

平成 30 年度 文部科学省

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（萌芽的課題）

## 平成 30 年度科学技術試験研究委託事業

「基礎科学のフロンティアー 極限への挑戦（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）」

### 成果報告書

令和元年 5 月 31 日

学校法人東京女子大学

荻田 武史

本報告書は、文部科学省の科学技術試験研究委託事業による委託業務として、学校法人東京女子大学が実施した平成30年度「基礎科学のフロンティア—極限への挑戦（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）」の成果を取りまとめたものです。

## 目次

|                              |    |
|------------------------------|----|
| 1. 委託業務の題目 .....             | 1  |
| 2. 実施機関（代表機関） .....          | 1  |
| 3. 委託業務の目的 .....             | 1  |
| 4. 平成 30 年度（報告年度）の実施内容 ..... | 1  |
| 4－1. 実施計画 .....              | 1  |
| 4－2. 実施内容（成果） .....          | 2  |
| 4－3. 活動（研究会等） .....          | 14 |
| 4－4. 実施体制 .....              | 15 |

別添 1 学会等発表実績

別添 2 実施計画

## 1. 委託業務の題目

「基礎科学のフロンティアー 極限への挑戦（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）」

## 2. 実施機関（代表機関）

|                  |                 |                                |                                  |                   |                          |    |
|------------------|-----------------|--------------------------------|----------------------------------|-------------------|--------------------------|----|
| 代<br>表<br>機<br>関 | 機関名             |                                | 学校法人東京女子大学                       |                   |                          |    |
|                  | 所在地             |                                | 〒167-8585 東京都杉並区善福寺 2 丁目 6 番 1 号 |                   |                          |    |
|                  | 課題<br>責任者       | ふりがな                           | おぎた たけし                          | 生年                | 西暦 1977 年 2 月 24 日（42 歳） |    |
|                  |                 | 氏 名                            | 荻田 武史                            | 月 日               | ※2019 年 4 月 1 日現在        |    |
|                  |                 | 所属部署名                          | 現代教養学部 数理科学科                     |                   | 役職                       | 教授 |
|                  |                 | 連絡先                            | Tel. 03-5382-6411                |                   | Fax. 03-5382-6411        |    |
|                  |                 |                                | E-mail ogita@lab.twcu.ac.jp      |                   |                          |    |
|                  | 事務<br>連絡<br>担当者 | ふりがな                           | くらもと のりえ                         |                   |                          |    |
|                  |                 | 氏 名                            | 倉本 聖恵                            |                   |                          |    |
|                  |                 | 所属部署名                          | 教育研究支援課                          |                   | 役職                       | 課長 |
| 連絡先              |                 | Tel. 03-5382-6451              |                                  | Fax. 03-5382-6479 |                          |    |
|                  |                 | E-mail kaken@office.twcu.ac.jp |                                  |                   |                          |    |

## 3. 委託業務の目的

ポスト「京」において、大規模計算を必要としながら、計算の精度に起因して解くことが困難であった様々な難問が解決可能となるような超高性能計算環境を構築することを目的とする。具体的には、ハイパフォーマンス・コンピューティングに「精度」の軸を新たに導入し、研究代表者及び研究分担者らによって開発されてきた線形計算の高速精度保証法、エラーフリー変換法、自動チューニング技法を用いて、計算機の新たな性能評価基準に基づく線形計算ライブラリを開発する。

このため、学校法人東京女子大学を中核機関として、分担機関である学校法人早稲田大学、国立大学法人名古屋大学、及び学校法人芝浦工業大学と密接に連携し、再委託により研究開発を実施する。

## 4. 平成 30 年度（報告年度）の実施内容

### 4-1. 実施計画

平成 30 年度は、本格実施フェーズとして、調査研究・準備研究フェーズにおいて策定した開発計画（研究開発内容、目標・期待される成果、実施体制、必要計算資源、工程表、所要経費等）に沿って、分担機関の早稲田大学、名古屋大学、芝浦工業大学と共同で以下に示す本萌芽的課題に関するアプリケーション開発・研究開発を推進する。

### ①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

#### a) 超高性能計算環境向け精度保証付き数値計算法の開発

超高性能計算環境において大規模問題を取り扱う際に発生する問題の悪条件化を克服するため、近似解の精度を改善することができる反復改良アルゴリズム及び精度保証アルゴリズムに関する研

究を推進する。特に、下記 b)における一般化固有値問題に対して有効なアルゴリズムを開発する。

#### b) アプリケーションソフトウェアの高精度化

具体的なシミュレーションサイエンスにおけるターゲットとして、量子物質計算ソフトウェアの高精度化に向けて研究を推進する。特に、実問題で現れる大規模な一般化固有値問題に対して精度保証法を適用し、性能評価を行う。

また、再委託によって、分担機関と連携し、以下のc)～e)の研究開発に取り組む。

#### c) ポスト「京」に向けた精度保証付き数値計算アルゴリズムの開発及び実装（再委託先：学校法人 早稲田大学）

スーパーコンピュータ向けに、実問題で現れるような疎行列系の大規模連立一次方程式や固有値問題に対する効率的な精度保証アルゴリズムを開発する。また、上記 b)についても代表機関と連携して研究を推進する。

#### d) ポスト「京」に向けた超高性能ライブラリの整備及び高性能実装技法の開発（再委託先：国立大学法人 名古屋大学）

エラーフリー変換に基づく高精度行列計算アルゴリズムを用いた線形計算の精度保証法について、超高性能計算環境向けにチューニングを行う。さらに、それを基盤として汎用性を持つ線形計算ライブラリの主要な関数群を整備する。また、上記 b)についても代表機関と連携して研究を推進する。

#### e) 超高性能計算環境向け高精度数値線形代数アルゴリズムの開発（再委託先：学校法人 芝浦工業大学）

数値線形代数における高精度な精度保証付き数値計算を達成するため、連立一次方程式及び固有値問題に対するスーパーコンピュータ向けの精度保証法の開発及び実装を行う。また、上記 b), d)についても代表機関及び分担機関と連携して研究を推進する。

### ②プロジェクトの総合的推進

プロジェクト全体の連携を密としつつ円滑に運営していくため、チーム内ミーティングの開催等、参画各機関の連携・調整にあたる。特に、プロジェクト全体の進捗状況を確認しつつ計画の合理化を検討し、必要に応じて、調査あるいは、外部有識者を招聘して意見を聞くなど、プロジェクトの推進に資する。また、異分野の研究者を招いて研究集会を開催し、新たなアプリケーションターゲットの開拓を積極的に行う。プロジェクトで得られた成果については、積極的に公表し、今後の展開に資する。

## 4-2. 実施内容（成果）

### [全体の総括]

本研究課題はサブ課題 1 つで構成されており、代表機関である東京女子大学と分担機関である早稲田大学、名古屋大学、芝浦工業大学によって推進された。そのサブ課題「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」における今年度の成果について述べる。

### ①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

#### a) 超高性能計算環境向け精度保証付き数値計算法の開発

東京女子大学を中心に研究を推進した。悪条件な固有値問題に対しても固有ベクトルの精度を改善で

きるアルゴリズムの開発に成功した。従来は、近接固有値がある場合、対応する固有ベクトルを高精度に計算することは困難であったが、提案アルゴリズムによって、指定された精度の範囲内ですべての桁が正確な固有ベクトルを得られるようになったことは画期的な成果である。また、大規模な一般化固有値問題に対して適用可能な高精度かつ効率的な精度保証法を提案した。

#### **b) アプリケーションソフトウェアの高精度化**

東京女子大学を中心に研究を推進した。具体的には、高分子の電子状態計算において現れる、40万次元を超える大規模な一般化固有値問題に対して上記a)において開発した精度保証法を適用し、すべての固有値の分離に成功した。従来は、10万次元を超えるような大規模一般化固有値問題に対する計算結果についての検証方法自体が存在しなかったため、当該分野に大きな影響を与えるものである。また、アプリケーションソフトウェアに資するための汎用線形計算ライブラリ（BLAS, PBLAS等の世界標準的なライブラリ）の精度保証化のため、それらに準じた形式で関数の基本的な仕様を定め、コードを開発した。このような汎用線形ライブラリに対する我々の研究成果は、実際にアメリカの研究機関（テネシー大学、カリフォルニア大学バークレー校等）によって開発中の次世代の汎用線形ライブラリ（Next Generation BLAS: BLAS G2）に反映されつつある。

このように、本研究によるアプリケーションソフトウェアの高精度化・精度保証化によって、高性能計算の分野に「精度の軸」を浸透させることに一定の成果が出始めている。

#### **c) ポスト「京」に向けた精度保証付き数値計算アルゴリズムの開発及び実装**

早稲田大学を中心に研究を推進した。具体的には、最適化問題や偏微分方程式の数値解法等、様々な応用のある特殊なブロック構造を持つ行列（鞍点型の疎行列）に着目し、それを係数とする連立一次方程式に対する精度保証付き数値計算法の開発及び実装を行った。鞍点型行列のブロック構造と疎行列性を活用することによって、元の問題にそのまま精度保証を適用するよりも大幅に計算量を削減可能となった。また、精度保証を適用する上で、従来よりもブロック行列に対する制約を緩和することができるため、より広い範囲の問題に精度保証を適用可能となった。固有値問題については、より大規模な問題に対して適用できるように疎行列性を活用し、順番や範囲が指定された固有値に対する効率的な精度保証アルゴリズムを開発した。

#### **d) ポスト「京」に向けた超高性能ライブラリの整備及び高性能実装技法の開発**

名古屋大学を中心に研究を推進した。具体的には、前年度に開発したエラーフリー変換に基づく高精度行列計算アルゴリズムの実装をもとに、高速性と高精度性を併せ持った超高性能計算環境を構築するためのチューニングを行った。ポスト「京」（富岳）のようなメニーコア・アーキテクチャを意識したチューニングの内容として、(1)複数の小規模密行列-行列積を一度に実行するBatched BLAS実装方式及び(2)疎行列化した行列-行列積をGraphics Processing Unit (GPU)上で高性能実行する疎行列-ベクトル積および疎行列-行列積の実装方式を開発した。また、線形計算ライブラリの整備として、上記で開発した新しい実装方式を、本研究によって開発中の数値計算ライブラリDHPMM\_F: High-precision Matrix Multiplication with Faithful Rounding（高精度行列積プログラム）の次期リリースバージョンとして公開するために、ソースコードの整備を行った。

## e) 超高性能計算環境向け高精度数値線形代数アルゴリズムの開発

芝浦工業大学を中心に研究を推進した。具体的には、連立一次方程式に対する精度保証法については、数値解の精度を改善する残差反復で用いる高精度な行列-ベクトル積アルゴリズムを、世界標準的な形式に従って実装し、京コンピュータ及び富士通FX100においてベンチマークテストを実施した。また、100万円を超えた大規模連立一次方程式に対して、ほぼ最終桁まで正確性が保証された数値解を得ることに成功した。100万円を超える問題に対する精度保証は、従来の10万円程度（ドイツ・ヴッパータール大学の研究グループによる結果）を大きく上回る世界初の成果である。開発したコードは、オープンソースで公開している。さらに、一般化固有値問題に対する精度保証法については、上記a)において開発された精度保証法を京コンピュータで実装した。

## ②プロジェクトの総合的推進

プロジェクトを円滑に運営していくため、チーム内ミーティングを適宜開催し、代表機関及び分担機関の連携・調整を行った。また、国際会議でのアウトリーチ活動や研究集会の開催を通じて、本研究課題の紹介を積極的に実施した。プロジェクトで得られた成果については、国内外の研究会、国際会議において積極的に公表した。

[内容]

