列計算の収束条件の証明、さらには収束するための「良い」十分条件の探索が今後の課題のひとつとして挙げられる。また、この十分条件をプログラムとして実装 (すなわち、計算手順をプログラムで指示) して、上述の光伝播に現れる微分積分方程式の数値計算をおこなったところ、逐次計算に比べて計算時間は十分に短縮され、CPU、GPU の双方の並列化における特徴を生かした高速化が実現されることを確認した。この結果は、(2) で得た収束判定のための十分条件が理論的なものではなく、実際の数値計算においても実用的であることを示すものである。

この光伝播に現れる微分積分方程式は超大規模問題であるため並列計算が不可欠であるが、広く利用される GMRES ではメモリが不足し、BiCGSTAB では収束性の理論的な事前評価が十分でなく、得られた計算結果に対して事後誤差的に残差が十分小さいので厳密解を十分近似しているという事後説明か、逐次計算が正しいので並列計算も正しいとされていたものである。これに対して本研究の結果により、その並列数値計算結果の正しさが理論的に正当化されたことは、実用上も十分に意義の高いものである。また、この結果からこの数値計算に基づく医用画像に関する逆問題の数値実験に進展がみられるなど、本研究の応用も直ちに開始された。

本研究は特に連立一次方程式の反復解法の並列化を対象としたが、研究遂行過程において研究交流の中で、近年注目されるデータ科学分野においても、同じような信頼性が問題となっていることが判明した。具体的には、同じアルゴリズムで同じ母集団であっても、異なるデータセットが得られる場合があり、数値計算の出力としては異なる結果が得られるが、それをどのように位置づけるか、という問題である。すなわち、本研究では演算順序依存性を考慮した計算結果の信頼性を議論したが、今後、数値計算が社会の根底を支えるデータ学・データ科学も利用されるためには、「もちいるデータに依存しない科学・技術計算の再現性」の重要性を強く認識し、今後、これらの概念を含めた総合的な研究が必要であると考えられる。

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計7件（うち査読付論文 6件/うち国際共著 4件/うちオープンアクセス 3件）

1. 著者名 H. Fujiwara, N. Higashimori, and H. Imai	4. 巻 27
2. 論文標題 Numerical experiments on analyticity of solutions to fractional differential equations	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Advances in Mathematical Sciences and Applications	6. 最初と最後の頁 169-180
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 藤原宏志	4. 巻 2094
2. 論文標題 連立一次方程式に対する定常反復法の並列計算に関する一考察	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 数理解析研究所講究録	6. 最初と最後の頁 122-130
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -

1. 著者名 Fujiwara Hiroshi	4. 巻 36
2. 論文標題 Design and implementation of multiple-precision arithmetic environment in MATLAB for reliable numerical computations	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics	6. 最初と最後の頁 1089 ~ 1100
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1007/s13160-019-00385-z	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 藤原宏志, Alexandru Tamasan 19	4. 巻 19
2. 論文標題 Cauchy 型積分によるメッシュレス X 線計算機断層撮影法	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 計算数理工学論文集	6. 最初と最後の頁 1-6
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 該当する

1. 著者名 Hiroshi Fujiwara, Alexandru Tamasan	4. 巻 28
2. 論文標題 Numerical Realization of a New Generation Tomography Algorithm Based on the Cauchy-type Integral Formula	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Advances in Mathematical Sciences and Applications	6. 最初と最後の頁 413-424
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Fujiwara Hiroshi, Sadiq Kamran, Tamasan Alexandru	4. 巻 36
2. 論文標題 A Fourier approach to the inverse source problem in an absorbing and anisotropic scattering medium	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Inverse Problems	6. 最初と最後の頁 015005 ~ 015005
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1361-6420/ab4d98	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Fujiwara Hiroshi, Sadiq Kamran, Tamasan Alexandru	4. 巻 13
2. 論文標題 Numerical Reconstruction of Radiative Sources in an Absorbing and Nondiffusing Scattering Medium in Two Dimensions	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 SIAM Journal on Imaging Sciences	6. 最初と最後の頁 535 ~ 555
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1137/19M1282921	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

〔学会発表〕 計13件 (うち招待講演 4件 / うち国際学会 7件)

1. 発表者名 H.Fujiwara
2. 発表標題 Numerical Computation of the 2D Stationary Radiative Transport Equation on Graded Meshes
3. 学会等名 Japan-Taiwan Joint Workshop on Scientific Computing and Related Topics (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 藤原宏志
2. 発表標題 多倍長計算環境exflibの最新計算環境への対応と普及
3. 学会等名 日本応用数理学会年会2018年度 年会 (招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Hiroshi Fujiwara
2. 発表標題 Multiple-Precision Arithmetic on MATLAB and Related Software for Reliable Computations
3. 学会等名 China-Japan-Korea Conference 2018 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 H. Fujiwara
2. 発表標題 Finite Volume Method for Photon Propagation in Biomedical Tissue
3. 学会等名 CoMFoS18 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 藤原宏志
2. 発表標題 多角形メッシュによる生体内の近赤外伝播の効率的な数値計算法
3. 学会等名 第25回医用近赤外線分光法研究会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 H.Fujiwara
2. 発表標題 Advantageous of the Finite Volume Method in Numerical Computation for Light Propagation in Biological Tissue
3. 学会等名 International Conference on Complex Medial Engineering 2018 (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 藤原宏志
2. 発表標題 多角形要素をもちいる不連続Galerkin法の収束性の検証
3. 学会等名 ODE-JP 2018
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 H. Fujiwara
2. 発表標題 Numerical Computation of the Radiative Transport Equation on Nonconformal Meshes
3. 学会等名 East Asia Section of SIAM, 2018 (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 若原孝浩, 吉川仁
2. 発表標題 超音波スピーカーにより作り出される局所的な可聴音場の再現に関する数値解析
3. 学会等名 日本機学会第31回計算力学講演会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 高木 貴弘, 吉川 仁, 高橋 徹, 櫻山 和男
2. 発表標題 ハイブリッド並列を用いた時間域多重極境界要素法による大規模音場解析
3. 学会等名 第21回応用力学シンポジウム
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Hiroshi Fujiwara, Tamasan Alexandru
2. 発表標題 Numerical realizations of X-ray computerized tomography by Cauchy-type boundary integration
3. 学会等名 RIMS 共同研究 (公開型)「偏微分方程式による逆問題解析とその周辺」(国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 若原孝浩, 吉川仁
2. 発表標題 超音波スピーカーにより生成される局所可聴音場再現のための数値解析
3. 学会等名 第22回応用力学シンポジウム, 第65回理論応用力学講演会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Makoto Shoji, Hitoshi Yoshikawa, Kazuo Kashiwama
2. 発表標題 Large Scale Traffic Noise Simulation by Time-Domain FMBEM
3. 学会等名 The 7th Asian Pacific Congress on Computational Mechanics (国際学会)
4. 発表年 2019年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究 分担 者	吉川 仁  (Yoshikawa Hitoshi)  (90359836)	京都大学・情報学研究科・准教授    (14301)	