様 式 C－19、F－19－1、Z－19 （共通）

科研費
KAKENHI

科学研究費助成事業　　研究成果報告書

平成 29 年　8 月　7 日現在

機関番号：32619
研究種目：若手研究(B)
研究期間：2013～2016
課題番号：25730076

研究課題名（和文）誤差解析の意味で高精度な数値線形計算の基盤の創出

研究課題名（英文）Accurate and High Performance Computational Methods for Numerical Linear Algebra

研究代表者
尾崎　克久（Ozaki, Katsuhisa）

芝浦工業大学・システム理工学部・准教授

研究者番号：90434282

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費）　3,100,000円

研究成果の概要（和文）：有限桁の数を扱う数値計算では，演算毎に丸め誤差が発生する可能性がある．計算回数が多いとき，丸め誤差は蓄積し，最終的に得る計算結果は不正確になることもある．計算機の能力向上により問題が大規模化すると，丸め誤差の影響はより心配される．本研究課題において，数値線形代数の問題に対して，丸め誤差の影響を抑えつつ，高速に計算できる計算環境を行列積・LU分解・コレスキー分解などに対して構築できた．

研究成果の概要（英文）：Floating-point arithmetic is widely used for scientific computing. Because information of binary floating-point numbers is finite, rounding error may occur. If rounding errors accumulate, then an inaccurate result may be obtained. If a problem is large scale, then the problem of rounding errors will be more serious. We proposed accurate and high performance computational methods for numerical linear algebra, especially, matrix multiplication, LU decomposition, and Cholesky decomposition.

研究分野：数値解析

キーワード：誤差解析　ハイパフォーマンスコンピューティング　数値解析

１．研究開始当初の背景

線形計算は科学技術計算に必須な計算である．数値線形代数の分野では，BLAS・LAPACK などを実現する高速なライブラリが共有メモリ環境で提供されている．代表的なものは Intel Math Kernel Library や GotoBLAS などであり，計算資源を効率良く利用し，高速な計算が行える．分散並列環境では PBLAS，ScaLAPACK などがあり，GPGPU に対しては CuBLAS など，マルチ CPU・マルチコア・分散並列化などにも対応し，高い並列化効率を実現している．

数値計算では，IEEE 754 が定める浮動小数点数とその演算が幅広く利用されている．これは有限桁の 2 進数であるため，浮動小数点数と浮動小数点数の演算結果は浮動小数点数にならないことがあり，丸め誤差が演算毎に発生する可能性がある．実数の計算では演算の順番は問題にならない一方で，浮動小数点演算では丸め誤差が発生するため，計算順によって数値計算の結果は異なる．多くのライブラリでは，高速化の観点で計算の順番が決められている．具体的にはキャッシュメモリを有効活用できる計算順，すなわちデータの再利用性が高い計算順が採用されている．

数値計算の丸め誤差に関する解析の先行研究も多くある．丸め誤差の影響が最も大きくなる計算順（絶対誤差の上限が大きいという意味）は recursive と呼ばれる計算順で，逐次的に前から計算する方法である．問題のサイズを n とすると，この順で計算された結果に対して，絶対誤差は n に比例する量となることが知られている．一方で，丸め誤差の影響を小さくする計算方法は通称 pair wise と呼ばれる計算順であり，丸め誤差解析を行うと絶対誤差の上限を最小にできることが知られている．これは計算順を２分木で表現した際に完全 2 分木となる計算順を意味し，誤差の発生に関して最大限の独立性を確保することを意味する．結果として絶対誤差は $\log_2 n$ に比例する量となることが知られている．ただし，この計算順では高速に動くコードを開発するのは難しいといわれている．よって，高速に実装できる計算順と絶対誤差を最小にする計算順は異なり，ギャップが存在する．

研究開始当時には，計算速度のパフォーマンスと絶対誤差の上限の大きさにあるギャップを埋める研究は存在しなかったため，高速かつ丸め誤差の影響を小さくする手法の開発および実装を行うことを計画した．今後の計算機環境の発展により，問題が大規模化した際には，丸め誤差の考慮が必須になると思われる．本研究課題の成果により，数値線形代数に対する数値計算の発展，また精度保証付き数値計算という分野に貢献したいと考えた．

２．研究の目的

数値線形代数の問題に対して，丸め誤差の影響を小さくする高速な計算基盤環境を構築することが目的である．数値線形代数の問題において，行列積，LU 分解，コレスキー分解，三角行列の逆行列を求める問題など，多くの問題では行列のサイズを n とした際に，丸め誤差の影響（誤差および残差）は n に比例する量であることが知られている．これを，現在すでに提供されている高速なルーチンに対して，20%程度の速度の低下で誤差の影響をルート n に比例する量に削減することを目標にする．これはサイズが 1 万の正方行列であれば，誤差の影響は約 100 倍小さくなることを意味し，サイズが 100 万である行列の場合，誤差の影響が 1000 分の 1 になる．