## ①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

### a) 超高性能計算環境向け精度保証付き数値計算法の開発

#### (1) 固有値問題に対する反復改良法の開発

行列固有値問題において、数値計算によって固有ベクトルを得たときの精度は、固有値の近接度に反比例することが誤差解析によって知られている。一方、問題が大規模化すると、固有値が近接しやすくなり悪条件となる。そのような場合でも有効な固有ベクトルの反復改良法を考案した。その基礎となるアルゴリズムを図 a-1 に示す。

```

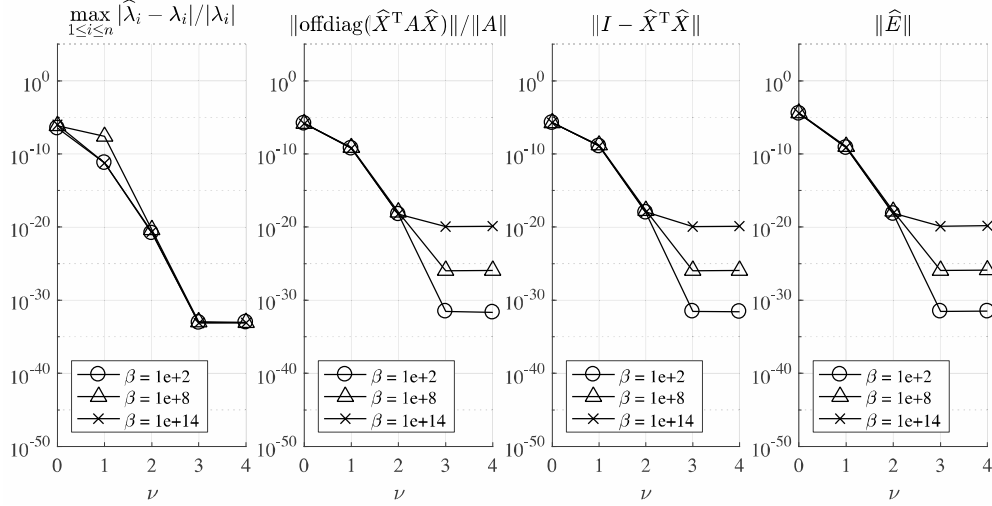
Input:  $A = A^T \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ;  $\hat{X} \in \mathbb{R}^{n \times \ell}$ 
Output:  $X' \in \mathbb{R}^{n \times \ell}$ ,  $\tilde{D} = \text{diag}(\tilde{\lambda}_i) \in \mathbb{R}^{\ell \times \ell}$ ;  $\tilde{E} \in \mathbb{R}^{\ell \times \ell}$ ;  $\delta \in \mathbb{R}$ 
1: function  $[X', \tilde{D}, \tilde{E}, \delta] \leftarrow \text{RefSyEv}(A, \hat{X})$ 
2:    $R \leftarrow I - \hat{X}^T \hat{X}$ 
3:    $S \leftarrow \hat{X}^T A \hat{X}$ 
4:    $\tilde{\lambda}_i \leftarrow s_{ii} / (1 - r_{ii})$  for  $i = 1, \dots, \ell$   $\triangleright$  Approximate eigenvalues
5:    $\tilde{D} \leftarrow \text{diag}(\tilde{\lambda}_i)$ 
6:    $\delta \leftarrow 2(\|S - \tilde{D}\|_2 + \|A\|_2 \|R\|_2)$ 
7:    $\tilde{e}_{ij} \leftarrow \begin{cases} \frac{s_{ij} + \lambda_j r_{ij}}{\tilde{\lambda}_j - \tilde{\lambda}_i} & \text{if } |\tilde{\lambda}_i - \tilde{\lambda}_j| > \delta \\ r_{ij}/2 & \text{otherwise} \end{cases}$  for  $1 \leq i, j \leq \ell$ 
8:    $X' \leftarrow \hat{X} + \hat{X} \tilde{E}$   $\triangleright$  Update  $\hat{X}$  by  $\hat{X}(I + \tilde{E})$ .
9: end function
  
```

図 a-1: 実対称行列に対する固有ベクトルの改良法

提案する反復改良法の有効性を検証するため、行列の次数は  $n = 100$  に固定し、近接度を様々に変化させた場合の数値実験結果を図 a-2 に示す。図 a-2 において、 $\beta$  は固有値の近接度の逆数、すなわち問題の悪条件性を表している。本数値実験では、初期値として近似解を単精度（10 進 8 桁程度の精度）で計算し、反復改良法については、4 倍精度演算（10 進 34 桁程度の精度）を用いた。そのため、固有ベクトル

ルの精度等の改善が  $\beta$  に応じたところで限界を迎えていることが分かる。

図 a-2: 近接固有値を持つ例題に対する提案法の収束履歴（左から、固有値の最大相対誤差、固有ベクトルの直交性、固有ベクトルの対角化性、固有ベクトルの精度を表している。横軸の  $\nu$  は反復回数）



## (2) 一般化固有値問題に対する高精度かつ高速な精度保証法の開発

一般化固有値問題には科学技術計算において様々な応用がある。ここでは、一般化固有値問題に対して、汎用性のある精度保証法を開発した（図 a-3）。

$$\begin{aligned}
 & Ax = \lambda Bx \quad A = A^T, B = B^T \in \mathbb{R}^{n \times n}, B: \text{正定値} \\
 & \begin{cases} \hat{X}: \text{近似固有ベクトルを並べた行列} \\ \hat{D}: \text{近似固有値を対角に持つ行列} \end{cases} \quad \begin{cases} R := \hat{X}^T(A\hat{X} - B\hat{X}\hat{D}) \\ G := \hat{X}^T B \hat{X} - I \end{cases} \\
 & \|G\|_\infty < 1 \text{ ならば、} Y := \hat{X}^{-1} B^{-1} A \hat{X} \text{ に対して} \\
 & |\hat{D} - Y| \leq |R| + \frac{\|R\|_\infty}{1 - \|G\|_\infty} |G| E =: F, \quad E: \text{成分がすべて1の行列} \\
 & \text{である。このとき、} d_i := \hat{D}_{ii}, r_i := \sum_{j=1}^n F_{ij} \text{ に対して} \\
 & \Lambda \subseteq \bigcup_{k=1}^n [d_i - r_i, d_i + r_i] \quad \Lambda := \{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n\} \\
 & \text{が成り立つ。また、もしすべての区間 } [d_i - r_i, d_i + r_i] \text{ が} \\
 & \text{分離している場合、各区間に1つの固有値 } \lambda_i \text{ が存在する。}
 \end{aligned}$$

図 a-3: 一般化固有値問題に対する精度保証方式

この精度保証方式は、連立一次方程式に対する精度保証法に基づいており、すべての近似固有値・近似固有ベクトルが求まっていれば、行列積のみで精度保証が可能である。そのため、スーパーコンピュータを含む多くの計算環境において、高い性能になることが期待できる。これについては、項目 b)-(1)で検証している。

## b) アプリケーションソフトウェアの高精度化

### (1) 量子物質計算に対する精度保証



項目 a)-(2)において開発した一般化固有値問題の精度保証法を、量子物質計算で現れる大規模な問題に適用する研究を実施した。結果として ELSES matrix library にある PPE357, PPE3594, PPE7194, PPE17994, PPE107994, VCNT22500, VCNT225000, NCCS430080 について重複固有値の非存在を示すことができた。これらはすべて高分子系であり、末尾の数字は行列の次数を表す。PPE はポリフェニレン・エチニレン、VCNT は炭素ナノチューブ、NCCS はナノ合成炭素固体から現れるものである。具体的な数値実験結果を表 b-1 に記載する。計算にはすべて倍精度演算を使用している。近似固有値の計算には並列計算ライブラリ ScaLAPACK の固有値分解ルーチン PDSYGVX を使用した。一例として、2 つの近似固有値の差 diff と、それらの近似固有値の誤差上限の和 sum のうち、diff と sum の差が最小になるものについて表示した。

表 b-1: 近似固有値の差と誤差上限の和

| 問題         | 2 つの近似固有値の<br>差 (A) | それらの近似固有値の<br>誤差上限の和 (B) |
|------------|---------------------|--------------------------|
| PPE357     | 6.61e-05            | 4.90e-13                 |
| PPE3594    | 1.03e-07            | 1.33e-12                 |
| PPE7194    | 5.55e-08            | 1.18e-12                 |
| PPE17994   | 5.32e-11            | 2.56e-12                 |
| PPE107994  | 6.42e-11            | 9.17e-12                 |
| VCNT22500  | 2.59e-09            | 3.20e-10                 |
| VCNT225000 | 1.97e-09            | 1.64e-09                 |
| NCCS430080 | 5.10e-09            | 1.61e-09                 |

表中の(A)よりも(B)が小さいため、2 つの固有値が重複しないことが保証されている。これは、diff と sum の差が最小の場合であるため、すべての固有値に対して重複していないことが示せた。

また、京コンピュータにおいて、近似計算に要した時間と精度保証に要した時間を比較する(表 b-2)。精度保証に要した時間は近似計算のおよそ 20%から 70%程度の時間であり、精度保証は近似計算よりも高速であることがわかる。これは、例えば異なる 2 つのアルゴリズムにより近似計算の結果を比較するような検算的手法より、精度保証が速度面で優れており、厳密な誤差半径を与える点で精度評価の点でも優位性がある。

表 b-2: 京コンピュータ上での計算時間の比較

| 問題       | 使用ノード数 | 近似計算の時間<br>(C) | 精度保証の時間<br>(D) | 時間比<br>(D) / (C) |
|----------|--------|----------------|----------------|------------------|
| PPE357   | 4      | 0.32           | 0.12           | 0.37             |
| PPE3594  | 4      | 20.7           | 4.73           | 0.22             |
| PPE7194  | 4      | 118            | 31.7           | 0.26             |
| PPE17994 | 16     | 217.9          | 105.7          | 0.48             |

|            |      |      |      |      |
|------------|------|------|------|------|
| PPE107994  | 600  | 1009 | 682  | 0.67 |
| VNCT22500  | 64   | 105  | 59.0 | 0.56 |
| VNCT225000 | 2025 | 2625 | 1775 | 0.67 |
| NCCS430080 | 6400 | 8960 | 3496 | 0.39 |

## (2) アプリケーションソフトウェアへの最新成果の実装

前年度の成果である C++ 言語の精度保証付き数値計算ライブラリに対し、今年度の新しい成果(項目 c) - (2) に対応) である楕円型偏微分方程式系の新しい精度保証付き数値計算法の実装を行った。また、例題として、生物系への応用がある Lotka-Volterra 方程式の精度保証付き数値計算を利用した解の計算機援用存在証明を実装した。さらに、前年度の成果である大規模向けの連立一次方程式の精度保証付き数値計算法が INTLAB のルーチンに採用され、新たに組み込まれた。INTLAB は世界的に有名な精度保証付き数値計算法のライブラリである。

### c) ポスト「京」に向けた精度保証付き数値計算アルゴリズムの開発及び実装

#### (1) 鞍点型行列を係数にもつ連立一次方程式の解の精度保証付き数値計算法の開発と実装

実問題で現れる問題は、特殊な構造を持つことが多い。そこで、最適化問題などに現れる鞍点行列を係数にもつ連立一次方程式に着目し、精度保証付き数値計算アルゴリズムの開発を行った。零空間法を基に精度保証付き数値計算アルゴリズムを構築したため、Schur 補元を利用した方法に比べて制約が少なく、従来法よりも適用ができる問題が広い。また、係数行列のブロックサイズによって問題サイズを低減できるために、ブロックの形状によっては元の問題よりも大幅に小さい問題に帰着して高速に解くことができる。

#### (2) 楕円型偏微分方程式系の Dirichlet 境界値問題の解の精度保証付き数値計算法の開発

楕円型偏微分方程式の解の精度保証付き数値計算では、線形化作用素  $L$  の正則性と線形化作用素の逆作用素のノルムを評価する点が最も重要となる。線形化作用素の評価は 1992 年に M. Plum が提案して以来、長い間検討されており、無限次元固有値問題として考える方法と、無限次元線形方程式として考える方法がある。無限次元固有値問題として考える方法は、高精度な結果が得られるが、線形化作用素  $L$  が自己共役作用素である場合に限られる。それに対し、無限次元線形方程式として考える方法は、非自己共役作用素も可能ではあるが、精度が落ちてしまい、検証が失敗してしまうケースが多くなる。

それに対し、今年度の成果では線形化作用素が非自己共役作用素でありながら無限次元固有値問題として帰着できる手法を考案した。これにより、線形化作用素  $L$  が非自己共役作用素になる 2 次元拡散項付き Lotka-Volterra 方程式の定常 Dirichlet 境界値問題

$$\begin{cases} -\Delta u = 110u - u^2 - 100uv & \text{in } \Omega, \\ -\Delta v = 7v + 8uv - v^2 & \text{in } \Omega, \\ u = v = 0 & \partial\Omega, \end{cases}$$

