令和元年度　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）

令和元年度
「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）」
成果報告書

令和２年５月 29 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令和元年度「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

「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）」

２．実施機関（代表機関）

<table>
<tr><td rowspan="11">代表機関</td><td colspan="2">機関名</td><td colspan="4">学校法人東京女子大学</td></tr>
<tr><td colspan="2">所在地</td><td colspan="4">〒167-8585　東京都杉並区善福寺２丁目６番１号</td></tr>
<tr><td rowspan="4">課題責任者</td><td>ふりがな
氏　　名</td><td>おぎた　たけし
荻田　武史</td><td>生年
月日</td><td colspan="2">西暦 1977 年 2 月 24 日（43 歳）
※2020 年 4 月 1 日現在</td></tr>
<tr><td>所属部署名</td><td colspan="2">現代教養学部　数理科学科</td><td>役職</td><td>教授</td></tr>
<tr><td rowspan="2">連絡先</td><td colspan="4">Tel. 03-5382-6411　　　　　Fax. 03-5382-6411</td></tr>
<tr><td colspan="4">E-mail　ogita@lab.twcu.ac.jp</td></tr>
<tr><td rowspan="4">事務連絡担当者</td><td>ふりがな
氏　　名</td><td colspan="2">くらもと　のりえ
倉本　聖恵</td><td colspan="2"></td></tr>
<tr><td>所属部署名</td><td colspan="2">教育研究支援課</td><td>役職</td><td>課長</td></tr>
<tr><td rowspan="2">連絡先</td><td colspan="4">Tel. 03-5382-6451　　　　Fax. 03-5382-6479</td></tr>
<tr><td colspan="4">E-mail　kaken@office.twcu.ac.jp</td></tr>
</table>

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．令和元年度（報告年度）の実施内容

４－１．実施計画

令和元年度は本格実施フェーズの終了年度として、昨年度に引き続き、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・研究開発を推進しながら、本研究課題全体における最終目標の達成を目指す。

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線形問題を高精度かつ高速に精度保証付きで解くことができるアルゴリズムに関する研究を推進する。特に、アプリケーション開発の観点から、連立一次方程式及び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及び精度保証化

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、量子物質計算及び熱伝導計算ソフトウェアの高精度化及び精度保証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連立一次方程式及び一般化固有値問題に対して、上記 a)で開発した精度保証法を実装し、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）

実問題で現れる対称行列や鞍点型行列などの構造を持った行列の固有値評価方法や、その構造を利用した連立一次方程式に対する効率的な精度保証アルゴリズムを開発する。さらに、大規模な疎行列系の固有値問題に対して、特定の固有値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）

標準固有値問題及び一般化固有値問題に対する反復改良法及び精度保証法をスーパーコンピュータ向けに実装し、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）

一般化固有値問題に対する精度保証法を分散並列計算環境向けに実装する。さらに、それを達成するために、連立一次方程式に対する効率的な高精度計算アルゴリズムを開発し、分散並列計算環境向けに実装を行う。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。

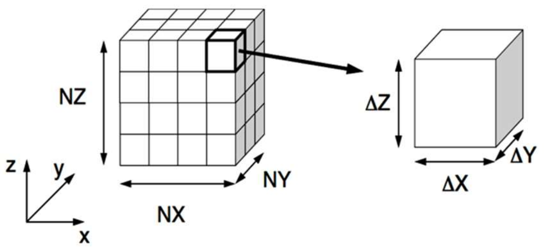
①極限の探究に資する精度保証付き数値計算学の展開と超高性能計算環境の創成

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

(1) 大規模な連立一次方程式に対する高精度な精度保証アルゴリズムの実装

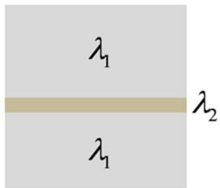
実問題に精度保証を適用するための基盤として，3 次元 Poisson 方程式を離散化して得られる連立一次方程式の数値解の精度保証を行った。数値シミュレーションでは、微分方程式を離散化し、得られた連立一次方程式を解くことが多いが、離散化誤差については、独立に考えることができるため、本研究では、連立一次方程式に対する精度保証のみに着目する。

本研究では、有限体積法（７点差分メッシュ）によって離散化して得られた連立一次方程式に対する精度保証の改善に成功した。解析モデルを図 a-1 に示す。



$$-\nabla\cdot(\lambda\nabla\phi) = f, \quad f(x,y,z) = x+y+z$$

（境界は、すべて Dirichlet 境界条件）



左図の立方体領域の y 方向の断面図

$\lambda_1/\lambda_2 \sim$ 条件数

λ_1，λ_2 はそれぞれの場所における拡散係数。

λ_2 が λ_1 に比べて小さいと断熱作用が大きくなり、問題が解きづらくなる。

図 a-1：解析モデル（3 次元 Poisson 方程式）

係数行列Aが M 行列性を持つ場合、高速な精度保証法を適用可能であるが、誤差限界が過大評価になっている可能性がある。そこで、それを抑制するための方法を適用した。具体的には、以下のようなアルゴリズムとなる。

i. 離散化して得られた連立一次方程式$Ax = b$を解く。得られた近似解を$\hat{x}$とする。

ii. 連立一次方程式$Ay = e$（eはすべての要素が 1 のベクトル）を解く。得られた近似解を$\hat{y}$とする。

iii. 上記の$\hat{y}$を用いて係数行列Aの M 行列性の保証を行う。

iv. 残差$r = b - A\hat{x}$を精度保証付きで計算する。残差の近似値を$\hat{r}$、誤差限界をe_rとする。

v. 連立一次方程式$Az = \hat{r}$を解く。得られた近似解を$\hat{z}$とする。

vi. 以下の誤差評価式の右辺について、浮動小数点演算の丸めモードの変更を適宜使用しながら、厳密な上限を求める。

$$\|x-\hat{x}\|_\infty \le \|\hat{z}\|_\infty + \frac{\|\hat{y}\|_\infty \|b - A(\hat{x}+\hat{z})\|_\infty}{1 - \|e - A\hat{y}\|_\infty}$$

