

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

福井 義成 (理化学研究所) 長谷川 秀彦 (筑波大学)

1. はじめに

ITBL ポータルにおけるアルゴリズムとコンピュータの評価の一例として、反復解法を用いた連立1次方程式の評価システム TIS (Test of Iterative Solvers) を構築した。TIS の利用者は問題データをポータル経由で送信し、そのデータに対する解と評価データを取得する。サーバ側 (管理者) は、利用者から送られたデータを蓄積し、そのデータを新たな解法の評価や、コンピュータの評価に活用する。これによって、素データの蓄積と評価対象の拡大を同時に行うことを計画している。

2. ITBL とは

2.1 ITBL について

ITBL は Information Technology Based Laboratory の略であり、ネットワーク上で広域に分散している研究資源の共有化を図った仮想研究所 (室) を目指すもので、IT に基づく新しい研究 (所) スタイルを探求している。一般的概念としての ITBL は、計算資源・研究資源 (計算機ハードウェア、ソフトウェア、データベース、人的資源、知識、ノウハウ、情報、(大規模) 実験施設・設備) の共有化である。

2.2 ITBL の目指すもの

ITBL の目指すものは

- ・ 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)

であり、ITBL は新しい出会いの場でもある。

2.3 ITBL ポータル

以下の事項を実現するため、ITBL ポータルの開発整備を行っている (図1、図2)。

- ・ 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実施の場
- ・ 研究機関や大学等で開発されたソフトウェア、ノウハウという知的資産活用 の場
- ・ 上記知的資産、商用ソフトウェア試用環境整備による HPC 利用技術普及の場
- ・ ITBL のインターネット窓口
- ・ 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利用推進、普及・啓発

ITBL ポータルは大きく3つの部分に分かれる。

- (1) 共同研究の調整や研究資料等のグループウェア部
- (2) ITBL の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)

以上の機能を利用し、ITBL の目的を達成する 1 つの手段として、計算科学関連のコミュニティの立ち上げを行っている。

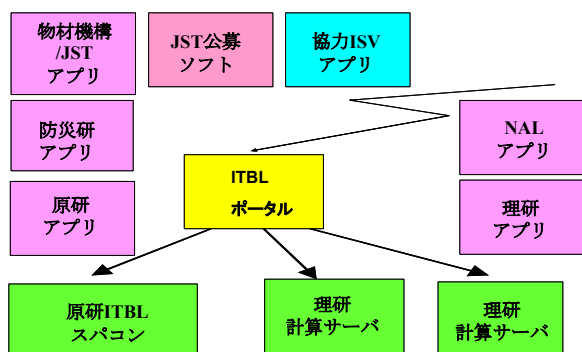


図 1. ITBL ポータルの概要

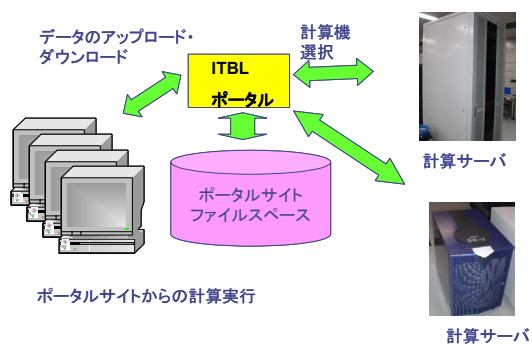


図 2. ITBL ポータルの仕組み

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。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る。その結果に基づいてネットワーク上で具体的な議論のできる環境を提供すれば、計算科学に対する裾野は広がるだろう。何より、手軽に実験できるということは、アルゴリズムの有用性を確認するうえでは重要なことである。

3. 「アルゴリズムとコンピュータの評価」とは

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こなかった。計算資源の制約がゆるいなら、(2) の拡張として、計算の種類は限定するが、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。その一例として、連立 1 次方程式 $Ax = b$ の係数行列 A と右辺 b を入力とし、方程式 $Ax = b$ を複数の反復解法で解き、解 x と収束の履歴を提供するシステム TIS (Test of Iterative Solvers) を構築した。これまでは、解法プログラムやデータ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であり、結果によってはそれまでの作業が無駄になることも少なくなかった。TIS システムではこのような労力を軽減すると同時に、多くの評価が手軽にできるようになっている。