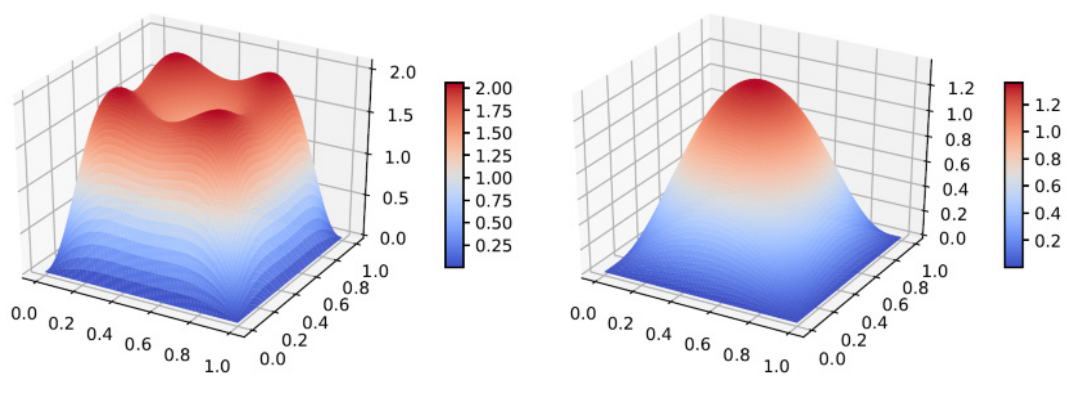


図 c-1: 2次元拡散項付き Lotka-Volterra 方程式の Dirichlet 境界値問題の近似解(左:  $u_h$ , 右:  $v_h$ )

をはじめとした実問題が多く含まれる楕円型偏微分方程式系でも線形化作用素  $L$  の逆作用素のノルム高精度な結果を得られる（生物系では、 $u$  は被食者、 $v$  は捕食者を表す）。図 c-1 には 2 次元拡散項付き Lotka-Volterra 方程式の定常 Dirichlet 境界値問題に対し、ルジャンドルスペクトル法を用いて得られた近似解  $u_h$  と  $v_h$  を示す。この近似解  $u_h, v_h$  を用いて作成する線形化作用素

$$L = \begin{pmatrix} 110 - 2u_h - 100v_h & -100u_h \\ 8v_h & 7 - 2v_h \end{pmatrix}$$

の逆作用素のノルム評価の値を表 c-2 に示す。

表 c-2: 2次元拡散項付き Lotka-Volterra 方程式の Dirichlet 境界値問題の逆作用素ノルム評価の結果 ( $N$ : 有限次元基底の次数, 左: 提案手法, 右: 従来手法)

| $N$ | $\ L^{-1}\  \leq$ | 従来手法  |
|-----|-------------------|-------|
| 10  | -                 | -     |
| 20  | 0.9066            | -     |
| 40  | 0.9067            | -     |
| 60  | 1.204             | 3.333 |

表 c-2 の  $N$  はルジャンドルスペクトル法を用いた際の近似空間の次数であり、値が小さいほど粗い近似であることを示す。提案手法では  $N=10$  では精度保証付き数値計算は失敗してしまうが、 $N=20$  以上で値を得ることに成功した。それに対し、従来手法では  $N=10$  から 40 では値を得ることに失敗し、 $N=60$  で値を得ることに成功している。また、線形化作用素  $L$  の逆作用素のノルム評価は小さい方が良い値であるため、我々の提案手法のほうが近似の次数  $N$  が小さくても、精度の良い結果が得られていることがわかる。

#### d) ポスト「京」に向けた超高性能ライブラリの整備及び高性能実装技法の開発

### (1) 線形計算における精度保証法のチューニング

前年度に開発したエラーフリー変換に基づく高精度行列計算アルゴリズムの実装をもとに、超高性能計算環境向けのチューニングを行った。具体的には、超高性能計算機向けのチューニングとして、(1) 複数の小規模密行列-行列積を一度に実行する **Batched BLAS** 実装方式、(2) 疎行列化した行列-行列積を **Graphics Processing Unit (GPU)**上で高性能実行する疎行列-ベクトル積実装方式 (**SpMV** および **SpMM** 実装方式) を開発した。以下に概要を説明する。

精度保証付きベンチマークの開発に資する基本演算である、エラーフリー変換に基づく行列-行列積アルゴリズム (以降、尾崎の方法と呼ぶ) のプログラムの高性能計算機向け性能チューニングを行った。以下の処理について、名古屋大学情報基盤センターに設置された、「京」コンピュータの流れをくむスーパーコンピュータである **FX100** スーパーコンピュータシステムを用いて性能評価を行った。

尾崎の方法は、入力行列に対し以下のエラーフリー変換を行う：

処理 I) 行列  $A$  と行列  $B$  を下記のように分解する (インデックスが若いほうが高いビットを持つようにする)

$$\begin{aligned} A &= A^{(1)} + A^{(2)} + A^{(3)} + \dots + A^{(p)} \\ B &= B^{(1)} + B^{(2)} + B^{(3)} + \dots + B^{(q)} \end{aligned}$$

処理 II) 行列積  $AB$  を以下のように計算する ( $p \times q$  個の行列積となる)

$$\begin{aligned} AB &= (A^{(1)} + A^{(2)} + \dots + A^{(p)}) (B^{(1)} + B^{(2)} + \dots + B^{(q)}) \\ &= (A^{(1)} + A^{(2)} + \dots + A^{(p)}) (B^{(1)} + B^{(2)} + \dots + B^{(q)}) \\ &= A^{(1)} B^{(1)} + A^{(1)} B^{(2)} + A^{(2)} B^{(1)} + \dots + A^{(p)} B^{(q)} \end{aligned} \quad \dots (1)$$

処理 I) の分解の仕方を工夫することで、処理 II) における行列積を無誤差の演算にすることができる。行列サイズが大きくなるにつれ、ほとんどの演算時間は行列-行列積の処理部分となる。

処理 II) において、多数の行列-行列積を行わなくてはならない。その際、行列サイズが小さいと、現在の CPU の実装では、性能が出ないことが知られている。そこで、以下に示す **Batched BLAS** を利用して高速化する実装方式を開発した。

**Batched BLAS** は、複数の行列の演算について、同種の **BLAS** 演算を並列に実行するインタフェースを提供するライブラリである。ここでは、その中の **GEMM** 演算について記載する。従来の **BLAS** ライブラリにおいて計算資源を十分に使い切れない、小規模サイズの行列積を多数行う演算でも、まとめて計算することで、小さな **GEMM** 計算を単に連続して呼び出す性能に対して高い性能が期待できる。

例として、以下の式 (2) に示す、多数の組の **GEMM** 演算 (行列-行列積演算) の並列計算を考える。

$$C_i \leftarrow \alpha_i A_i B_i + \beta_i C_i \quad i = 1 : N \quad \dots (2)$$

**Batched BLAS** では、式 (2) の行列サイズと  $\alpha_i$ ,  $\beta_i$  の値を、一回の呼び出し (バッチ) 全体で一定に保つか、可変にするかをアプリケーションに応じて、個別に設定することができる。

ここでは、処理 II) における複数回の行列-行列積演算に対して、**Batched BLAS** のインタフェースを適用させることで、尾崎の方法において小規模な行列演算を多数実行する状況下での高性能化を狙う。

以上を踏まえて、尾崎の方法への **Batched BLAS** の適用を行う。尾崎の方法の処理 II) における複数回の行列-行列積演算のプログラムを図 d-1 に表す。このプログラムでは、 $p \times q$  の回数分、for ループで

dgemm ルーチンを呼び出す。

図 d-1 に対し、Batched BLAS を適用させたプログラム (図 d-2) では、ポインタの配列に、行列 A と B の分割したそれぞれの先頭部分のポインタを、従来と同じ順番での計算となるように格納する。この収納によって結果を変えることなく、行列-行列積演算を並列に行うことができるようになる。

本研究では、すべての行列-行列積演算を倍精度で行った。CPU 環境においては、1 ノードでスレッド数を 1 から 36 まで変化させて実行時間を測定した。Batched BLAS については、Intel Math Kernel Library 2018.1.163 に備えられた Batched 機能を用いた。今回は Intel Math Kernel Library の Batched 機能の中の関数 “cblas\_dgemm\_batch” を用いて評価を行った。

次に、CPU 環境での性能を客観的に評価するため、Graphics Processing Unit (GPU) 環境も利用し評価を行う。GPU 実行環境として CUDA 8.0.44 を使用した。また CPU のスレッド数を 35 に固定して測定した。今回、35 スレッドを利用した理由は、基本的に実行時間はスレッド数を増やすと減少したが、36 スレッドの時だけ遅くなってしまったためである。Batched BLAS については、MAGMA ver. 2.2.0 の関数 “magmablas\_dgemm\_batch” を用いて評価を行った。

cuSPARSE については、CUDA 8.0.44 の、関数 “cusparseDcsrmmv” を使用した。

CPU および GPU 双方の実行環境において、実行時には NUMA Affinity 設定を行っている。それは、KMP\_AFFINITY=granularity=fine,compact1,0 と numactl の指定である。また、実験ではすべての時間計測に関数 “omp\_get\_wtime();” を用いた。ただし GPU を利用した部分の時間計測だけは、“omp\_get\_wtime();” の前に “cudaThreadSynchronize();” を追加した。

```
for (i=0;i<Ak;i++) {  
    for (j=0;j<Bk;j++) {  
        puremul(A+i*m*n,B+j*n*p,C+m*p*(j+Bk*i),  
        lda,ldb,ldc);  
    }  
}
```

図 d-1: 処理 II) のプログラム

```

j = 0;
for (i=1; i<=Ak*Bk; i++) {
    a_array[i-1] = A+j*m*n;
    if (i % Bk == 0) j++;
}
j = 0;
for (i=1; i<=Ak*Bk; i++) {
    b_array[i-1] = B+j*n*p;
    j++;
    if (i % Bk == 0) j=0;
}
for (i=0; i<Ak*Bk; i++) {
    c_array[i] = C+i*m*p;
}
cblas_dgemm_batch (CblasColMajor, chn, chn, m, p, n, one,
    a_array, lda, b_array, ldb, zero, c_array, m1, GRP_COUNT, size_per_group );

```

図 d-2: Batched BLAS を適用させた処理 II) 部分のプログラム (提案方式)

ここで、尾崎の方法、提案方式及び従来方式についてまとめる。

- 尾崎の方法：BLAS 等の高速な行列積ルーチンを適用可能な高精度行列積アルゴリズム
- 提案方式：尾崎の方法に Batched BLAS を適用。
- 従来方式：尾崎の方法に通常の BLAS を適用。
- Batched BLAS：同じ BLAS ルーチンを別々に複数回呼び出すのではなく、同時にまとめて呼び出すことができる機能を持った BLAS。

図 d-3、図 d-4 に結果を示す。なお、図中の error free は処理 I) の時間、kernel は処理 II) の時間、other kernel はこの 2 つの時間以外の時間を示す。

図 d-3、図 d-4 から、提案手法を用いた場合、行列サイズが N=50 の時 (図 d-3) は CPU 環境で最大 58.9% まで、GPU 環境ではサイズが N=100 の時 (図 d-4) に最大で 25.7% まで実行時間が短縮された。

以上により、本業務の超高性能計算環境向けチューニングとして、Batched BLAS を利用することで性能をチューニングする実装手法を開発したことを示した。さらに実際の計算機環境で、本実装手法の有効性を示すことに成功した。