（但し、右辺第 2 項の分母が 0 以下になった場合は精度保証失敗）

東京大学情報基盤センターの Reedbush-U（1 ノード）において数値実験を行った。連立一次方程式のソルバには ICCG 法（マルチカラー前処理： 20 色）を用いて、OpenMP による並列化（36 スレッド）を行った。ICCG 法の反復の停止条件は残差ノルムを用いて

$$Ax = b,\ \|b - A\hat{x}\|_2/\|b\|_2 < \varepsilon_1, \qquad Ay = e,\ \|e - A\hat{y}\|_\infty < \varepsilon_2, \qquad Az = \hat{r},\ \|\hat{r} - A\hat{z}\|_2/\|\hat{r}\|_2 < \varepsilon_3$$

のように与えた。但し、それぞれの残差ベクトルの計算については ICCG 法の反復中に計算される残差ベクトルを用いた。また、浮動小数点演算は、すべて倍精度を用いた。

ここでは、以下のような問題設定とする。

- NX = NY = NZ = 128（n = 2,097,152）
- $\lambda_1 = 1.0$に固定，λ_2を変化させる。
- $\varepsilon_1 = 10^{-12}$，$\varepsilon_2 = 10^{-2}$，$\varepsilon_3 = 10^{-9}$

離散化して得られた連立一次方程式の近似解$\hat{x}$を計算し、精度保証法を用いて、最大相対誤差

$$\max_{1\le i\le n}\left|\frac{x_i - \hat{x}_i}{x_i}\right|$$

の上限及び相対残差ノルム

$$\|b - A\hat{x}\|_2/\|b\|_2$$

の上限をそれぞれ求めた。結果を図 a-2 及び表 a-1 に示す。

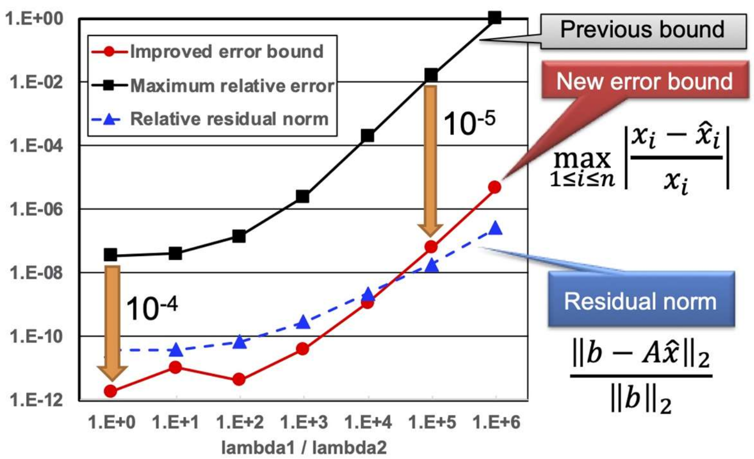


図 a-2：条件（λ_1/λ_2）毎の最大相対誤差（実線）と相対残差ノルム（破線）

表 a-1：計算時間(秒)

NX=NY=NZ=128 (n = 2,097,152)	近似解の計算	精度保証
$\lambda_1/\lambda_2 = 1$	3.75	4.47
$\lambda_1/\lambda_2 = 10^6$	6.83	7.85

図 a-2 から、提案方式によって誤差限界の過大評価が大幅に抑制できていることがわかる。また、表 a-1 から、近似解と精度保証の計算時間は同程度であることがわかる。

(2) 大規模な一般化固有値問題に対して適用可能な精度保証アルゴリズムの改良

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。昨年度の成果をベースとして、一般化固有値問題に対する精度保証法を改良した（図 a-3)。これは、連立一次方程式に対する精度保証法と固有値の包含定理（ゲルシュゴリンの定理）を組み合わせた方法である。

$Ax = \lambda Bx \qquad A = A^T,\ B = B^T \in \mathbb{R}^{n\times n},\ B:$ 正定値

$$\begin{cases} \widehat{X}: \text{近似固有ベクトルを並べた行列} \\ \widehat{D}: \text{近似固有値を対角に持つ行列} \end{cases} \quad \begin{cases} R := \widehat{X}^{\mathrm{T}}(A\widehat{X} - B\widehat{X}\widehat{D}) \\ G := \widehat{X}^{\mathrm{T}}B\widehat{X} - I \end{cases}$$

$\|G\|_\infty < 1$ ならば、$Y := \widehat{X}^{-1}B^{-1}A\widehat{X}$ に対して

$$|\widehat{D} - Y|e \le |R|e + \frac{\|R\|_\infty}{1 - \|G\|_\infty}|G|e =: r,\ e = (1, 1, \ldots, 1)^{\mathrm{T}}$$

である。このとき、$d_i := \widehat{D}_{ii}$ に対して

$$\Lambda \subseteq \bigcup_{k=1}^{n}[d_i - r_i, d_i + r_i] \qquad \Lambda := \{\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n\}$$

が成り立つ。また、もしすべての区間 $[d_i - r_i, d_i + r_i]$ が分離している場合、各区間に 1 つの固有値 λ_i が存在する。

図 a-3: 一般化固有値問題に対する精度保証方式。
行列に対する絶対値は、要素毎に絶対値をとった行列を意味する。

これにより、従来よりも大規模な問題に対する精度保証が可能となった。数値実験による検証結果は、項目 b)に示す。

b) 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

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、量子物質計算の高精度化及び精度保証化に向けて研究を推進した。特に、実問題で現れる大規模な固有値問題に対して、本研究で開発した精度保証法を実装し、性能評価を行った。