今後の計算機の性能の向上から，より大規模な問題を解くことが可能になると予想される．問題の大規模化により，問題を解くために必要な浮動小数点演算の回数が増加し，今よりも丸め誤差の影響が心配される．丸め誤差を小さくする計算方法の提案とその実装は今後活躍の機会が多く与えられると思われる．

数値計算の信頼性を数値計算のみを用いて保証する精度保証付き数値計算という分野がある．例えば，精度保証付き数値計算では得られた数値解に対して，その誤差の上限を同時に出力する．よって，数値解を中心として半径が誤差上限以内に真の解が存在することを証明できる．

一般に

・数値計算は高速であるが，結果の信頼性を保証しない

・数式処理では厳密な計算が行われ，結果は常に正しいが，計算が低速である

ことが知られているが，精度保証付き数値計算はこのギャップを埋められる技術として知られている．数値計算の高速性を活かし，信頼性に言及できる技術である．

精度保証付き数計算では丸め誤差の影響（特に最悪のケース）を把握することが非常に重要である．本研究課題で開発する絶対誤差の上限を抑えた高速計算は，数値線形代数に対する精度保証付き数値計算にとって非常に有用となる．本研究課題の成果により，今までの手法では精度保証ができなかった悪条件な問題が，計算時間をあまり増やさずに保証できるようになる．さらに，より高品質な保証，すなわち真の解を包含する誤差半径が小さくなるなどの貢献が可能である．

３．研究の方法

本研究は，丸め誤差の影響を抑え，かつ高速に計算可能な数値線形代数のための理論およびコードを開発することである．よって，下記の 2 点

（1）　高速なコードの実装

（2）　線形計算に対する丸め誤差の解析

を具体的に進めることになる．（1）と（2）の結果は実践－理論とお互いに関連するため，フィードバックをかけながら研究を進めた．以下，それぞれの項目の研究方法について述べる．

（1）

行列積・LU 分解・コレスキー分解などに対して，ブロック計算を用いながら高速に動くコードを開発した．内部の小行列に対しては，既存の高速な BLAS の gemm のルーチンをそのまま適用した．これにより，計算機環境の変化にもそのまま対応できる，ビルディングブロック式の構造となる．

（2）

開発したコードが示す計算順に対して丸め誤差の解析を行う．ブロック計算を前提として，最適なブロックサイズがわかるように丸め誤差解析を行った．丸め誤差の影響を小さくするブロックサイズの推定，ライブラリにおける Preload と Postload の違いの特定するテスト問題の作成, OpenMP を用いた効率的実装などを研究した．

本研究課題はコードの開発や多くの数値実験を行うことから，この分野について知識を持つ研究補助員（大学院生）を雇用し，研究の効率化を図った．また，応用数理系やハイパフォーマンスコンピューティング系の学会などでの成果発表により，専門家の意見を聞く機会を多くし，研究を推進した．

４．研究成果

数値線形計算の基本である以下の計算ルーチンの開発を行った．括弧の中は開発したコードに相当する BLAS･LAPACK のルーチンの名前を記載している．

・行列積（dgemm, dtrmm）

・LU 分解(dgetrf)

・三角行列の残差(dtrtri)

・コレスキー分解(dpotrf)

ブロック計算をベースに，誤差や残差の上限を抑える計算法を開発した．いずれの問題に関しても，高速な Intel Math Kernel Library に対して，最大 20%の計算時間の増加で，絶対誤差や残差の上限が１／√n 倍に削減された．特にラップトップ型計算機によくある 1CPU・2 コアの環境では，性能低下は 5%未満であり，誤差解析の意味で非常によく，かつ計算速度の点では既存の高速ライブラリと遜色ないパフォーマンスであるため，効率的に実装ができたといえる．

これらの計算基盤を構築したために，特に精度保証付き数値計算に対して非常に貢献ができた．具体的に適用した問題は

（1）区間行列と区間行列の積

（2）連立一次方程式の精度保証法

（3）実対称行列に対する正定値の保証

であり，さらに多くの数値線形代数の問題に貢献できるものと考える．以下，上記の項目について具体的に効果を確認した内容をまとめる．

（1）

区間行列と区間行列の積について，得られる区間行列の半径が小さくなることが確認された．特にタイトな区間半径をもつ区間行列に対する計算では，誤差半径を大幅に改善できることがわかった．具体的には，先行研究で開発された手法が求めた区間の半径を，１／√n 倍に縮小できることを確認した．
行列積について，提案した手法の性能劣化が 20%の場合でも, 区間行列積のアルゴリズム全体として 13%の劣化しかないことが確かめられた．