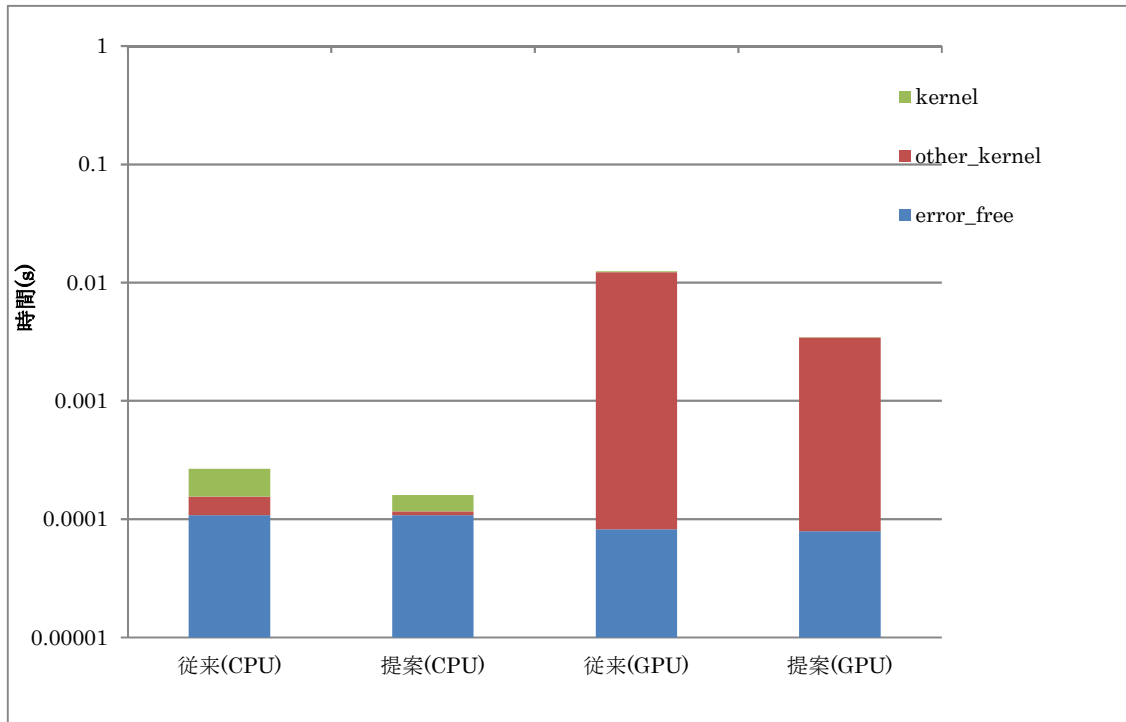


図 d-3: N=50 での CPU, GPU 環境のルーチン全体の演算時間

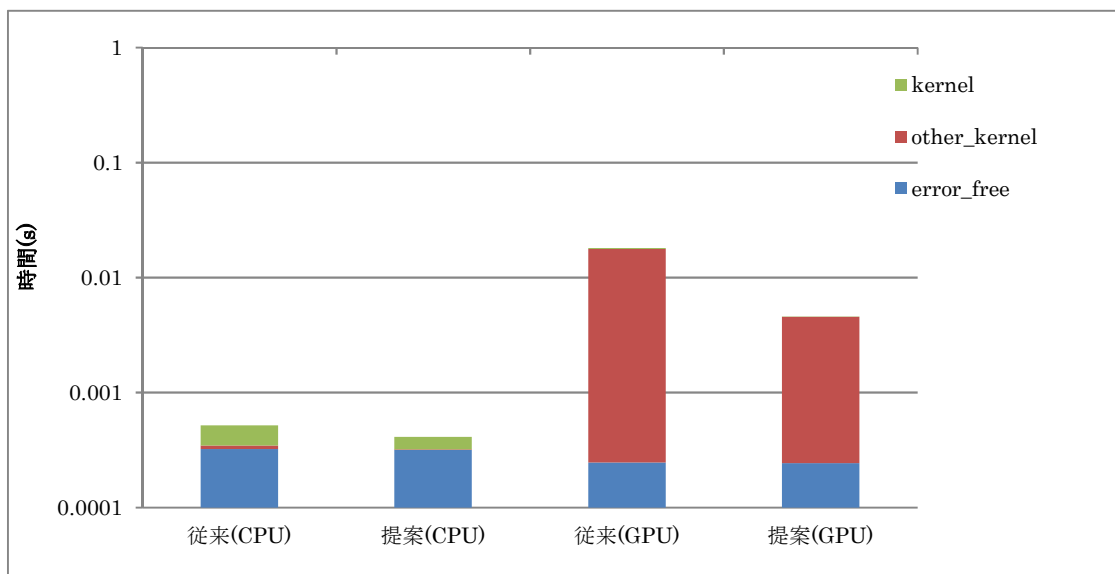


図 d-4: N=100 での CPU, GPU 環境のルーチン全体の演算時間

次に、演算性能の観点から提案手法との評価を行った。図 d-5 に、CPU および GPU 環境での演算性能を示す。

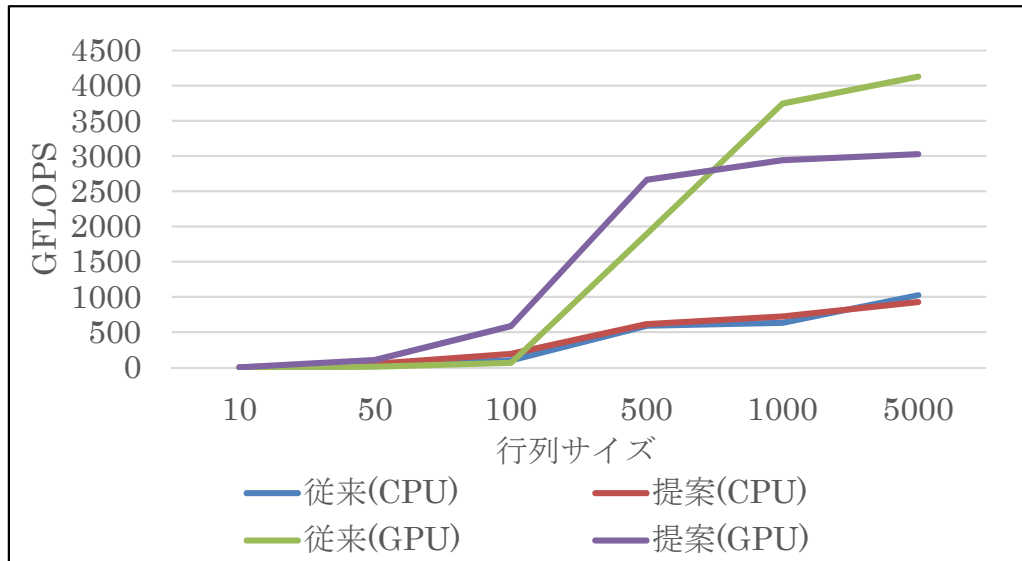


図 d-5: CPU および GPU 環境での演算性能

図 d-5 から、行列サイズが大きくなると全体として演算性能は向上するが、提案手法の演算性能が従来手法に比べて劣ることが観測された。N = 5000 のとき従来手法では、CPU 環境、GPU 環境ともに理論性能に対して 8 割ほどの高い演算性能が出ていることを確認した。CPU 環境においては、行列サイズに関わらず、従来手法と提案手法の差はあまりないが、GPU 環境では、行列サイズによって従来手法と提案手法の演算性能が逆転するため、行列サイズに応じた手法の切り替えが有効となる。

## (2) 線形計算ライブラリの整備

線形計算ライブラリの整備として、前述のチューニングの知見を活用し、基盤としての主要なライブラリ群整備を行った。具体的には、前年度開発・公開した尾崎の方法の高精度行列-行列積を実装した線形計算ライブラリ DHPMM\_F: High-precision Matrix Multiplication with Faithful Rounding (高精度行列積プログラム) Version Alpha に適用可能な実装（関数群）を整備した。具体的には、以下のインタフェースに対応する関数群を整備した。

- cuSPARSE を用いた CRS (Compressed Row Storage) 形式の SpMV (Sparse Matrix-Vector Multiplication、疎行列-ベクトル積) 演算のインタフェース
- cuSPARSE を用いた CRS 形式の SpMM (Sparse Matrix-Matrix Multiplication、疎行列-行列積) 演算のインタフェース

## e) 超高性能計算環境向け高精度数値線形代数アルゴリズムの開発

連立一次方程式について、前年度開発に成功した残差反復法を利用し、高精度な近似解とその精密な誤差上限（誤差の過大評価がほとんど無い結果）を得る実装を行い、多くの問題で相対精度が  $10^{-16}$  程度となった。これは倍精度浮動小数点数のほぼ限界の精度であり、非常に高精度の数値解が得られたことを意味する。また速度面について、近似計算に要した時間と Oishi-Rump の手法(2002)をベースにした精度保証法を分散並列計算で実装したものに要した時間の比をまとめた (表 e-1 と e-2)。理論計算比は 9 倍であるにも関わらず、時間の比は大規模問題では 4 倍程度となった。行列積の計算が主である精度保証は並列分散環境においてもパフォーマンスが出やすいことが理由である。



表 e-1: 計算時間の比 (京コンピュータ)

| 問題のサイズ    | ノード数  | 時間比  |
|-----------|-------|------|
| 300,000   | 400   | 7.07 |
| 600,000   | 1600  | 6.32 |
| 1,200,000 | 6400  | 5.33 |
| 2,400,000 | 25600 | 4.07 |

表 e-2: 計算時間の比 (FX100、名古屋大学)

| 問題のサイズ  | ノード数 | 時間比  |
|---------|------|------|
| 120,000 | 36   | 5.09 |
| 240,000 | 144  | 4.74 |
| 360,000 | 324  | 4.50 |
| 480,000 | 576  | 4.11 |

また、京や FX100 において線形計算ライブラリを開発した富士通と連携し、浮動小数点演算の丸めモードを MPI 通信利用下で正しく活かすように実装できた。さらに、前年度に設計方針を固めた Interval PBLAS について、今年度は PBLAS の Level 1 に対応するルーチンの実装を行った。

## ②プロジェクトの総合的推進

代表機関及び分担機関において、チーム内ミーティングを計 5 回（平成 30 年 4 月、7 月、10 月、平成 31 年 1 月、3 月）開催した。また、アプリケーションへの展開のため、複数の外部有識者と打ち合わせを行った。さらに、国際会議 SC18（ダラス、平成 30 年 11 月 11 日～16 日）のエキシビションにおいて本プロジェクトの広報を実施し、本プロジェクトの成果を発表した。さらに、アプリケーション分野の開拓及び成果報告のため、昨年度に引き続き「第 2 回 精度保証付き数値計算の実問題への応用研究集会」（広島、平成 30 年 12 月 1 日～2 日）を開催した。

研究集会では、HPC 関係の研究者をはじめ、自動微分の研究者やプログラム検証の研究者など様々な研究者に講演をして頂いた。また、本事業の成果報告を実施し、意見交換を行った。

### 4-3. 活動（研究会等）

| 年月日           | 場所            | 名称                           | 概要                                                        |
|---------------|---------------|------------------------------|-----------------------------------------------------------|
| 2018/4/6      | 東京女子大学        | 課題チーム内ミーティング                 | 年度初めとして、研究課題チームの全体的な遂行方法と各分担機関の 2018 年度の研究推進方法について確認を行った。 |
| 2018/7/2      | 東京女子大学        | 課題チーム内ミーティング                 | 各分担機関の研究進捗状況について、中間報告的なミーティングを行った。                        |
| 2018/10/5     | 東京女子大学        | 課題チーム内ミーティング                 | 7 月に引き続き、各分担機関の研究進捗状況について、中間報告的なミーティングを行った。               |
| 2018/11/11-16 | ダラス・アメリカ      | 国際会議 SC18 におけるアウトリーチ         | 国際会議 SC18 の研究展示において、本事業の研究内容を周知するアウトリーチ活動を行った。            |
| 2018/12/1-2   | 広島インテリジェントホテル | 第 2 回 精度保証付き数値計算の実問題への応用研究集会 | 研究集会を主催し、アプリケーション分野の開拓のため精度保証の応用分野の研究者を集めて講演及び議論を行った。     |

|           |        |              |                                                        |
|-----------|--------|--------------|--------------------------------------------------------|
|           | (広島市)  | (NVR 2018)   |                                                        |
| 2019/1/11 | 東京女子大学 | 課題チーム内ミーティング | 各分担機関の2018年度の研究進捗状況及び2019年度の見通しについてミーティングを行った。         |
| 2019/3/22 | 東京女子大学 | 課題チーム内ミーティング | 1月に引き続き、各分担機関の2018年度の研究進捗状況及び2019年度の見通しについてミーティングを行った。 |