一般化固有値問題$Ax_i = \lambda_i Bx_i$に対する精度保証法を考える。ここで、Aは実対称行列、Bは実対称正定値行列とする。また、λ_i $(\lambda_i < \lambda_{i+1})$を固有値、$x_i$は$\lambda_i$に対応する固有ベクトルとする。このとき、数値計算によって得られたλ_iの近似固有値を$\hat{\lambda}_i$とおき、精度保証によって得られた$\hat{\lambda}_i$の誤差上限をr_iとする。また、$\delta_i = r_{i+1} + r_i,\ \rho_i = \hat{\lambda}_{i+1} - \hat{\lambda}_i$ とする。数値実験に用いた行列は ELSES matrix library (http://www.elses.jp/matrix/)において公開されている、電子構造計算において生成される固有値問題を扱う。問題の名前が PPE354 の場合、PPE は問題の種類、354 は行列の次数を表す。末尾に std の表記がある場合は、標準固有値問題を意味する。

本研究では実対称行列に対する標準固有値問題の計算に ScaLAPACK の関数である PDSYEVD を用いた。一般化固有値問題には、Bに対してコレスキー分解（PDPOTRF）を行い、得られた上三角行列Rを用いて$R^{-T}AR^{-1}$の計算を行う。ただし、この計算に対しては、PDTRSM を 2 回用いて計算する。

まず、京コンピュータを用いて得られた数値実験結果についてまとめる。まず、テスト行列に対する固有値の特徴に関する実験結果が図 b-1 である。

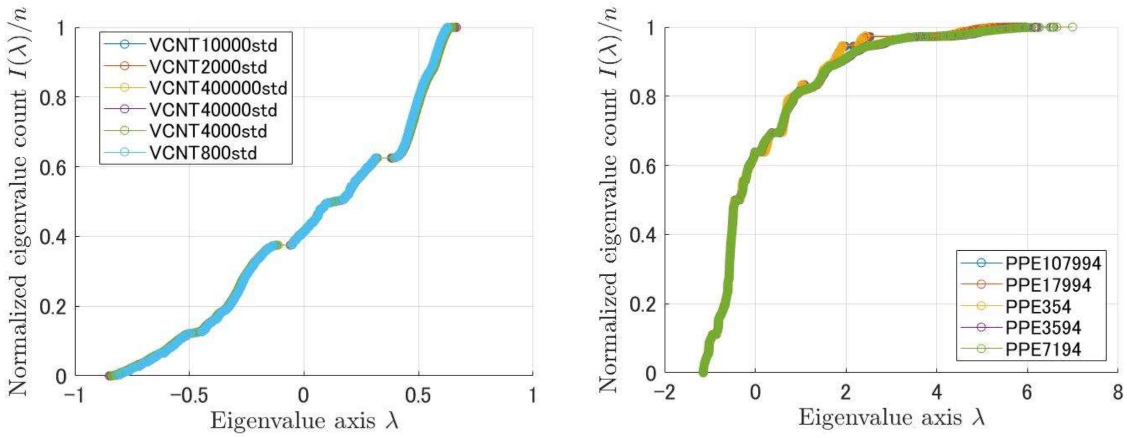


図 b-1: 固有値の密接度に対する評価

ここで

$$I(\lambda) := \sum_{k=1}^{n} \theta\left(\hat{\lambda}_k - \lambda\right),\ \ \theta(x) := \begin{cases} 1 & (x \geq 0) \\ 0 & (x < 0) \end{cases}$$

である。図 b-1 の左図においては$\lambda \approx 0.5$付近、右図において$\lambda \approx -0.5$付近で近似固有値が密集している。これらの付近では、近似固有値の大小関係の反転や固有ベクトルの信頼性が低いことが心配される。このような、密集した近似固有値に対して重複固有値の非存在の証明と全固有値の精度保証を目的とする。

次に、近似固有値と精度保証で得られた誤差上限の比較結果を紹介する。図 b-2 の左図では、最悪の場合でも近似固有値が 10 進 4 桁程度は正しいことを保証できた。同様に図 b-2 の右図では近似固有値の精度が 10 進 9 桁程度正しいことが保証できた。両方の結果より、絶対値が小さい近似固有値に対して相対的に誤差上限が悪化する傾向にあることが分かった。また、図 b-1 との比較から、隣接する近似固有値が近い場合に、誤差上限が悪化する傾向があることも分かった。

