

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 30 年 8 月 29 日現在

機関番号：32641

研究種目：挑戦的萌芽研究

研究期間：2014～2017

課題番号：26600155

研究課題名(和文) グラフ問題の数値処理アルゴリズムの確立と並列化

研究課題名(英文) Numerical algorithms for graph problems and its parallelization

研究代表者

久保田 光一 (Kubota, Koichi)

中央大学・理工学部・教授

研究者番号：90178046

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,400,000円

研究成果の概要(和文)：グラフ問題を数値処理で解く定式化を行った。数値的な並列計算に持ち込むことにより従来の高速化手法が適用可能となり、100台規模の並列計算実験からその有効性を確認した。さらに総和計算の近似値を計算しその誤差を数値的に処理して正確な値を計算する方式の開発に取り組んでいるがこちらはまだ完成に至っていない。

本研究と深く関連するアルゴリズム微分で絶対値演算の系統的処理法としてABS-normal-form が2013年に提案された。2015年秋に提案者のGriewank氏が来訪し本研究と研究交流の後この新手法に基づく劣勾配値の列挙法に取組み、関連国際会議で発表し、この4月海外雑誌への採録が決定した。

研究成果の概要(英文)：Numerical parallel approach to graph problems was developed and investigated. Ordinal numerical parallel techniques could be utilized for solving graph problems with our approach, and the usefulness of numerical parallel computation were confirmed with numerical experiments with 100 Linux personal computers with GPU. Developing the new algorithm for computing the exact value by an approximate value of the summation is still continuing and not completed yet.

In the field of algorithmic differentiation that is the foundation of this research, a new technique for processing the absolute operations was proposed by Griewank with a new formalization called ABS(Absolute)-normal-form. Since he visited us at October 2015, studying on this new formalization that was related to our approach, we developed a new enumeration algorithm of subdifferentials of piecewise linearization. Presenting this research in two workshops, we published a paper that was accepted by a journal in this April.

研究分野：情報工学

キーワード：自動微分 グラフの数値処理 高階微分

## 1. 研究開始当初の背景

(1) 解きにくい非数値的問題としてのグラフの問題は、一般には整数計画法で定式化し分枝限定法で正確な解を求めることが多い。ハミルトン閉路問題はその代表で、関連近似解法の研究に加えて、2007年に Eppstein により cubic graph のトラベリングセールスマン問題の正確な解を求める  $O(1.260n)$  のアルゴリズムが提案されて以降 Bjorklund 等によるものを含めて様々な改善が提案されている。近年の並列計算機利用のためにはこれらの手法の並列化も重要であるが、スケーラビリティの確保と台数に比例した性能向上が可能な性質を目的として最初から並列計算に適した解法を研究・開発することの重要性が認識されつつあった。

## 2. 研究の目的

(1) 本研究では数値処理の観点から同問題を多変数多項式の係数計算問題に帰着させ、留数計算という数値的手法で解を計算する方法を提案する。その原理は 1977 年の Kohn のものと似ており計算量は  $O(n^3 2^n)$  と指数的であるが、並列計算機での実行を目的としたスケーラビリティを確保した並列化の適用が可能である。そこで、数値実験により並列化効率を高めるべく、アルゴリズムを改良することを目的とする。

(2) 具体的には、非数値的なグラフの問題を多変数多項式に変換し、多項式に現れる係数として解を導く。この手法は、数値計算手法の高階微分計算と捉えることができる。さらに多変数多項式を 1 変数多項式に置き換えることにより複素関数の留数計算に変換される。そこには自然な形で並列計算の導入が可能であり、また、代数系を変えて Proth 素数を用いた剰余計算により整数計算で正確な解を計算できる。

(3) 本研究の目的は、将来的な並列計算機システム上で有効となるように、実用的スケーラビリティを備えたアルゴリズムとしてこの手法を確立させ、現時点で利用可能な GPU 等を用いた並列計算に適したプログラム開発を行いその性能を実証することである。

## 3. 研究の方法

(1) 本研究の予備研究で試作済みのプログラムを基にして、(i) 現状でどこまで計算可能かを調べ、(ii) プログラムを改良してスレッド利用を図り、(iii) 加えて GPU に適したプログラム設計を行う。理論面では、(iv) Proth 素数とその原始根の選び方と計算性能との関係を明らかにする。

(2) 設備備品として購入する GPU 搭載 PC 等を活用してプログラム開発を行い、研究者が所属する学科の演習室の PC を借りて、

(v) ネットワーク接続した複数台の GPU を用いる計算実験を行なう。さらに (vi) MPI, openMP, openCL, CUDA 等による GPU 向けプログラム開発を行う。これに加えて、理論面では k-クリークの数など、適用できる問題を増やす方法を探求し、また、分枝限定法等の部分問題ソルバーとして使用できるような実装を目指し、計算実験を行う。