#### 4-4. 実施体制

| 業務項目                                  | 担当機関        | 担当責任者                 |
|---------------------------------------|-------------|-----------------------|
| ①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  |             |                       |
| a) 超高性能計算環境向け精度保証付き数値計算法の開発           | 学校法人東京女子大学  | 現代教養学部 教授<br>荻田 武史    |
| b) アプリケーションソフトウェアの高精度化                | 学校法人東京女子大学  | 現代教養学部 教授<br>荻田 武史    |
| c) ポスト「京」に向けた精度保証付き数値計算アルゴリズムの開発及び実装  | 学校法人早稲田大学   | 基幹理工学部 教授<br>柏木 雅英    |
| d) ポスト「京」に向けた超高性能ライブラリの整備及び高性能実装技法の開発 | 国立大学法人名古屋大学 | 情報基盤センター 教授<br>片桐 孝洋  |
| e) 超高性能計算環境向け高精度数値線形代数アルゴリズムの開発       | 学校法人芝浦工業大学  | システム理工学部 准教授<br>尾崎 克久 |
| ②プロジェクトの総合的推進                         | 学校法人東京女子大学  | 現代教養学部 教授<br>荻田 武史    |

## 様式第 2 1

## 学 会 等 発 表 実 績

委託業務題目「基礎科学のフロンティア ― 極限への挑戦（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）」

機関名 学校法人 東京女子大学

## 1. 学会等における口頭・ポスター発表

| 発表した成果（発表題目、口頭・ポスター発表の別）                                                                    | 発表者氏名                                                                   | 発表した場所（学会等名）                                                                                       | 発表した時期  | 国内・外の別 |
|---------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------|---------|--------|
| 値域が共役空間となる楕円型作用素に対する精度保証付き可逆性検証<br>(口頭)                                                     | 木下武彦、渡部善隆、中尾充宏                                                          | 東京大学<br>(日本数学会年会)                                                                                  | 2018年3月 | 国内     |
| 近似理論から計算機援用証明への道 ― 偏微分問題の精度保証―<br>(口頭)                                                      | 中尾充宏                                                                    | 早稲田大学<br>(第18回早稲田大学 数学・応用数理談話会)                                                                    | 2018年6月 | 国内     |
| High-performance implementations of reproducible and accurate matrix-multiplication<br>(口頭) | Daichi Mukunoki,<br>Roman Iakymchuk,<br>Stef Graillat,<br>Takeshi Ogita | ETH Zurich,<br>10th International Workshop on Parallel Matrix Algorithms and Applications (PMAA18) | 2018年6月 | 国外     |
| Accurate eigenvector computations for clustered eigenvalues by iterative refinement<br>(口頭) | Takeshi Ogita                                                           | ETH Zurich,<br>10th International Workshop on Parallel Matrix Algorithms and Applications          | 2018年6月 | 国外     |

|                                                                                           |                                |                                                                                                                                                  |         |    |
|-------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------|----|
|                                                                                           |                                | (PMAA18)                                                                                                                                         |         |    |
| Accurate Numerical Solutions of Large-Scale Linear Systems and Their Verification<br>(口頭) | Katsuhisa Ozaki, Takeshi Ogita | ETH Zurich, 10th International Workshop on Parallel Matrix Algorithms and Applications                                                           | 2018年6月 | 国外 |
| Generation of large scale matrices for numerical examples<br>(口頭)                         | Takeshi Terao, Katsuhisa Ozaki | ETH Zurich, 10th International Workshop on Parallel Matrix Algorithms and Applications                                                           | 2018年6月 | 国外 |
| Accurate and Reproducible Matrix Multiplication<br>(口頭)                                   | Katsuhisa Ozaki                | Universität Rostock, 11th Summer Workshop on Interval Methods                                                                                    | 2018年7月 | 国外 |
| Overview of kv - a C++ library for verified numerical computation<br>(口頭)                 | Masahide Kashiwagi             | Waseda University, The 18th International Symposium on Scientific Computing, Computer Arithmetic and Verified Numerical Computations (SCAN 2018) | 2018年9月 | 国内 |
| Two verification methods for linear systems using H-matrix                                | Atsushi Minamihata, Takeshi    | Waseda University, The 18th                                                                                                                      | 2018年9月 | 国内 |

|                                                                                                                                                |                                                                         |                                                                                                                                                                                      |         |    |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------|----|
| (口頭)                                                                                                                                           | Ogita,<br>Siegfried M.<br>Rump,<br>Shin'ichi<br>Oishi                   | International<br>Symposium on<br>Scientific<br>Computing,<br>Computer<br>Arithmetic and<br>Verified<br>Numerical<br>Computations<br>(SCAN 2018)                                      |         |    |
| Verification method<br>for solution of<br>symmetric saddle point<br>linear system with<br>null space method<br>(口頭)                            | Ryo<br>Kobayashi,<br>Atsushi<br>Minamihata<br>and<br>Shin'ichi<br>Oishi | Waseda<br>University,<br>The 18th<br>International<br>Symposium on<br>Scientific<br>Computing,<br>Computer<br>Arithmetic and<br>Verified<br>Numerical<br>Computations<br>(SCAN 2018) | 2018年9月 | 国内 |
| On the a priori error<br>estimates of finite<br>dimensional<br>projections for<br>applications to<br>numerical<br>verification of PDEs<br>(口頭) | Mitsuhiro T.<br>Nakao                                                   | Waseda<br>University,<br>The 18th<br>International<br>Symposium on<br>Scientific<br>Computing,<br>Computer<br>Arithmetic and<br>Verified<br>Numerical<br>Computations<br>(SCAN 2018) | 2018年9月 | 国内 |

|                                                                                                                               |                                                                 |                                                                                                                                                  |         |    |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------|----|
| On the constructive error estimates of a full-discrete approximation for time-periodic solution of the heat equations<br>(口頭) | Takuma Kimura, Teruya Minamoto, Mitsuhiro T. Nakao              | Waseda University, The 18th International Symposium on Scientific Computing, Computer Arithmetic and Verified Numerical Computations (SCAN 2018) | 2018年9月 | 国内 |
| Estimation of Sobolev embedding constant on a bounded convex domain<br>(口頭)                                                   | Makoto Mizuguchi, Kazuaki Tanaka, Kouta Sekine, Shin'ichi Oishi | Waseda University, The 18th International Symposium on Scientific Computing, Computer Arithmetic and Verified Numerical Computations (SCAN 2018) | 2018年9月 | 国内 |
| Accurate and cost-efficient triangular solver<br>(口頭)                                                                         | Roman Iakymchuk, Pedro Valero-Lara, Daichi Mukunoki             | Waseda University, The 18th International Symposium on Scientific Computing, Computer Arithmetic and Verified Numerical Computations (SCAN 2018) | 2018年9月 | 国内 |

|                                                                                    |                                      |                                                                                                                                                  |         |    |
|------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------|----|
| High Performance Implementation of Accurate Matrix Multiplications on GPUs<br>(口頭) | Daichi Mukunoki, Takeshi Ogita       | Waseda University, The 18th International Symposium on Scientific Computing, Computer Arithmetic and Verified Numerical Computations (SCAN 2018) | 2018年9月 | 国内 |
| 2階楕円型作用素に対する逆作用素ノルム評価の改良<br>(口頭)                                                   | 渡部善隆, 木下武彦, 中尾充宏                     | 名古屋大学 (日本応用数学会年会)                                                                                                                                | 2018年9月 | 国内 |
| 高精度行列 - 行列積のためのBatched BLASおよび疎行列演算を用いた実装方式のGPU環境での性能評価<br>(口頭)                    | 石黒史也, 片桐孝洋, 大島聡史, 永井亨, 荻野正雄          | 名古屋大学 (日本応用数学会年会)                                                                                                                                | 2018年9月 | 国内 |
| OpenMPの対象ループとスレッド数を変更する自動チューニング手法の評価<br>(口頭)                                       | 櫻井刀麻, 片桐孝洋, 永井亨, 荻野正雄                | 名古屋大学 (日本応用数学会年会)                                                                                                                                | 2018年9月 | 国内 |
| 2階線形楕円型作用素に対する可逆性検証と精度保証付きノルム評価の改善<br>(口頭)                                         | 渡部善隆, 木下武彦, 中尾充宏                     | 岡山大学 (日本数学会秋季総合分科会)                                                                                                                              | 2018年9月 | 国内 |
| コロニーフィンガープリントの機械学習に基づく真菌 <i>Aspergillus</i>                                        | 杉山由依, 前田義昌, 林泰圭, 原田学, 松永是, 吉野知子, 田中剛 | 金沢大学角間キャンパス (2018年電気化学秋季大会)                                                                                                                      | 2018年9月 | 国内 |

|                                                                                                                               |                                                                |                                                                                                                                      |          |    |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------|----|
| 属の菌種判別法の開発<br>(口頭)                                                                                                            |                                                                |                                                                                                                                      |          |    |
| Performance<br>Evaluation of<br>Verification Methods<br>for Linear Systems on<br>Super Computers<br>(口頭)                      | Katsuhisa<br>Ozaki,<br>Takeshi<br>Ogita                        | Muroran Institute<br>of Technology,<br>The 37th JSST<br>Annual<br>International<br>Conference on<br>Simulation<br>Technology         | 2018年9月  | 国内 |
| Generation of<br>Large-Scaled Matrices<br>with Specified<br>Eigenvalues for<br>Parallel and<br>Distributed Computing<br>(口頭)  | Takeshi<br>Terao,<br>Katsuhisa<br>Ozaki                        | Muroran Institute<br>of Technology,<br>The 37th JSST<br>Annual<br>International<br>Conference on<br>Simulation<br>Technology         | 2018年9月  | 国内 |
| High Performance<br>Implementation of<br>Reproducible BLAS<br>Routines with Tunable<br>Accuracy Using Ozaki<br>Scheme<br>(口頭) | Daichi<br>Mukunoki,<br>Takeshi<br>Ogita,<br>Katsuhisa<br>Ozaki | Kay Bailey<br>Hutchison<br>Convention Center<br>Dallas,<br>Computational<br>Reproducibility<br>at Exascale 2018<br>(CRE2018) at SC18 | 2018年11月 | 国外 |
| High Performance<br>Accuracy Assurance<br>Toward to Post-K<br>Computer<br>(ポスター)                                              | Takahiro<br>Katagiri,<br>Takeshi<br>Ogita                      | Kay Bailey<br>Hutchison<br>Convention Center<br>Dallas,<br>SC18                                                                      | 2018年11月 | 国外 |
| 半線形熱方程式の解の<br>精度保証付き数値計算<br>法について<br>(口頭)                                                                                     | 水口信, 関根<br>晃太, 中尾充<br>宏, 大石進一                                  | 広島インテリジェ<br>ントホテル<br>(第2回 精度保証付<br>き数値計算の実問<br>題への応用研究集<br>会)                                                                        | 2018年12月 | 国内 |
| 常微分方程式の精度保<br>証パッケージの評価と<br>今後の展望<br>(口頭)                                                                                     | 柏木雅英                                                           | 広島インテリジェ<br>ントホテル<br>(第2回 精度保証付<br>き数値計算の実問<br>題への応用研究集<br>会)                                                                        | 2018年12月 | 国内 |