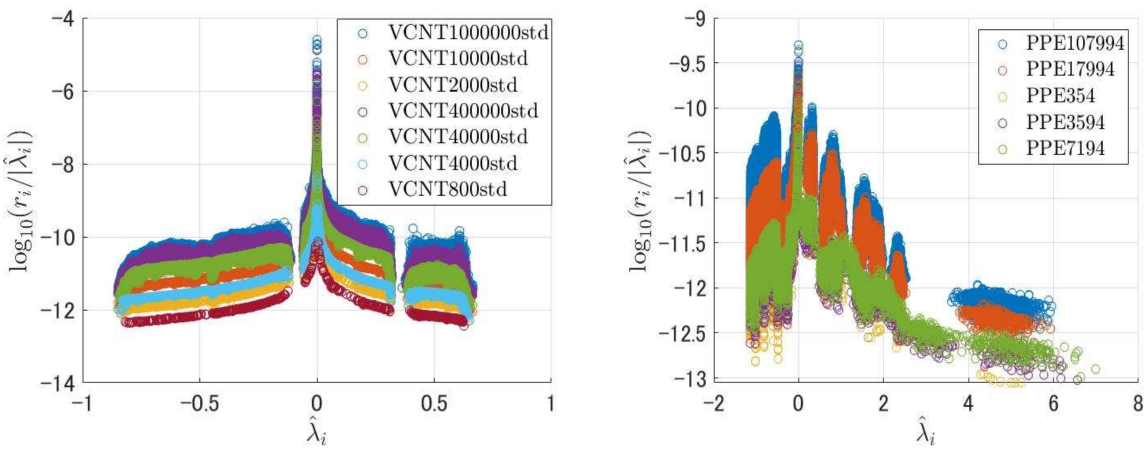


図 b-2: 近似固有値とその誤差上限の比較

次に、与えられた固有値問題に対する重複固有値の非存在を検証した結果を紹介する。図 b-3 は、隣接

近似固有値の差と誤差半径の比較結果である。

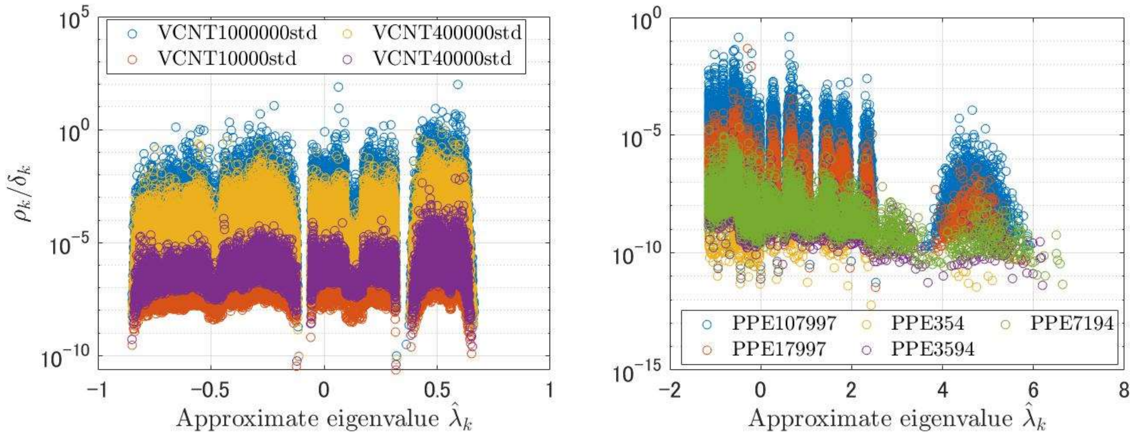


図 b-3: 隣接近似固有値の差と誤差半径の比較

ここで、ρ_k/δ_kの値が小さい（図では下側）場合、隣り合う固有値の距離と比較して誤差上限が小さいことを意味する。同様に、ρ_k/δ_kの値が大きい（図では上側）場合、隣り合う固有値の距離と比較して誤差上限が大きく、値が 1 以上の場合には、重複固有値の非存在の保証に失敗したことを意味する。テストを行った行列（最大で 100 万次元）に対して、すべての固有値の包含に成功した。また、一般化固有値問題に対しては 10 万次元を超える密行列に対して重複固有値の非存在の証明に成功した。しかし、100 万元と 40 万次元の標準固有値問題に対して重複固有値の非存在の証明に失敗した。ただし、40 万次元の問題においては 1 ペア、100 万次元の問題においては 41 ペアの固有値以外は重複しないことは証明できている。

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

以下の研究を実施した。

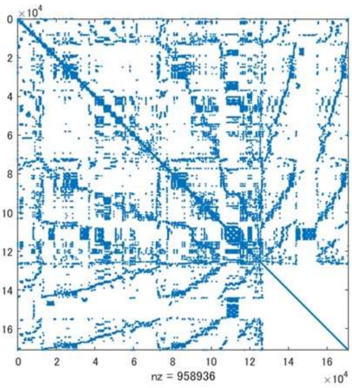
i. 構造を持った行列の固有値評価方法の開発及び疎行列系連立一次方程式に対する効率的な精度保証アルゴリズムの開発

ii. 特定の固有値に対する効率的な精度保証アルゴリズムの開発

i.では疎行列な非対称行列を係数行列に持つ連立一次方程式の開発し、国際会議のMAT TRIAD 2019にて発表を行った。ii.についてはi.の研究を基づいて、最小特異値の下界(正規行列の最小固有値)の下界を評価することで、疎行列を係数行列に持つ最小二乗問題の効率的な精度保証付き数値計算法を開発し、国際会議のJSST 2019にて発表を行った。この発表に関してOutstanding Presentation Award を受賞した。

i.はスパースLU分解を基礎とし、密行列向けに開発された精度保証付き数値計算法においてfill-inが発生する箇所を特定し、その箇所を回避するように評価式を変形することで、疎行列を出来る限り保つ方法となっている。従来法として、正規方程式に変形し、最小特異値の下界をコレスキー分解の事前誤差評価を用いて得るRumpの方法が考えられるが、条件数が10^8を超える問題には適用できない。しかし、本提案手法では条件数が10^8を超える問題かつ密行列としてはデータ容量的に保持できない低メモリ量の環境にて精度保証することに成功した（図c-1)。これにより、従来では解けなかった、より大規模な疎行列

の連立一次方程式を精度保証付き数値計算できる可能性が示された。



テスト行列	scircuit
行列サイズ	170,998
条件数	5.58×10^{9}
Aのdensity	3.28×10^{-5}
計算時間	3.04×10^{2}

図c-1:テスト行列の性質と精度保証の計算時間。
scircuitは回路シミュレーションで現れる行列

ii.は、スパースLU分解を基礎とし、最小特異値(正規方程式の最小固有値)の下界を与えることで疎行列を出来る限り保つ方法となっている。この方法は最小特異値(正規方程式の最小固有値)の下界を荒く評価する代わりに、元の問題よりも小さい行列しか扱わなくて済むために大規模な問題に対して、効果的である。例えば、図c-2のDelor64Kと呼ばれるテスト問題は行列サイズが(64,719×1,785,345)と大規模である。しかし、このような大規模な問題に対しても約240Mbyteのメモリしか使用せず精度保証付きで計算出来たことから、問題によっては非常に省メモリで計算が可能である。

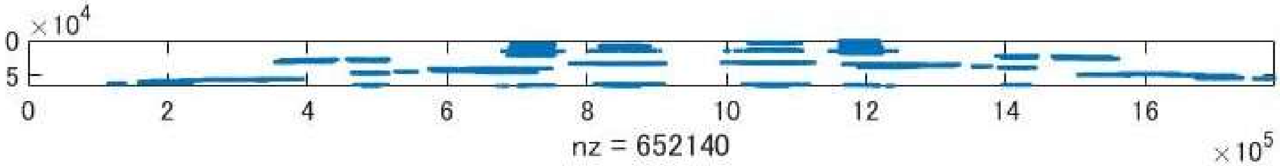


図 c-2: テスト行列 Delor64K のスパースパターン。
行列サイズが 64,719×1,785,345 である横長の行列で、青い部分が非ゼロ要素

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

固有値問題に対する反復改良法および精度保証法に資する高性能実装方式を開発して性能チューニングを行った。この実装方式開発とチューニングとは、反復解法や精度保証法の計算で必須となる疎行列化した行列-行列積(SpMM)を、先進的な超高性能計算機であるGraphics Processing Unit(GPU)やメニーコア計算機環境上で高性能実行するための、以下の実装方式開発と性能評価である：

i. 疎行列-ベクトル積 (SpMV) 実装方式
ii. 疎行列-疎行列積(SpMxSpM)実装方式
iii. i,iiを含む複数実装方式を選択し演算効率を最適化する自動チューニング方式