（2）

連立一次方程式の数値解に対する精度保証付き数値計算については，従来法では精度保証に失敗した問題でも，ブロック計算により精度保証が可能になったなどの例を確認した．より悪条件な問題にまで精度保証を成功させられるようになった．具体的にはある条件数の問題の精度保証を先行研究で失敗したとき，そこからさらに条件数が 10 の 2 乗程度高い悪条件な問題であっても精度保証が成功する事例を発見できた．

（３）

実対称行列に対する正定値の保証については，Rump 氏・Ogita 氏が開発した超高速精度保証法の改善が行えた．コレスキー分解の残差の上限を，提案したブロック計算により改善でき，原点方向のシフト量の削減に成功した．従来法では正定値性の保証に失敗していたが，ブロックコレスキー分解により成功する事例を見つけられた．また，Rump-Ogita 法が求める行列の最小特異値の下限について，より多くの問題に対して精度保証が成功するように改善ができた．

さらに，グループ化されたブロック計算とその誤差解析および実装を行った．計算機の進歩により，今後より大規模な問題を扱えるようになるが，そのときには誤差の影響が n から n の三乗根に比例するようになり，大きな効果を望めるだろう．今後の研究テーマを得た．

また，この研究課題の成果の一部は現在プロジェクトとして推進している「ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題に関するアプリケーション開発・研究開発」の萌芽的課題である「極限の探究に資する精度保証付き数値計算学の展開と超高性能計算環境の創成」のプロジェクトでも有用であり，実装が始まっている．超並列分散環境においても提案方式は有効であり，京コンピュータにおいて PBLAS の pdgemm をベースにしてブロック計算を行う方式を実装した．計算性能の劣化は 10%以内で，誤差の影響を 1000 倍削減できることが確認できた．本研究課題の成果は，計算機環境を問わず，今後も活躍されることが期待される．

５．主な発表論文等

〔雑誌論文〕（計１件）

樋口裕幸，尾崎克久：浮動小数点演算による内積の丸め誤差解析，日本応用数理学会論文誌，26:2(2016)，pp.182-212.

〔学会発表〕（計１０件）

K. Ozaki，T. Ogita: Faithful Rounding for Matrix Multiplication, SIAM Conference on Computational Science and Engineering (CSE17), Hilton Atlanta, Atlanta, USA (2017/02/27-03/03).

T. Terao, K. Ozaki: Verification of Positive Definiteness using Block Cholesky Decomposition, The 35th JSST Annual Conference, International Conference on Simulation Technology (JSST2016), Kyoto University (2016/10/27-29).

T. Terao, K. Ozaki: Verification of Positive Definiteness and its Application to linear systems using Block Cholesky Decomposition, Czech-Japanese-Polish Seminar in Applied Mathematics 2016, AGH University of Science and Technology, Krakow, Poland (2016/09/05-09).

K. Ozaki: Block Computations for Interval Arithmetic and Verified Numerical Computations for Linear Systems, 5th European Seminar on Computing (ESCO2016), Pilsen, Czech Republic (2016/06/09).

樋口 裕幸，尾崎 克久：浮動小数点演算による内積の誤差解析について，日本応用数理学会研究部会連合発表会，神戸学院大学 (2015/3/4-5).

寺尾 剛史，尾崎 克久：ブロックコレスキー分解を用いた行列に対する正定値性の保証とその応用，日本応用数理学会研究部会連合発表会，神戸学院大学(2015/3/4-5).

K. Ozaki, T. Ogita, S. Oishi: Block Computations and Verified Numerical Computations for Linear Systems, The 33rd JSST Annual Conference: International Conference on Simulation Technology, Kitakyushu, Japan (2014/9/29-31).

尾崎克久，荻田武史，大石進一：連立一次方程式に対する自動精度保証法の改善，平成 26 年日本応用数理学会年会，政策研究大学院大学 (2014/9/3-5).

K. Ozaki, T. Ogita, S. Oishi: Residual Bounds for Triangular Systems by Grouped Block Implementation, The 10th East Asia SIAM Conference, Pattaya, Thailand (2014/06/23-25).

尾崎克久，荻田武史，大石進一：Inverse Matrix of Triangular Matrices for Verified Numerical Computations，日本応用数理学会研究部会連合発表会，京都大学(2014/3/20).

６．研究組織

(1)研究代表者

尾崎　克久（Ozaki Katsuhisa）

芝浦工業大学システム理工学部准教授

研究者番号：90434282