|                                                                   |                                        |                                                                                       |          |    |
|-------------------------------------------------------------------|----------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------|----------|----|
| H行列を用いた連立一次方程式の精度保証付き数値計算法<br>(口頭)                                | 南畑淳史, 荻田武史,<br>Siegfried M. Rump, 大石進一 | 広島インテリジェントホテル<br>(第2回 精度保証付き数値計算の実問題への応用研究集会)                                         | 2018年12月 | 国内 |
| 線形化作用素の逆作用素のノルム評価を利用しない楕円型偏微分方程式の解に対する計算機援用証明法<br>(口頭)            | 関根 晃太,<br>中尾充宏                         | 広島インテリジェントホテル<br>(第2回 精度保証付き数値計算の実問題への応用研究集会)                                         | 2018年12月 | 国内 |
| 大規模線形計算に関する精度保証付き数値計算<br>(口頭)                                     | 尾崎 克久                                  | 広島インテリジェントホテル<br>(第2回 精度保証付き数値計算の実問題への応用研究集会)                                         | 2018年12月 | 国内 |
| マルチコアCPUおよびGPUにおける高精度行列-行列積のための疎行列演算の実装と評価<br>(口頭)                | 片桐孝洋、石黒史也                              | 広島インテリジェントホテル<br>(第2回 精度保証付き数値計算の実問題への応用研究集会)                                         | 2018年12月 | 国内 |
| 尾崎スキームによる高精度かつ再現性のあるBLASルーチンの実装と評価<br>(口頭)                        | 棕木大地, 荻田武史, 尾崎克久                       | 広島インテリジェントホテル<br>(第2回 精度保証付き数値計算の実問題への応用研究集会)                                         | 2018年12月 | 国内 |
| 分散並列計算環境における行列・ベクトル積の高精度な実装と丸め誤差解析<br>(口頭)                        | 小林亮太, 尾崎克久                             | 沖縄産業支援センター<br>(第167回 ハイパフォーマンスコンピューティング研究会)                                           | 2018年12月 | 国内 |
| Emulation of up/down arithmetic using rounding to nearest<br>(口頭) | Masahide Kashiwagi                     | The Westin Rusutsu resort meeting room, Hokkaido, Numerical Verification (NIVEA) 2019 | 2019年2月  | 国内 |
| CholeskyQR algorithms for ill-conditioned matrices on             | Takeshi Terao, Katsuhisa               | National Sun Yat-sen University,                                                      | 2019年2月  | 国外 |

|                                                                        |                                                       |                                                                                             |         |    |
|------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------|---------|----|
| large-scale parallel systems<br>(口頭)                                   | Ozaki,<br>Takeshi<br>Ogita                            | 2019 Conference on Advanced Topics and Auto Tuning in High-Performance Scientific Computing |         |    |
| 第二種ベッセル関数の精度保証付き数値計算法<br>(口頭)                                          | 工藤直輝, 柏木雅英                                            | 筑波大学<br>(日本応用数理学会第15回研究部会連合発表会)                                                             | 2019年3月 | 国内 |
| OzBLAS: Accurate and Reproducible BLAS Based on Ozaki Scheme<br>(ポスター) | Daichi Mukunoki,<br>Takeshi Ogita,<br>Katsuhisa Ozaki | San Jose McEnery Convention Center,<br>GPU Technology Conference (GTC 2019)                 | 2019年3月 | 国外 |

## 2. 学会誌・雑誌等における論文掲載

| 掲載した論文（発表題目）                                                                                              | 発表者氏名                                                                                                                        | 発表した場所<br>(学会誌・雑誌等名)                                 | 発表した時期 | 国内・外の別 |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------|--------|--------|
| Colony Fingerprint-Based Discrimination of <i>Staphylococcus</i> species with Machine Learning Approaches | Yoshiaki Maeda, Yui Sugiyama, Atsushi Kogiso, Tae-Kyu Lim, Manabu Harada, Tomoko Yoshino, Tadashi Matsunaga, Tsuyoshi Tanaka | Sensors, Vol. 18, No. 9, E2789 (12 pages)            | 2018年  | 国外     |
| Iterative refinement for symmetric eigenvalue decomposition                                               | Takeshi Ogita, Kensuke Aishima                                                                                               | Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics, | 2018年  | 国外     |

|                                                                                                                     |                                                                                                          |                                                                                      |       |    |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------|-------|----|
|                                                                                                                     |                                                                                                          | Vol. 35, Issue 3,<br>pp. 1007-1035                                                   |       |    |
| Threaded Accurate<br>Matrix-Matrix<br>Multiplications with<br>Sparse Matrix-Vector<br>Multiplications               | Shuntaro<br>Ichimura,<br>Takahiro<br>Katagiri,<br>Katsuhisa<br>Ozaki,<br>Takeshi<br>Ogita, Toru<br>Nagai | Proceedings of<br>IEEE IPDPSW2018,<br>pp. 1093-1102                                  | 2018年 | 国外 |
| Level-3 BLASに基づく高<br>精度行列積計算法によ<br>る高精度かつ再現性の<br>あるBLASルーチンの実<br>装とその最適化                                            | 椋木大地,<br>荻田武史,<br>尾崎克久                                                                                   | 情報処理学会研究<br>報告: ハイパフォ<br>ーマンスコンピュ<br>ーティング,<br>Vol. 2018-HPC-166,<br>No. 9, pp. 1-8  | 2018年 | 国内 |
| GPGPUによる高精度行列<br>- 行列積アルゴリズム<br>のためのBatched BLASを<br>用いた実装方式の提案                                                     | 石黒史也,<br>片桐孝洋,<br>大島聡史,<br>永井亨, 荻<br>野正雄                                                                 | 情報処理学会研究<br>報告: ハイパフォ<br>ーマンスコンピュ<br>ーティング,<br>Vol. 2018-HPC-165,<br>No. 32, pp. 1-8 | 2018年 | 国内 |
| Iterative refinement<br>for symmetric<br>eigenvalue<br>decomposition II:<br>clustered eigenvalues                   | Takeshi<br>Ogita,<br>Kensuke<br>Aishima                                                                  | Japan Journal of<br>Industrial and<br>Applied<br>Mathematics,<br>published online    | 2019年 | 国外 |
| An alternative<br>approach to norm bound<br>computation for<br>inverses of linear<br>operators in Hilbert<br>spaces | Takehiko<br>Kinoshita,<br>Yoshitaka<br>Watanabe,<br>Mitsuhiro T.<br>Nakao                                | Journal of<br>Differential<br>Equations<br>(印刷中)                                     | 2019年 | 国外 |
| An improved method for<br>verifying the<br>existence and bounds of<br>the inverse of                                | Yoshitaka<br>Watanabe,<br>Takehiko<br>Kinoshita,                                                         | Japan Journal of<br>Industrial and<br>Applied<br>Mathematics                         | 2019年 | 国内 |

|                                                                    |                       |       |  |  |
|--------------------------------------------------------------------|-----------------------|-------|--|--|
| second-order linear<br>elliptic operators<br>mapping to dual space | Mitsuhiro T.<br>Nakao | (印刷中) |  |  |
|--------------------------------------------------------------------|-----------------------|-------|--|--|

「基礎科学のフロンティアー 極限への挑戦  
(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)」

実施計画

単独サブ課題

平成 30 年 3 月 26 日  
東京女子大学  
荻田武史

## 目次

|                                                |    |
|------------------------------------------------|----|
| 1. 実施概要 .....                                  | 1  |
| (1) 目的・意義 .....                                | 1  |
| (2) 研究開発内容.....                                | 2  |
| (3) 目標・期待される成果 .....                           | 3  |
| (4) 周辺領域への波及効果、課題全体における計算科学やシミュレーションの位置づけ..... | 4  |
| (5) 「京」でできていること、ポスト「京」でなければならないこと .....        | 4  |
| (6) 年次計画 .....                                 | 6  |
| (7) 実施体制 .....                                 | 7  |
| (8) 必要計算資源.....                                | 8  |
| 2. 採択時の留意事項への対応状況.....                         | 9  |
| 3. 中間評価における指摘事項への対応状況 .....                    | 10 |

## 1. 実施概要

### (1) 目的・意義

#### <概要>

本研究課題では、ポスト「京」におけるハイパフォーマンス・コンピューティングに「精度」の軸を新たに導入し、正しい計算結果を得るために最も高性能な計算環境を構築するべきであるというスーパーコンピュータの新しい目標を掲げ、そのために必要なベンチマークの設定を学問的に確立する。本研究グループによってこれまでに開発されてきた独創的な数値計算法である線形計算の高速精度保証法やエラーフリー変換法を用いると、ポスト「京」において、数学的に正しい計算結果を得ることが実用的に可能となる。これによって、「スーパーコンピュータでしか扱うことのできない超大規模計算を必要としながら、計算の精度不足に起因して解くことが困難であった様々な難問」を解決することができる超高性能計算環境を創成する。また、そのような超高性能計算環境において、精度保証を科学的・社会的意義のある具体的な計算科学のアプリケーションに適用し、その有効性を示す。

#### <詳細>

本研究課題の目的は、ポスト「京」において、精度が保証された計算結果を実用的に得られるような超高性能計算環境を構築することである。具体的には、ポスト「京」で実行される様々な数値シミュレーションにおいて、数値計算による計算誤差の問題が解消されることによって、シミュレーションサイエンスの品質を向上させ、さらに想定外の現象が発生する可能性を低減することが可能となる。すなわち、本研究課題の遂行は、人が安心して生活できる社会基盤の構築に直結する。

たとえば、産業界における製品開発や非破壊検査等のための計算工学シミュレーションや、地震や津波などの災害シミュレーションは、日本に限らず世界中で盛んに行われているが、計算誤差の観点から高精度なシミュレーションの実現をしている例は皆無である。これは、計算機によって問題の近似的な解を得ることよりも、その近似解の検算のほうがはるかに困難かつ計算資源を必要とする、と考えられており、それが高性能計算分野の常識であるからである。実際、これは1990年代までは事実であったが、本研究グループが2000年代から切り拓いてきた高速で実用的な精度保証付き数値計算法やエラーフリー変換に基づく高精度数値計算法をベースとして、今、ポスト「京」によって、この常識を打ち破る時期が到来している。すなわち、ポスト「京」において、高速性と高精度性を融合した超高性能計算環境の創成を世界に先駆けて達成することは、スーパーコンピュータに質的転換をもたらし、我が国の高い科学技術力を国内外に示すことになる。

大規模数値計算を行う高性能計算分野においては、問題の大規模化に伴って計算誤差が累積しやすくなり、これが今後、大きな問題となってくる。たとえば、計算機上で標準的に用いられる32ビットの浮動小数点演算では、100万次元程度の密行列系線形問題に対して数値計算を行うと、問題自身は比較的良条件で解きやすい問題であったとしても、誤差解析の結果から理論的には1桁も正しくないような計算結果が得られることが分かっている。また、計算誤差の単なる累積だけでなく、問題の困難さが条件数として行列に反映されるため、問題自身が悪条件であれば、より小規模の問題においても意味のある解を得られなくなる。このように、計算処理の高速性のみを追求するような高性能計算の方針は、既に限界を迎えつつある。

このような状況において、本研究課題によって提案するような、「精度」の軸が導入された超高性能

計算環境は、現在、世界のどこにも存在しないものであるため、この実現は極めてインパクトが高く、「世界に前例のない高速性を持つスーパーコンピュータ」と「世界をリードしている高精度性を持つ数値計算法」の融合を目的とする本研究課題の成果が、高性能計算分野及び精度保証付き数値計算分野において世界をリードするものとなることは明らかである。

さらに、このような超高性能計算環境をベースとして、基礎科学における計算誤差に起因した各種の難問（アプリケーション）に本研究成果が応用されることによって、世界初の研究成果が創出されることが期待される。そのような具体的なアプリケーションへの展開として、計算物質科学分野の研究者と連携し、量子物質計算に現れる大規模な固有値問題において精度保証付き数値計算が数学的に正しい結果を与えることの有効性を示す。より具体的には、系が大規模化することによって固有値問題が悪条件化し、固有値が近接して分離できなくなる場合がある。数理的（数値計算法）には、固有値を分離できないということは

- ・ 固有値の数や順番を特定できない。
- ・ 近接固有値に対応する固有ベクトルを精度良く計算できていない。

ということである。物理的（計算物質科学的）には以下の問題が発生する。

- ・ 固有値の個数は高分子中の電子の数に対応するため、固有値の数や順番を特定できなければバンドギャップを正しく計算できない。
- ・ 固有ベクトルは高分子の電子状態の波動関数に対応するため、固有ベクトルが正しく計算できないと、物質の電子状態を正しく計算できない。

すなわち、対象となる問題の物性を間違えて把握してしまう可能性がある。精度保証を導入すると、そのような間違いを防ぐことができ、さらに、近似解（固有値、固有ベクトル）の精度を改善して固有値の分離を成功させることができる可能性がある。

流体力学等で連続系を取り扱う場合は、中間固有値の分離ができなかったとしても、全体としてはほとんど影響が無い場合もあるが、我々が解析対象としている量子物質計算では、それが多大な影響を及ぼす場合がある。本問題は、量子力学にもとづく電子波計算であり、これは先進的なデバイス開発の基礎となる物性（例えば、金属や半導体の性質）を解析するための基盤となる。