具体的には、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（無誤差変換）に基づく高精度行列-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

機向け実装方式開発および性能チューニングを行った。

図 d-1 に、尾崎の方法に適用するための提案実装方式の概略を示す。提案方式は、GPU 環境のための実装方式であるが、CPU 環境での実行も考慮したものである。GPU を利用した「疎行列 - 密行列積」演算の実装を SpMV を用いて行っている。

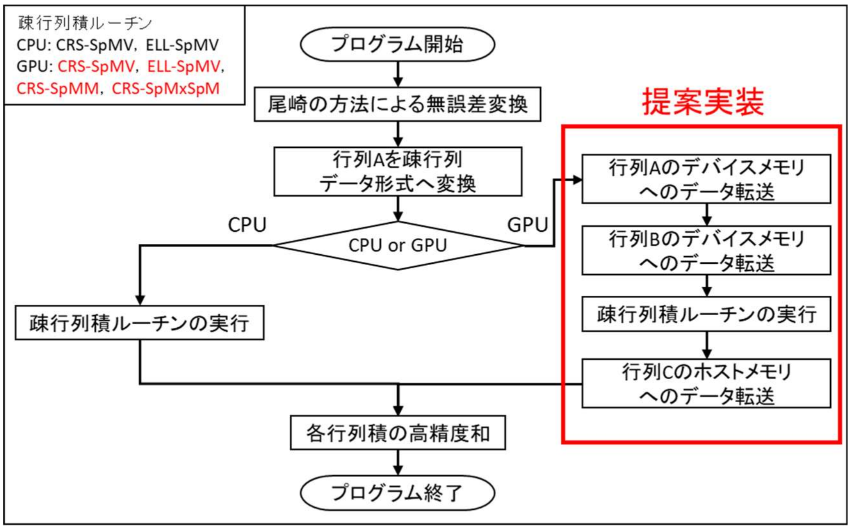


図 d-1: 提案する尾崎の方法による行列-行列積演算の実装方式

尾崎の方法には、行列サイズや最適な疎行列演算実装を決定するための基準となる疎度、および、CPU 環境または GPU 環境上のどちらで行列-行列積を実行するか、などの実行性能に大きく影響を及ぼす「性能パラメタ」がある。さらに、DGEMM、CRS 形式または ELL 形式による SpMV、SpMM、または SpMxSpM などの実装選択など、尾崎の方法の行列-行列積演算の実装選択のための多数の性能パラメタもある。これらの性能パラメタの決定は全体性能に大きく影響するが、高性能化の知識がないユーザによる設定が難しい。さらに、たとえ知識があっても、最適パラメタを設定するための手間がかかる。

このような尾崎の方法における「性能パラメタのチューニング問題」を解決するための方法の 1 つとして自動性能チューニング（Auto-tuning, AT）技術の適用がある。図 d-2 に想定する尾崎の方法における AT 適用時の処理の流れを示す。

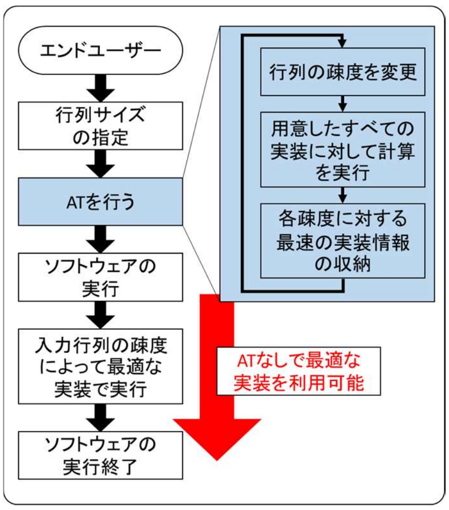


図 d-2: 尾崎の方法に AT を適用する場合の処理の流れ

本研究では AT 実装に向け、ユーザから行列サイズを入力として受け取った場合に、(I)実行前に行列Aの疎度を変化させて様々な行列-行列積実装で実行し、(Ⅱ)行列サイズや疎度の変化によって、どの実装で演算を行うのが最適であるかを判断しパラメタ設定する AT 方式の適用可能性を検証することを目的とした。

各種の数値実験を実施した結果、行列サイズが小さい場合は CPU 環境上で実行した方が高速であることが明らかとなった。一方、行列サイズが大きくなると、GPU 環境が高速となる。また行列サイズに関係なく、行列Aの疎度が高い場合では、CRS 形式を用いた外部並列化による SpMV が高速実装となることが明らかとなった。

このように、特定の行列サイズと特定の疎度で、尾崎の方法が高速となる実行環境（CPU か GPU か）が変わること、および、最適な実装方式が変わることを明らかにした。このことは、事前にユーザが実行する問題サイズを AT システムに与えたときに AT を実行する方式においては、（I）疎度を変化させて最適な実装方式を調べ、（Ⅱ）実行時に判明した疎度情報を参照し、（Ⅲ）事前に調べた最適実装を選択する、AT 方式が、尾崎の方法の演算で有効となることを意味している。

まとめとして、性能評価結果から、尾崎の方法の計算に適用可能なAT方式を明らかにし、またそのAT方式の有効性を示すことができた。

また、線形計算ライブラリの整備として項目 1 で説明した新しい実装方式を含む、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)の最終リリースバージョン ver. 1.00 のソースコードの整備を行い、コードの公開を行った。