## 4. 研究成果

## (1) 主な成果

① まず本研究において構築した計算アルゴリズムの概要を説明する。頂点数が  $n$  の有向グラフの隣接行列を  $A$ 、対角成分が  $x^1, x^2, x^4, x^8, \dots$  となる対角行列を  $X(x)$  と記す。ここで  $A$  と  $X(x)$  との積の  $n$  乗、すなわち  $(A \cdot X(x))^n$  の  $(k, k)$  成分を  $h_k(x)$  と記せば、この  $h_k(x)$  は  $x$  に関する多項式となり、その係数はある頂点から有向道を通り同じ頂点に戻る有向道の総数に相当する。特に、 $x$  の次数が  $2^n - 1$  の項の係数はハミルトン閉路の総数に一致する。この係数は多項式を展開すれば計算できるが、その数式処理的な手間をかける代わりに、 $h_k(x)$  を  $2^n - 1$  階微分した後、 $x=0$  を代入しても得られる。これは留数計算相当の積分計算として定式化することができ、通常複素数計算で求めることができるが、誤差が累積するため、複素数計算ではなく Proth 素数による剰余環での総和計算で求めるという方法が本研究のアルゴリズムの原理である。整数計算に帰着させるため、誤差が無い。積分は Proth 素数の原始根に関する総和計算として表現できるので、総和区間を任意に分割することにより、分割区間の総和を並列実行するという自明な並列化が可能なアルゴリズムとなる。したがって、ここで開発したプログラムは、頂点数が  $n$  のグラフの隣接行列  $A$ 、Proth 素数  $M$ 、その位数が  $2^n$  となる(原始)根  $w$  と、 $[0, 2^n)$  の範囲  $[f, t)$  を入力データとして受け取る。すると、

$$\sum_{k=f}^{t-1} (A \cdot X(w^k \bmod M))^n w^k$$

を計算するか、あるいは、与えられた範囲  $[f, t)$  を  $L$  個の区間に再分割してさらに狭い区間  $[f_j, t_j)$  に分割して ( $j=0, \dots, L$ ) 他の計算機上で並列に計算した結果をまとめるかいずれか一方の処理を行うものである。一般に  $n$  が大きければ、総和計算範囲  $[0, 2^n)$  は十分に大きいので、これをすべての PC 上で並列計算すれば、台数にほぼ比例した計算速度を得ることが期待できる。

② 上記アルゴリズムに基づき複数 PC 上の CPU による並列化実験を実施した。本研究開始時に既に通常の Linux PC 上で上記計算を実行する試作プログラムを構築済みであったのでこれを用いて PC 約 100 台で総和計算区間を分割して計算することにより、台数に比例した並列化が可能であることを確認した。頂点数が 24 のグラフ  $A$  について上記プログラムで  $M=167772161$ 、 $w=59049$  で計算

すると、予備実験の段階では1台のPCでは1494秒かかる計算が10台で880秒、100台で92秒となっていた。本研究開始年度にこの演習室PCシステムが更新されたのでまず同一のプログラムで同様のCPUだけの計算実験を実施したところ、同じグラフについて、20台のPCで204秒、40台で94.6秒、80台で46秒とほぼ比例した計算速度を得た。PC自体に予備実験の際に使用したものに比べて約2倍の性能向上が見られる。

③ 複数PC上のGPUによる並列化実験を実施した。上記更新されたPCは以前のものに比べより高性能のものであり、各PCがそれぞれNVIDIA Quadro K3100Mを搭載している。このためにNVIDIA社のCUDA開発環境を用いて64bit整数計算向けのCUDAカーネルプログラムを作成した。プログラム開発自体には本研究における備品として購入したPCを利用し、複数台のGPU搭載PCによる実験は上記演習室のPCを利用した。Proth素数として $M=167772161 (=5 \cdot 2^{25}+1)$ を設定し、上記と同じPCで同じ計算をしたところ、PCを80台用いて約8.2秒で計算を終了した。延計算時間は約 $80 \times 8.2 = 656$ 秒であるが、計算開始から終了までの実時間は8.17秒となった。この結果はGPUを用いれば同じ結果を得るのに $46/8=5.75$ 倍のスピードで計算できたことを意味する。

④ 微分不可能点における劣微分の列挙アルゴリズムの開発と数値実験を実施した。本研究の原点はアルゴリズム微分技術であり、本研究はその原点となる技術に大きく関係している。実際、上記②の計算では剰余計算がボトルネックのひとつとなるが、数値 $x$ の $M$ に関する剰余の計算は $k$ に関する

$$\min |x - M \cdot k| \text{ s.t. } \sin(\pi k) = 0$$

という等号制約付き最小化計算に相当する。絶対値演算を含むアルゴリズム微分は以前から有用であることが知られていたが一般のプログラムに対する系統的対処法が確立されていなかった。2013年に発表されたGriewankの論文によりABS-normal formという形式が提案され、プログラム中に記述された式の中に含まれる絶対値演算に由来する微分不可能点に関する微分係数、すなわち劣微分係数が系統的に計算可能となった。その概略は $y=f(x)$ という計算を、

$$z=g(x, w), w=\text{abs}(z), y=h(x, w)$$

という3つのパートに分割して定式化する(変数はすべてベクトルとし、 $\text{abs}(z)$ は成分毎の絶対値)。そこで、本研究ではこの手法に関して、劣勾配として現れる区分的線形関数の劣微分係数を列挙する方法を実装した。この手法により図1に示されるような区分的線形関数の原点で交わる各平面の微分係数をすべて列挙することができる。この結果は2016年に英国で開催された自動微分に関する国際会議AD2016で発表した。この結果を