## （２）研究開発内容

### ＜概要＞

以下の研究開発を実施する。

1. 超高性能計算環境向け精度保証付き数値計算法の開発
2. 超高性能計算環境向け高精度数値線形代数アルゴリズムの開発
3. ポスト「京」に向けた精度保証付き数値計算アルゴリズムの開発及び実装
4. ポスト「京」に向けた超高性能線形計算ライブラリの整備及び高性能実装技法の開発
5. アプリケーションソフトウェアの高精度化及び精度保証化

### ＜詳細＞

東京女子大学では、研究代表者の荻田が「研究統括」を行い、さらに、荻田を中心として「超高性能計算環境向け精度保証付き数値計算法の開発」を行う。具体的には、連立一次方程式、固有値問題、



特異値問題等の線形問題を中心に、超高性能計算環境向けの高精度な精度保証付き数値計算法を開発する。また、超高性能線形計算ライブラリのデザインを行う。

早稲田大学では、分担者の柏木を中心として「ポスト「京」に向けた精度保証付き数値計算アルゴリズムの開発及び実装」を行う。具体的には、シミュレーションサイエンスへの適用を見据えた精度保証付き数値計算法の開発及び超高性能計算環境への実装を行う。

名古屋大学では、分担者の片桐を中心として「ポスト「京」に向けた超高性能線形計算ライブラリの整備及び高性能実装技法の開発」を行う。具体的には、線形問題の高精度な精度保証付き数値計算法について、高性能実装技法の開発及び高性能計算環境において実装を行い、超高性能線形計算ライブラリを整備する。

芝浦工業大学では、分担者の尾崎を中心として「超高性能計算環境向け高精度数値線形代数アルゴリズムの開発」を行う。具体的には、超高性能計算環境向けに、線形問題の高精度な精度保証付き数値計算のカーネルとなる行列乗算の高精度計算手法を中心として、高精度数値線形代数アルゴリズムを開発する。

これらに加えて、それぞれ相互に協働可能な箇所は、積極的に共同研究を進める。特に、本研究課題の目標である具体的なシミュレーションサイエンスのターゲットとして、量子物質計算の高精度化及び精度保証化を目指し、これを実現するために各実施機関で以下のような連携を行う。

- a) 東京女子大学と早稲田大学を中心として、計算物質科学分野の研究者と連携して、量子物質計算の高精度化及び精度保証化のフレームワークを構築する。
- b) 芝浦工業大学を中心として、a)で構築されたフレームワークをベースとして、高精度化及び精度保証化した量子物質計算のアプリケーション実装を行う。
- c) 名古屋大学を中心として、b)で実装された精度保証付き量子物質計算のアプリケーションを高性能計算環境向けに最適化し、完成版コードを整備する。

### (3) 目標・期待される成果

課題全体として達成すべき成果を以下のように定める。

- ・ 科学的・社会的意義のある具体的な計算科学のアプリケーションにおいて精度保証の有効性を示す。

これを実現するため、以下のように数値目標を設定する。

1. 密行列系で 100 万次元の線形問題に対して実用的（近似解の計算時間の数倍程度）な精度保証を可能とする。
2. 100 万次元規模の量子物質計算を実用的（問題の難しさに応じて、近似解の計算時間の数倍から数十倍程度）に精度保証付きで解くことが可能なアプリケーションを開発する。

#### <アウトプット成果>

平成 29 年度終了時には、上記の数値目標 1 について、100 万次元の密行列系連立一次方程式の精度保証を達成し、開発したライブラリの一部をオープンソースの試用版としてコードリリースするほか、名古屋大学情報基盤センターのスパコンにインストールし、ユーザに無償提供する。

本格実施フェーズ終了時には、上記の数値目標 2 について、開発した精度保証付き量子物質計算ア

アプリケーションのソースコードを公開する。また、その開発過程で作成する精度保証付きの汎用的な線形計算の主要な関数群をライブラリにまとめ、Ver. 1.00 のオープンソースコードとしてリリースする。さらに、名古屋大学情報基盤センターのスパコンに開発したライブラリをインストールしてユーザに無償提供し、普及活動を進める。

ポスト「京」運用開始5年後までに、本研究成果のアウトリーチ活動を展開することによって、他に類を見ない「精度」の軸を持ったポスト「京」の超高性能性を世界中に示すことが可能となる。特に、次世代の先進的なデバイス開発に貢献するような大規模量子物質計算の精度保証法を確立し、ポスト「京」において精度保証付き数値計算の有効性を明らかにすることにより、解くべき問題の性質に応じて計算資源の割り当てを「計算の高速性」と「計算結果の信頼性」でバランスさせて両立させることの重要性が示される。

#### ＜アウトカム成果＞

ポスト「京」運用開始5年後までに、アウトプット成果として公開するライブラリが世の中に浸透し、精度に関する問題でこれまでに解くことが困難であった基礎科学における各種の難問に本研究成果が適用され始め、運用開始10年後にはいくつかのそういった難問が解決されることが期待される。特に、本研究課題のアウトプット成果である精度保証付き量子物質計算アプリケーションを公開することによって、ポスト「京」が「計算の高速性と信頼性の融合」を達成している世界で唯一の超高性能計算環境であることが示され、スーパーコンピューティング分野が今後進むべき方向性の1つとして、世界を先導する立場となる。

#### （4）周辺領域への波及効果、課題全体における計算科学やシミュレーションの位置づけ

本研究の成果を計算機のトップであるポスト「京」で示すことにより、超高性能計算環境の概念はスパコンからワークステーションやパソコンのレベルまでダウンサイジング化され、最終的には、あらゆる計算機上での様々な計算結果が精度保証化されるようになる。これにより、数値計算を必要とする諸分野において計算結果の品質が劇的に向上する。特に、量子物質計算のような計算科学の具体的なアプリケーションへの展開が可能であることが明らかになることによって、精度保証付き数値計算が数学的に正しい結果を与えることの有効性が周知されるため、量子物質計算に限らず、計算科学に関する様々な分野への応用が始まることが大いに期待できる。

精度保証付き数値計算は計算科学に属し、シミュレーションを応用とするものであるため、これらは基礎科学における極限の探究に貢献するための本研究課題の中心に位置する。

#### （5）「京」でできていること、ポスト「京」でなければならないこと

本研究グループは、「京」において、リソースの数パーセントを利用して10万次元の密行列系連立一次方程式に対する精度保証が可能であることを確認しているが、100万次元の問題を精度保証付きで解くためには、単純に見積もって10万次元の場合の1000倍の計算量が必要である。これに対して、ポスト「京」で使用可能なリソースの割合など様々な要素を考慮しても、実用的な計算時間で実行するためには、「京」の数十倍から百倍程度の演算性能が必要であるため、ポスト「京」でなければ実現できない。また、理化学研究所が「京」において100万次元の固有値問題を世界最高速で解いている

が、これを精度保証付きで実現するためには、「京」の数倍から数十倍のリソースが必要となるため、ポスト「京」でなければ実現できない。すなわち、密行列系で 100 万次元の問題を精度保証付きで実用的に解くことは、ポスト「京」で初めてできることである。

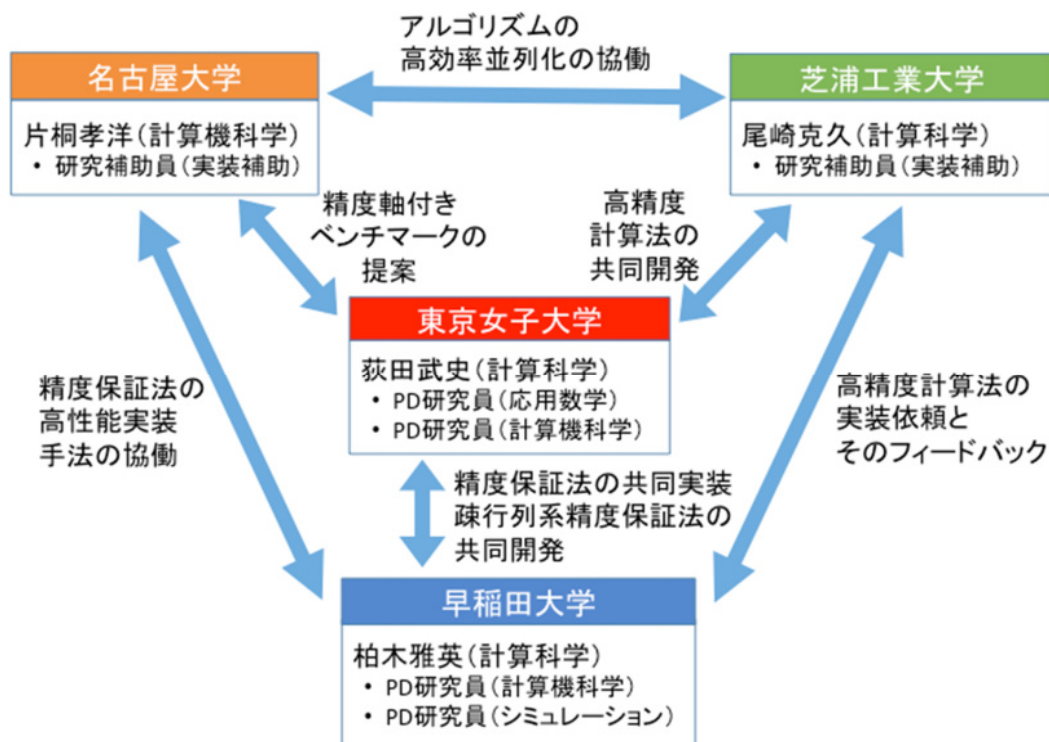
(6) 年次計画

|      |              |                                                                                  |
|------|--------------|----------------------------------------------------------------------------------|
| 課題全体 | 中間目標（平成29年度） | 密行列系で100万次元の線形問題に対して実用的（近似解の計算時間の数倍程度）な精度保証を可能とする。                               |
|      | 最終目標（平成31年度） | 100万次元規模の量子物質計算を実用的（問題の難しさに応じて、近似解の計算時間の数倍から数十倍程度）に精度保証付きで解くことが可能なアプリケーションを開発する。 |

| サブ課題名<br>(分担機関・責任者)                                  | 調査研究・準備研究フェーズ                                                                                                                   |                                                                                                                                            | 本格実施フェーズ                                                                                                                                                            |                                                                                                                                                                                      |
|------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|                                                      | 平成28年度                                                                                                                          | 平成29年度                                                                                                                                     | 平成30年度                                                                                                                                                              | 平成31年度                                                                                                                                                                               |
| 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<br>(東京女子大学・荻田武史) | <p>(目標)<br/>100万次元の線形問題に対する精度保証を可能とするアルゴリズムについて検証する。</p> <p>(実施内容)<br/>数値線形代数の精度保証付き数値計算アルゴリズムを京コンピュータ上で実装し、計算誤差の問題点の考察を行う。</p> | <p>(目標)<br/>100万次元の線形問題に対する精度保証を可能とする。</p> <p>(実施内容)<br/>前年度までに開発したアルゴリズムの大規模化、高精度化とその評価を行い、試用版コードをリリースする。また、精度保証付きベンチマーク手法の大枠の確立を目指す。</p> | <p>(目標)<br/>大規模線形問題に対し、問題の難しさに応じて、従来の近似計算の数倍から数十倍で精度保証を可能とする。</p> <p>(実施内容)<br/>ポスト京を想定した高速な精度保証アルゴリズムの開発と実装を行う。具体的には、汎用性を持つ線形計算ライブラリの主要な関数群を整備し、完成版コードをリリースする。</p> | <p>(目標)<br/>100万次元規模の量子物質計算を実用的（問題の難しさに応じて、近似解の計算時間の数倍から数十倍程度）に精度保証付きで解くことが可能なアプリケーションを開発する。</p> <p>(実施内容)<br/>前年度までに開発・実装した精度保証法を大規模な量子物質計算に適用し、精度保証の有用性を示す。また、開発したコードを整備し公開する。</p> |

## (7) 実施体制

本プロジェクトの実施体制は、東京女子大学（研究代表者：荻田武史）、早稲田大学（分担実施者：柏木雅英）、名古屋大学（分担実施者：片桐孝洋）、芝浦工業大学（分担実施者：尾崎克久）の4グループから成る。役割分担とその連携を以下の図にまとめる。