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

固有値問題に対する精度保証法を京コンピュータ上で実装した。以下に数値実験による計算時間の比較結果を示す。比較対象は、全固有対の計算時間T_{sol}と、全固有対の計算後に精度保証に要する時間T_{veri}である。表 e-1 は標準固有値問題に対する固有値の計算時間と精度保証に要した時間の比較結果である。様々なサイズの問題に対して、精度保証に必要な時間は近似固有対の計算時間と比較して短い。この結果から、PDSYEVD の約 1.8 倍程度で、全固有ベクトルと精度保証された全固有値が計算可能であることがわかる。

表 e-1: 計算時間の比較(秒)

File name	No. of nodes	T_{sol}	T_{veri}	T_{veri}/T_{sol}
VCNT800std	4	0.59	0.20	0.33
VCNT2000std	4	1.88	0.85	0.45
VCNT4000std	4	6.25	4.80	0.76
VCNT10000std	4	47.16	40.60	0.86
VCNT40000std	16	725.98	650.85	0.89
VCNT100000std	100	2,060.71	1,651.97	0.80
VCNT400000std	1,600	19,291.97	15,836.12	0.82
VCNT1000000std	10,000	26,705.04	20,841.42	0.78

次に、連立一次方程式に対する精度保証付き数値計算に関して、公開コードの改善を行った。以前のバージョンとして公開したものは、行列の次元がブロックサイズやノード数で割り切れないと実行できないものであったが、それらの制約をなくし、また可能な限り PBLAS 及び ScaLAPACK の関数を用いてコード全体を書き直した。このコードについて、FX100（名古屋大学）を用いて 1 ノードに 2 つの CPU を搭載した計算環境にあわせてベンチマークをとった。表 e-2 は、MPI 並列数とノード数を同じにした場合（精度保証 I）と MPI 並列数はノード数の 2 倍にした場合（精度保証 II）の計算時間（秒）の比較である。ノード数は同じであっても MPI 並列数を 2 倍に設定することにより、10%以上の高速化を達成できていることがわかる。

表 e-2: 計算時間の比（秒）

問題サイズ	100,000	200,000	300,000	400,000	500,000	600,000
使用ノード	16	64	144	256	400	576
精度保証 I	722	1,392	2,118	2,816	3,589	4,437
精度保証 II	562	1,127	1,900	2,304	3,106	4,061

表 e-3 には、連立一次方程式の数値解を得る計算時間と精度保証全体（近似解を求める時間を含む）に要した計算時間の比を示した。MPI 並列数をノード数の 2 倍に設定した場合、この比が若干悪化しているが、これは LU 分解のルーチンが高速化され、連立一次方程式の数値解を得る計算時間が相対的に短くなるからである。

表 e-3: 近似計算と精度保証の計算時間比

問題サイズ	100,000	200,000	300,000	400,000	500,000	600,000
使用ノード	16	64	144	256	400	576
精度保証 I	4.97	4.98	4.99	4.74	4.58	4.46
精度保証 II	6.17	5.96	4.75	5.40	4.84	4.54

強スケーリング性を測った結果を表 e-4 に示した。行列のサイズを 250,000 に固定し、使用ノード数を変えて、連立一次方程式の計算時間と精度保証の計算時間を測定した。連立一次方程式に要する時間は 600 ノードまでは短くなっていくが、800 ノードでは計算性能の悪化が見られた。一方で、精度保証のプログラムは行列積が主計算であるため、ノード数の増加による計算時間の短縮が 800 ノードまで確認された。結果として、連立一次方程式と精度保証に要する計算時間の比は 800 ノードでは 2.55 となっている。連立一次方程式の近似解を求める計算量と近似解の計算を含めて精度保証に要する計算量の比は 9 であることから、実測では非常に高速であることがわかる。これは 1 ノード 4CPU を搭載する富岳・不老においても、理論計算量に対して精度保証が実測で高速である期待が十分に持てることを示している。

表 e-4: 近似計算と精度保証の強スケーリングの比較（ノード時間積、n=250,000）

使用ノード	200	400	600	800
連立一次方程式	216	158	150	171
精度保証	900	568	484	437

比	4.16	3.59	3.22	2.55

また、高精度計算アルゴリズムについて、Ogita-Rump-Oishi の高精度な内積計算法を大規模分散並列計算用に拡張して実装を行った。コードはプロジェクトホームページに公開した。高精度計算のみならず、精度保証に有用であるため、高精度に求めた近似値とその誤差半径を同時に出力するように設計した。具体的には、数値線形代数における世界標準的な基本計算ルーチン群である BLAS (Basic Linear Algebra Subprograms)の分散並列版である PBLAS を基にした区間演算ルーチン群である Interval PBLAS（IPBLAS）を開発し、PBLAS における Level-1 から Level-3 のうちの基本計算ルーチンの仕様を定め、最も基本的な計算である PDDOT, PDGEMV, PDGEMM を含むルーチンの区間演算版を実装した。これを活用することによって、数値線形代数における精度保証付き数値計算の実装が効率化される。

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 3 回（2019 年 5 月,8 月，2020 年 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 SC19（デンバー、2019 年 11 月 17 日～22 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 3 回 精度保証付き数値計算の実問題への応用研究集会」（香川県高松市、2019 年 11 月 30 日～12 月 1 日）を開催した。

研究集会では、HPC 関係の研究者をはじめ、探索アルゴリズムや計算幾何学などの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
2019/5/17	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研究推進方法について確認を行った。
2019/8/23	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。
2019/11/17-22	デンバー・アメリカ	国際会議 SC19 におけるアウトリーチ	国際会議 SC19 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。
2019/11/30-12/1	サンポートホール高松（高松市）	第 3 回 精度保証付き数値計算の実問題への応用研究集会(NVR 2019)	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。
2020/3/27	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、最終報告としての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 荻田 武史
b)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	学校法人東京女子大学	現代教養学部 教授 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	理工学術院 教授 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 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 教授 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 荻田 武史

