

インターネットを利用した反復解法のテスト

長谷川 秀彦（筑波大学） 福井 義成（理化学研究所）

1. はじめに

連立1次方程式 $Ax = b$ に対する反復解法は数値シミュレーションの核となる処理だが、問題 A, b によって最適な解法が異なる。最適な解法を選択する簡単な方法はいろいろな反復解法で解くことだが、大規模問題に対してプログラムを書かずにテストするのは困難である。今回、ITBL (Information Technology Based Laboratory) プロジェクトの一環として、ITBL ポータルを用いた反復解法の評価システム TIS (Test of Iterative Solvers) を構築した。利用者は問題データをインターネット経由で TIS に送信し、そのデータに対する解と評価データが取得できる。最適な解法がわかったなら、その解法プログラムを入手して使えばよい。データの傾向が変わって現在の解法に向かなくなったり、新たな解法が提案されたりしたときは、再び合う解法を探せばよい。これまでは、アルゴリズムや解法プログラムは公開されていても、それらを組み合わせてテストするには作業が必要だった。TIS ではこのような労力を軽減し、多くの評価が手軽にできる。

2. TIS と ITBL

これまでにインターネット上で提供されてきたサービスは、

- (1) データやプログラムなどを自由に取得できるようにしたもの（例：www.netlib.org）
 - (2) キーワードなどの入力に対して検索結果を返すもの（例：www.google.co.jp）
- などであり、無料の計算サービスは提供されていない。計算資源の制約がゆるいなら、(2) の拡張として、利用者から提供された数値データに対して計算を行って利用者には有益な結果を返すことができる。

ITBL はネットワーク上で広域に分散している研究資源を共有化した仮想研究室を目指すもので、IT に基づく新しい研究スタイルを探求している。具体的には、

- ・ どこからでも利用できる（地理的制約からの解放、勤務地制約からの解放）
- ・ 誰でも利用できる（組織的制約からの解放）
- ・ いつでも利用できる（時間的制約からの解放）

を目指し、時間的・空間的制約を受けないインターネットを介した共同研究の実施、研究機関や大学で開発されたソフトウェアやノウハウの活用、商用を含むソフトウェア試用環境整備による HPC 利用技術の普及、計算科学技術がより広く研究開発、教育、企業活動に使われるような普及・啓発活動などを行うことになっている。

ITBL がこれまでのシステムと大きく異なるのは、不特定多数の利用者に対してきちんとしたサービスを提供する点である。計算科学に対する裾野を広げるには、研究者との付き合いはなくとも必要に応じて利用でき、それなりの有意義な情報が得られ、その結果に基づいて具体的な議論のできる環境を提供する必要がある。

ITBL ポータルは、(1) 共同研究の調整や研究資料等のグループウェア部、(2) 計算リ

ソースを簡単に用いるための計算サービス部、(3) 商用アプリケーションの試用/評価部 (計算サービスの機能を利用) などから構成されている。TIS はこれらの機能を利用したひとつの実験的アプリケーションである。

利用者と管理者 (サービスの提供側) のメリットは

- ・ 利用者: プログラムを作ることなく、自分のデータにふさわしい解法の選択ができる
 - ・ 管理者: 利用者から送られたデータが解法やコンピュータの評価に使える
- である。管理者は、評価用プログラムと計算資源を提供し、利用者のために結果と評価データを計算する。サービスの対価として、システムはユーザのデータを保持し、新たな解法評価に利用する。たとえば、新しい解法が提案されたとき、蓄積されたすべての問題でテストすれば、新しい解法が大まかに評価できる。将来的には、「解法を提供する人 (蓄積されたデータを使って解法を評価してもらいたい人)」もユーザとして扱いたい。データの提供者、アルゴリズムの提供者、計算資源の提供者と3者がそろえば、コミュニティとしてはよりよい発展性が期待できる。

現在の TIS システムの仮定は

対象は一般疎行列とし、一般実行列に対する Krylov 部分空間法アルゴリズムを用意

データ形式は $i, j, a_{i,j}$ で、サイズは CD-R 1 枚 (700MB) 程度まで

計算環境として WS と NEC SX-6 を予定 (並列版は今後)

である。

3. おわりに

テスト運用を始めたばかりなので、どのようなことが起こるかはまだわかっていない。また、前処理をどのように組み合わせて評価すればいいかも大きな問題である。しかし、このデータをもとに、問題を解くことなく最適な解法が選択できるシステムができるのが理想である。

参考文献等:

- 1) <http://www.itbl.jp/>
- 2) 長谷川 秀彦. 反復解法の比較に対する指針について、日本応用数理学会 1997 年度年会講演予稿集、名古屋、1997-10、名古屋大学東山キャンパス、1997, pp. 172-173
- 3) 鄭 波. 大規模連立一次線形方程式のためのウェブリソースの開発、研究集会「科学技術計算の数理的諸問題と高速解法」、2004-3、東京大学工学部 (口頭発表)
- 4) 長谷川里美、長谷川秀彦、藤野清次訳. 反復法 Templates. 東京、朝倉書店、1996, 166p. (Richard Barrett et al. Templates for the Solution of Linear Systems: Building Blocks for Iterative Methods. SIAM 1994 の訳) (応用数値計算ライブラリ 1)
- 5) 福井 義成、長谷川 秀彦. ITBL におけるアルゴリズムとコンピュータの評価について、第 33 回数値解析シンポジウム講演予稿集, pp. 106-109 (2004)