精度保証付き数値計算分野については荻田・柏木・尾崎が、スーパーコンピューティング分野については片桐が担当する。またポスドク研究員として、応用数学、計算機科学、シミュレーション等に精通した若手研究者が当プロジェクトの研究に専念する。これによって、理論・応用・実践のバランスが取れた構成となる。荻田・柏木・片桐・尾崎は互いの研究交流が活発であり、それぞれの得意分野・技術を熟知しているため、円滑に共同研究を推進することができる。

東京女子大学と早稲田大学では、それぞれポスドク研究員を1～2名ずつ雇用する。また、各研究機関で博士課程及び修士課程の研究補助員を1～2名ずつ雇用する。東京女子大学では、本研究課題の立ち上げに伴い、外部資金によるポスドク研究員の給与待遇改善を既に実施した。早稲田大学についても、外部資金による研究員制度が充実しているため、経済的な不安を解消し、研究に専念してもらうことが可能である。また、ポスドク研究員については、将来のステップアップを見据えて、規定の許容範囲の中で非常勤講師として教育経験も積むことが可能なようにする。本研究課題において雇用されたポスドク研究員や研究補助員は、本研究課題への参加を通じて、精度保証付き数値計算分野だけでなく、HPC分野及びシミュレーションサイエンスにおけるアプリケーション分野についても精通することが可能となるため、理論と実践の両面を兼ね備えた人材として育成される。これによって、数理科学、情報科学、スパコンセンター、企業の研究所等の幅広い分野において研究者としての次のポジションの獲得を狙うことが可能となる。また、これらの人材が、来るべきポストムーア時代の担い手になることも期待できる。

(8) 必要計算資源

「京」の計算資源量

(単位：ノード時間/年)

| H28 年度    | H29 年度    | H30 年度    | H31 年度    |
|-----------|-----------|-----------|-----------|
| 2,950,000 | 2,500,000 | 2,500,000 | 2,500,000 |

「京」以外の計算資源量

名古屋大学 FX100

(単位：ノード時間/年)

| H28 年度 | H29 年度 | H30 年度 | H31 年度 |
|--------|--------|--------|--------|
| 17,280 | 69,120 | 69,120 | 69,120 |

## 2. 採択時の留意事項への対応状況

採択時の留意事項及び対応状況は以下のとおりである。

- (1) 具体的にどのような科学技術上の課題において重要となりうるかについては、具体的なターゲットを明確にすること。

→ 1-(2) 研究開発内容に、「アプリケーションソフトウェアの高精度化、精度保証化」を記載した。具体的なアプリケーションについては、既にポスト「京」重点課題やHPCI戦略プログラムにおけるアプリケーション開発者と打ち合わせを開始しているが、現状では、第一原理計算ソフトウェアのRSDFTをターゲットの1つに考えている。既に、RSDFTの開発者からは、計算精度の問題に起因して収束しづらいテスト問題を提供してもらい、検討を開始している。また、格子QCDシミュレーションにおいても、問題の大規模化により計算結果の精度が不足する場合があるため、その解決方法について検討をする。

- (2) 比較的实际的な物理問題に対して精度保証法を用いた場合の有効性の検証についても考慮すること。

→ 上記(1)にあるように対応。

- (3) 技術開発だけにとどまらず、ユーザが利用可能となる実用化を視野に入れたシナリオを検討すること。

→ 1-(3) 目標・期待される成果の＜アウトプット成果＞に以下を記載した。

調査研究・準備研究フェーズ終了時のH29年度には、開発したライブラリの一部をオープンソースの試用版としてコードリリースするほか、名古屋大学FX100にインストールし、ユーザに無償提供する。本格実施フェーズ終了時のH31年度には、Ver1.00のオープンソースコードとしてリリースする。また、名古屋大学FX100にインストールしてユーザに無償提供し、普及活動を進める。

- (4) 提案にある手法により解決が期待される社会的・科学的問題、数値保証が重要な懸案に取り組む計算科学研究者等と効果的に連携して取り組むとともに、役割分担を明確にすること。

→ 上記(1)にあるように対応しながら、実際に精度保証が有用な分野を積極的に開拓するため、実問題に取り組んでいる計算科学者等と打ち合わせを開始しており、必要に応じて協力者として参加して頂く。また、必要に応じて、効果的な連携ができるように国内外の学会、研究会等においてアウトリーチ活動を推進する。

役割分担としては、上記の活動を通じて、協力者から精度保証が必要または有用な問題を提供してもらい、本研究グループ全体で問題の解決にあたる。その結果をフィードバックし、効果的な連携となるように努める。

以上

### 3. 中間評価における指摘事項への対応状況

中間評価における指摘事項への対応状況は以下のとおりである。

- (1) 課題全体として達成すべき成果を明確にするとともに、その成果実現に向けた定量的・定性的な目標（年間目標及び最終目標）を明確にすること。

→ 「1-（3）目標・期待される成果」を以下のように修正した。

---

課題全体として達成すべき成果を以下のように定める。

- ・ 科学的・社会的意義のある具体的な計算科学のアプリケーションにおいて精度保証の有効性を示す。

これを実現するため、以下のように数値目標を設定する。

- (a) 密行列系で 100 万次元の線形問題に対して実用的（近似解の計算時間の数倍程度）な精度保証を可能とする。
  - (b) 100 万次元規模の量子物質計算を実用的（問題の難しさに応じて、近似解の計算時間の数倍から数十倍程度）に精度保証付きで解くことが可能なアプリケーションを開発する。
- 

- (2) 計算科学技術分野における研究開発の論文数、学会発表数は、事業の成果を議論する上で 1 つの指標となりうるため、分野の特性、体制を考慮の上、論文、学会発表を通じて十分に成果を発信するような計画とすること。

→ 速報性の高い国際会議論文やレター論文等で研究成果をコンスタントに発信しつつ、同時に査読に時間を要する可能性がある有力な国際論文誌にも可能な限り迅速に論文投稿し、重層的な成果の発信に努める。学会発表についてはこれまでも積極的に行っているが、特に HPC 分野の有力な国際会議での発表やセッションのオーガナイズを計画的に実施する。尚、2018 年 3 月に早稲田大学で開催される国際会議 SIAM PP18 において、HPC と精度保証に関するミニシンポジウムを提案して採択されており、その中で本研究課題の成果発表も行う予定である。

- (3) 予備計算などを通じて、サイエンス、エンジニアリング的な目標を明確にすること。その目標に対して、ポスト「京」でいつまでに何をどこまで明らかにすることを目指すのかを明確にすること。その時点でポスト「京」で初めてできる画期的な利活用について具体的に説明すること。

→ 予備計算の結果を踏まえて、(1)の回答のとおり目標を設定した。また、「1-（3）目標・期待される成果の＜アウトプット成果＞及び＜アウトカム成果＞」を以下のように修正した。

---

#### ＜アウトプット成果＞

平成 29 年度終了時には、上記の数値目標(a)について、100 万次元の密行列系連立一次方程式の精度保証を達成し、開発したライブラリの一部をオープンソースの試用版としてコードリリースするほか、名古屋大学情報基盤センターのスパコンにインストールし、ユーザに無償提供する。

本格実施フェーズ終了時には、上記の数値目標(b)について、開発した精度保証付き量子物質計算アプ



리케이션のソースコードを公開する。また、その開発過程で作成する精度保証付きの汎用的な線形計算の主要な関数群をライブラリにまとめ、Ver. 1.00 のオープンソースコードとしてリリースする。さらに、名古屋大学情報基盤センターのスパコンに開発したライブラリをインストールしてユーザに無償提供し、普及活動を進める。

ポスト「京」運用開始5年後までに、本研究成果のアウトリーチ活動を展開することによって、他に類を見ない「精度」の軸を持ったポスト「京」の超高性能性を世界中に示すことが可能となる。特に、次世代の先進的なデバイス開発に貢献するような大規模量子物質計算の精度保証法を確立し、ポスト「京」において精度保証付き数値計算の有効性を明らかにすることにより、解くべき問題の性質に応じて計算資源の割り当てを「計算の高速性」と「計算結果の信頼性」でバランスさせて両立させることの重要性が示される。

#### <アウトカム成果>

ポスト「京」運用開始5年後までに、アウトプット成果として公開するライブラリが世の中に浸透し、精度に関する問題でこれまでに解くことが困難であった基礎科学における各種の難問に本研究成果が適用され始め、運用開始10年後にはいくつかのそういった難問が解決されることが期待される。特に、本研究課題のアウトプット成果である精度保証付き量子物質計算アプリケーションを公開することによって、ポスト「京」が「計算の高速性と信頼性の融合」を達成している世界で唯一の超高性能計算環境であることが示され、スーパーコンピューティング分野が今後進むべき方向性の1つとして、世界を先導する立場となる。

- 
- (4) 実際の科学技術計算での必要性をより明確に示すこと。例えば、例としてあげられている高分子ポリマーにおいて17994 個の固有値中二つのレベルの分離に失敗していることがどの程度の重要性を持つことか説明してほしい。

→ 「1-(1) 目的・意義 <詳細>」の後半部分を以下のように修正した。

---

さらに、このような超高性能計算環境をベースとして、基礎科学における計算誤差に起因した各種の難問（アプリケーション）に本研究成果が応用されることによって、世界初の研究成果が創出されることが期待される。そのような具体的なアプリケーションへの展開として、計算物質科学分野の研究者と連携し、量子物質計算に現れる大規模な固有値問題において精度保証付き数値計算が数学的に正しい結果を与えることの有効性を示す。より具体的には、系が大規模化することによって固有値問題が悪条件化し、固有値が近接して分離できなくなる場合がある。数理的（数値計算法）には、固有値を分離できないということは

- ・ 固有値の数や順番を特定できない。
- ・ 近接固有値に対応する固有ベクトルを精度良く計算できていない。

ということである。物理的（計算物質科学的）には以下の問題が発生する。

- ・ 固有値の個数は高分子中の電子の数に対応するため、固有値の数や順番を特定できればバンドギャップを正しく計算できない。

- ・固有ベクトルは高分子の電子状態の波動関数に対応するため、固有ベクトルが正しく計算できないと、物質の電子状態を正しく計算できない。

すなわち、対象となる問題の物性を間違えて把握してしまう可能性がある。精度保証を導入すると、そのような間違いを防ぐことができ、さらに、近似解（固有値、固有ベクトル）の精度を改善して固有値の分離を成功させることができる可能性がある。

流体力学等で連続系を取り扱う場合は、中間固有値の分離ができなかったとしても、全体としてはほとんど影響が無い場合もあるが、我々が解析対象としている量子物質計算では、それが多大な影響を及ぼす場合がある。本問題は、量子力学にもとづく電子波計算であり、これは先進的なデバイス開発の基礎となる物性（例えば、金属や半導体の性質）を解析するための基盤となる。

---

- (5) 4大学の研究者による研究体制であるが、どのような協力を行い、どのような成果が上がっているのか明確でない。連携およびその効果について具体的に示すこと。

→ 「1-（2）研究開発内容 ＜詳細＞」に以下のように具体的な内容を追記した。

---

特に、本研究課題の目標である具体的なシミュレーションサイエンスのターゲットとして、量子物質計算の高精度化及び精度保証化を目指し、これを実現するために各実施機関で以下のような連携を行う。

- a) 東京女子大学と早稲田大学を中心として、計算物質科学分野の研究者と連携して、量子物質計算の高精度化及び精度保証化のフレームワークを構築する。
  - b) 芝浦工業大学を中心として、a)で構築されたフレームワークをベースとして、高精度化及び精度保証化した量子物質計算のアプリケーション実装を行う。
  - c) 名古屋大学を中心として、b)で実装された精度保証付き量子物質計算のアプリケーションを高性能計算環境向けに最適化し、完成版コードを整備する。
- 

以上

(別紙 1) 実施機関一覧

|        | 実施機関   | 備考          |
|--------|--------|-------------|
| サブ課題 A | 東京女子大学 | 代表機関 (荻田武史) |
|        | 早稲田大学  | 分担機関        |
|        | 名古屋大学  | 分担機関        |
|        | 芝浦工業大学 | 分担機関        |