様式第２１

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
Verification methods for numerical linear algebra and applications（口頭）	T. Ogita	The 9th International Congress on Industrial and Applied Mathematics (ICIAM 2019), University of Valencia, Spain	2019/7/17	国外
Accurate and verified solutions of large sparse linear systems arising from 3D Poisson equation（口頭）	T. Ogita, K. Nakajima	International Conference on Matrix Analysis and its Applications (MAT TRIAD 2019), Liblice, Czech Republic	2019/9/10	国外
Verified solutions of large sparse linear systems arising from 3D Poisson equation in HPC environments（口頭）	T. Ogita, K. Nakajima	European Numerical Mathematics and Advanced Applications Conference 2019 (ENUMATH 2019)	2019/10/2	国外

		, Egmond aan Zee, The Netherlands		
Verified Numerical Computations with HPC (口頭)	T. Ogita	3rd International Conference on Modern Mathematical Methods and High Performance Computing in Science & Technology, Inderprastha Engineering College, Ghaziabad, India	2020/1/9	国外
Verified Numerical Computations on Supercomputers (口頭)	T. Ogita	Workshop on Large-scale Parallel Numerical Computing Technology (LSPANC 2020 January), RIKEN, Kobe	2020/1/30	国内
３項漸化式を用いたガウス求積における分点と重みの精度保証法（口頭)	小林 領, 関根 晃太, 柏木 雅英	第3回 精度保証付き数値計算の実問題への応用研究集会 (NVR 2019), 高松	2019/11/30	国内
Verification method for sparse least squares problems (口頭)	A. Minamihata	The 38th JSST Annual International Conference on Simulation Technology	2019/11/5	国内

A note on verification methods for sparse non-symmetric linear systems（口頭）	A. Minamihata, T. Ogita, S. Oishi	International Conference on Matrix Analysis and its Applications	2019/9/10	国外
非対称疎行列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の数値的比較（口頭）	南畑 淳史, 荻田 武史, 大石 進一	日本応用数理学会2019年度 年会	2019/9/4	国内
疎行列を係数とする最小二乗問題の精度保証付き数値計算法について（口頭）	南畑 淳史	第3回 精度保証付き数値計算の実問題への応用研究集会（NVR 2019），高松	2019/11/30	国内
簡易Newton法の収束定理からみた偏微分方程式の解の精度保証付き数値計算法（口頭）	関根 晃太, 中尾 充宏	第3回 精度保証付き数値計算の実問題への応用研究集会（NVR 2019），高松	2019/11/30	国内
An operator matrix expression to the solution of linear operator equations in Banach space and its application（口頭）	K. Sekine, M. T. Nakao, S. Oishi	Numerical methods for spectral problems: theory and applications, RIMS	2019/9/2	国内
辺または一点に特異性を持つ2変数関数の精度保証付き二重積分（口頭）	柏木 雅英	第3回 精度保証付き数値計算の実問題への応用研究集会（NVR 2019），高松	2019/12/1	国内
Constructive error analysis of a full-discrete finite element method for	K. Hashimoto, T. Kimura,	The 9th International Congress on Industrial and	2019/7	国外

the heat equation (口頭)	T. Minamoto, M. T. Nakao	Applied Mathematics (ICIAM 2019), University of Valencia, Spain		
H^1_0 関数の直交多項式近似に対する2次の誤差評価の最良定数について (口頭)	木下武彦 渡部善隆 山本野人 中尾充宏	日本数学会 秋季総合分科会, 金沢大学	2019/9	国内
線形熱方程式の時間周期解に対する近似解の事前誤差評価について (口頭)	木村 拓馬 皆本 晃弥 中尾 充宏	第3回 精度保証付き数値計算の実問題への応用研究集会 (NVR 2019), 高松	2019/11	国内
非線形発展方程式の初期値問題に対する数値的検証法 (口頭)	橋本弘治 中尾充宏	第24回　情報・統計科学(BIC)シンポジウム, 九州大学伊都キャンパス	2019/12	国内
有界作用素のレゾルベントに対するある近似作用素の強収束性について (口頭)	木下武彦 渡部善隆 中尾充宏	日本数学会年会, 日本大学駿河台キャンパス	2020/3	国内
High Performance Accuracy Assurance Toward to Supercomputer Fugaku (ポスター)	片桐孝洋、荻田武史	米国コロラド州デンバー (国際会議 SC19	2020/11/17	国外
精度保証付き数値計算ライブラリの運用に向けて (口頭)	片桐孝洋、石黒史也、荻田武史、尾崎克久、大島聡史、永井亨	大学ICT推進協議会 2019年度年次大会, 福岡市	2020/12/12	国内
Performance Evaluation of Accurate Matrix-	石黒史也、片桐孝洋、	International Conference on High Performance	2020/1/15	国内

matrix Multiplications on GPU Using Sparse Matrix Multiplications（ポスター）	大島聡史、永井亨	Computing in Asia-Pacific Region (HPCAsia2020)，福岡市		
High-Performance Computing of Thin QR Decomposition on Parallel Systems（ポスター）	T. Terao K. Ozaki T. Ogita	Messe Frankfurt (ISC19)	2019/6/19	国外
前処理付きCholesky QRアルゴリズムとその応用（口頭）	寺尾 剛史 尾崎 克久 荻田 武史	北見市民会館（SWoPP2019）	2019/7/25	国内
Preconditioned Choleskey QR algorithms in an oblique inner product（口頭）	T. Terao K. Ozaki T. Ogita	Liblice, Czech Republic (MatTriad2019)	2019/09/08-13	国外
実対称行列の全固有値に対する精度保証法と区間への拡張（口頭）	寺尾 剛史 尾崎 克久 荻田 武史	サンポートホール，高松市（第3回精度保証付き数値計算の実問題への応用研究集会）	2019/11/30	国内
Upper bound of maximum norm of inverse matrix in test set and its application（口頭）	K. Ozaki	Taipei International Convention Center（APCOM2019）	2019/12/19	国外
Verified Numerical Computations for Eigenvalue Problems on Large-Scale Parallel Systems（口頭）	T. Terao K. Ozaki T. Ogita	Hyatt Regency Seattle（SIAM PP20）	2020/02/15	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（学会誌・雑誌等名）	発表した時期	国内・外の別
Iterative refinement for symmetric eigenvalue decomposition II: clustered eigenvalues	T. Ogita, K. Aishima	Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics, Vol. 36, Issue 2 (2019), pp. 435-459.	2019/10	国外
An improved method for verifying the existence and bounds of the inverse of second-order linear elliptic operators mapping to dual space	Y. Watanabe, T. Kinoshita, M. T. Nakao	Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics, Vol. 36, Issue 2 (2019), pp. 407-420.	2019/7	国外
Constructive error analysis of a full discrete finite element method for the heat equations	K. Hashimoto, T. Kimura, T. Minamoto, M.T. Nakao	Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics, Vol. 36, Issue 2 (2019), pp. 777-790.	2019/9	国外
Colony Fingerprinting - a Novel Method for Discrimination	T. Tanaka, A. Kogiso, Y. Maeda, T. Matsunaga	Proceedings of the 2019 IEEE International Symposium on Circuits and Systems, pp. 1-5.	2019/5	国外