論文としてまとめ、Optimization Methods and Softwareに投稿したところ採録が決定している。

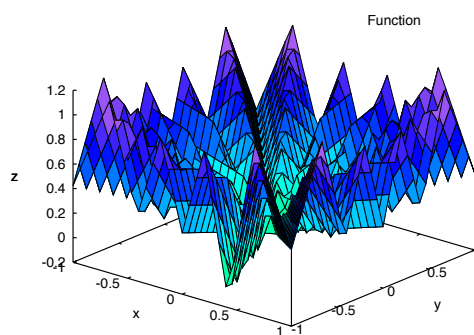


図1 区分的線形関数の例

⑤ min関数, max関数などは絶対値演算に置き換えて処理することとしていたがそれを修正して直接min関数やmax関数を処理するように定式化を拡張した。すなわち、上記 $y=f(x)$ について、これを

$$z=g(x, w), w=\Psi(z), y=h(x, w)$$

という3パートに分けて考える。ここで、 $w=\Psi(z)$ は、各成分がmin演算であり、その引数を $k$ 個とすると、 $z$ の次元は $w$ の次元の $k$ 倍となることである。実際には $k$ の値は個々のmin演算により変化しうるので、 $z$ の次元は引数の個数の総和となり、 $w$ の次元はmin演算の個数に一致する。このような形式に拡張することにより、2引数の演算もこの拡張形式に記述することができ、結果として $\Psi$ として次のような演算

$$\text{hypot}(x, y) \equiv \sqrt{(x^2+y^2)}$$

を導入することができる。これにより、絶対値による形式であるABS-normal formをhypot演算の形式に拡張することができるようになる。この手法について2017年にカナダで開催された国際オペレーションズ・リサーチ学会IFORS2017で発表した。

(2) 国内外における位置づけとインパクト

上記(1)の成果のうち、④と⑤については国際学会で発表し、④については国際ジャーナルに採録が決定し、オンラインではすでに公開されている(以下5. [雑誌論文]①参照)。また成果の①~③については最新実験結果と合わせて研究発表に向けて纏めている。もともと2016年の国際会議発表を受けて2017年の国際会議参加発表に結びついたことから、国外におけるインパクトはあったと考える。

(3) 今後の展望

計算のための道具開発としては未だCPUスレッドとGPUとの併用プログラムには至っていないことからこのようなプログラム開発を進展させていく予定である。理論的な枠組みを進展させることは当初の予定よりは進行が遅いが進める予定である。途中で発展し

た絶対値演算の系統的処理法についてはこれを利用した局所的凸関数最適化研究などが進展しており、2018年6月にはこれに関連する国際セミナー開催も決定しており、今後も研究の継続を予定している。

<参考文献>

- ① D. Eppstein, The traveling salesman problem for cubic graphs. *Journal of Graph Algorithms and Applications*, vol. 11, no. 1, pp. 61-81 (2007).
- ② A. Griewank, On stable piecewise linearization and generalized algorithmic differentiation, *Optimization Methods and Software*, vol. 28, pp. 1139-1178 (2013).
- ③ S. Kohn et al., A generating function approach to the traveling salesman problem. In *Proc. of the ACM Annual Conference*. ACM, New York, pp. 294-300 (1977).

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)

- ① K. Kubota, Enumeration of subdifferentials of piecewise linear functions with abs-normal form, *Optimization methods and software*, 査読有, 2018年4月16日, pp. 1-17, <https://doi.org/10.1080/10556788.2018.1458848>

[学会発表] (計4件)

- ① K. Kubota, Implementation example of algorithmic differentiation for piecewise smooth functions with the ABS-normal form, IFORS2017 International Federation of Operational Research Societies, 2017年7月
- ② 吉田北斗・久保田光一, 区分的微分可能関数と一般化自動微分. 情報処理学会第79回全国大会, 2017年3月
- ③ K. Kubota, Simple implementation and examples for piecewise linearization with abs-normal Form, AD2016 The 7th International Conference on Algorithmic Differentiation, 2016年9月
- ④ 中村優・久保田光一, GPUを用いたポラード・ロー法の実装. 情報処理学会第78回全国大会, 2016年3月

[図書] (計1件)

- ① K. Kubota, Simple Implementation of AD for Piecewise Linearization with Abs-Normal Form, Technical Report TRISE 15-03, Information and System Engineering, Faculty of Engineering and Science, Chuo University, 2016年, 8頁.

6. 研究組織

(1) 研究代表者

久保田 光一 (KUBOTA, Koichi)  
中央大学・理工学部・教授  
研究者番号: 90178046