of Food-Contaminating Microorganisms Based on Bioimage Informatics				
Rapid Discrimination of Fungal Species by the Colony Fingerprinting	Y. Maeda, Y. Sugiyama, T.-K. Lim, M. Harada, T. Yoshino, T. Matsunaga, T. Tanaka	Biosensors and Bioelectronics, Volume 146, Article 111747.	2019/12	国外
LU-Cholesky QR algorithms for thin QR decomposition	T. Terao, K. Ozaki, T. Ogita	Parallel Computing, 92 (2020), Article 102571	2019/10	国外
An a posteriori verification method for generalized real-symmetric eigenvalue problems in large-scale electronic state calculations	T. Hoshi, T. Ogita, K. Ozaki, T. Terao	Journal of Computational and Applied Mathematics	2020/2	国外
Iterative refinement for singular value decomposition based on	T. Ogita, K. Aishima	Journal of Computational and Applied Mathematics, 369 (2020), Article 112512.	2019/10	国外

matrix multiplication				
Reproducible BLAS routines with tunable accuracy using Ozaki scheme for many-core architectures	D. Mukunoki, T. Ogita, K. Ozaki	Lecture Notes in Computer Science, 12043 (2020), pp. 516-527.	2020/3	国外
Modified error bounds for approximate solutions of dense linear systems	A. Minamihata, T. Ogita, S. M. Rump, S. Oishi	Journal of Computational and Applied Mathematics, 369 (2020), Article 112546.	2019/11	国外
Performance and energy consumption of accurate and mixed-precision linear algebra kernels on GPUs	D. Mukunoki, T. Ogita	Journal of Computational and Applied Mathematics, 372 (2020), Article 112701.	2020/1	国外

（別添２）

「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）」
実施計画

$\boxed{\text{単独サブ課題}}$

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）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取り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（数値計算的）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っ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

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」でなければできないこと

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。

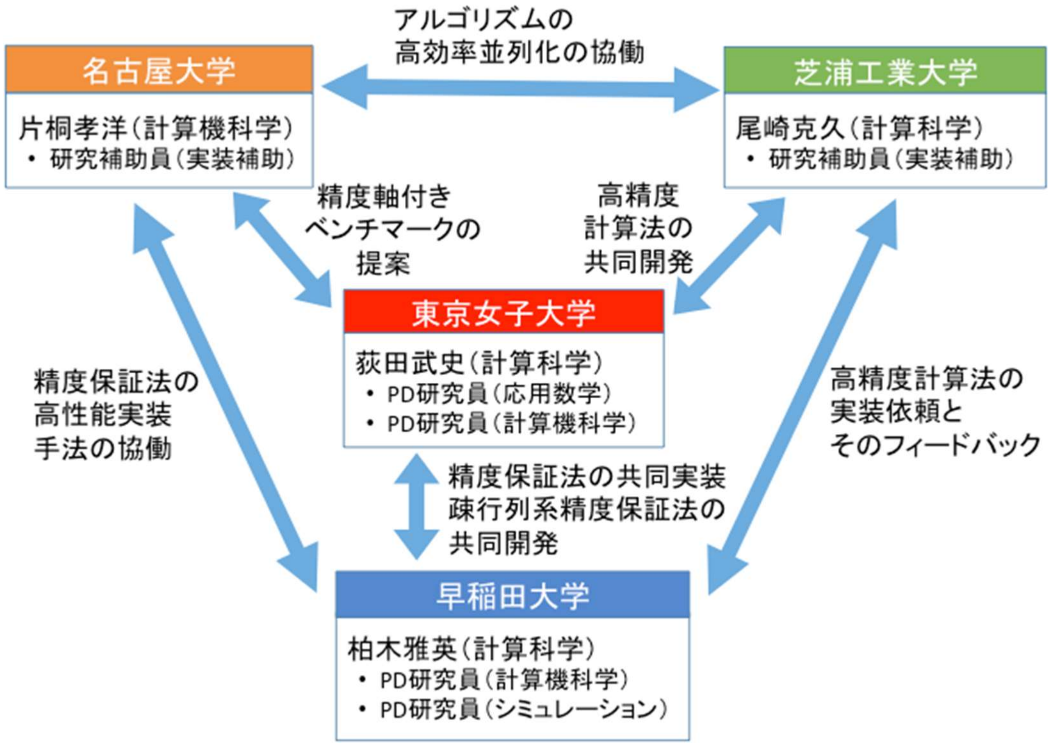
（６）年次計画

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 （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 （東京女子大学・荻田武史）	（目標） 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。 (実施内容) 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。	（目標） 100万次元の線形問題に対する精度保証を可能とする。 (実施内容) 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。	（目標） 大規模線形問題に対し、問題の困難さに応じて、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。 (実施内容) ポスト京を想定した高速な精度保証アルゴル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。	（目標） 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。 (実施内容) 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。

（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)　比較的実際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)の回答のとおりに目標を設定した。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

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) 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（数値計算的）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っ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