TIS の利用者は ITBL のポータルサイト <http://www.itbl.jp/> にアクセスし、いくつかの項目を入力し、手元から方程式の係数行列 A と右辺 b をアップロードする(図 3)。TIS のサーバは受付番号をメールで送付する。利用者は受付番号をもとに計算状況の問い合わせ、解 x と収束履歴(グラフ)のダウンロードを行う(図 4)。サーバは、データの受付、データの蓄積、計算の実行、結果の管理などを行う。

このようなサービスを無料で提供するには、利用者と管理者(サービスを提供する側)になんらかのメリットが必要であり、完全なボランティア・サービスでは長続きしない。それぞれのメリットは

- ・ 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を選択ができる
- ・ 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。

TIS の利用者は自分のデータを提供することにより、解と評価データを手に入れる。自分のデータにベストな解法がわかったなら、その解法プログラムを手に入れて使えばよい。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、再びデータを送って合う解法を探せばよい。

管理者は、送られたデータを複数の解法で解いて、利用者のために結果と評価データを用意する。利用者のために評価用プログラムと計算資源を確保・提供するが、TIS に対するデータ転送と TIS からのダウンロードは利用者に任せておく（積極的な通知・送付などは行わない）。システムでは利用者へのサービスの対価として、ユーザのデータを保持し、新たな解法の評価に用いる。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をすることで、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、インターフェースの問題など、システム上の問題点が多く、現時点では夢にすぎない。しかし、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。

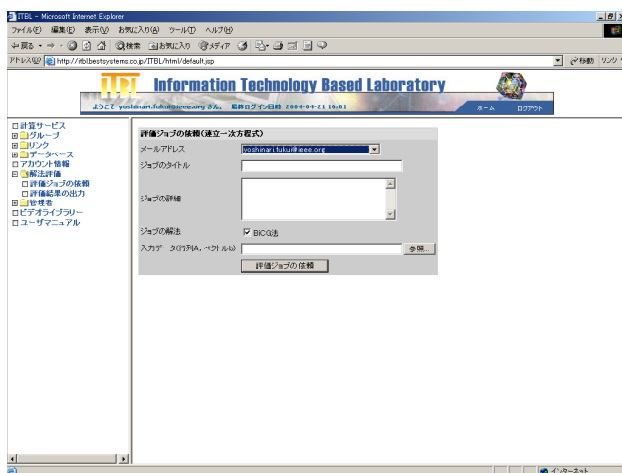


図 3. 評価依頼画面

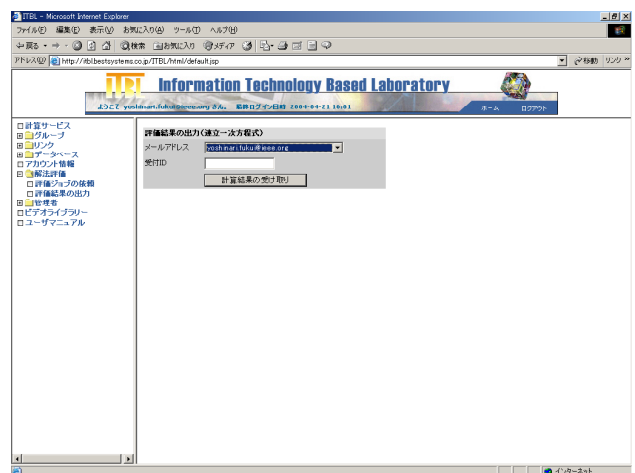


図 4. 結果受取り画面

データを用いたアルゴリズムの評価は計算環境に依存しない（ここでは計算スピードの差などはアルゴリズムの評価とは言わず、コンピュータの評価に含めて考える）。いっぽう、あるデータとアルゴリズムの組を異なった計算環境で行えば、計算環境の比較になる。利用者から依頼された時点で計算するだけでなく、蓄積されたデータを将来の新しい計算環境で用いることによって新しい計算環境の基本的な特性データも得られるだろう。

これらを模式的に示したのが図 5 である。コンピュータとデータを固定して複数のアルゴリズムを評価する、コンピュータとアルゴリズムを固定して複数のデータで評価する、データとアルゴリズムを固定して（時間を隔てた）複数のコンピュータで評価するといった使い方ができる。評価作業は、言うなれば、3次元の表を1行（列）ごとに評価データで埋める仕事であり、われわれはそのために計算資源を提供し、利用者からデータを手に入しようとしている。ここで得られた比較結果を一般利用者に役立つ形式で公開することも必要だが、現時点ではどのような形式で提供すべきかに対するアイデアはない（計算科学に現れる数値データをどのように分類・特徴付けするかがいちばんの問題）。

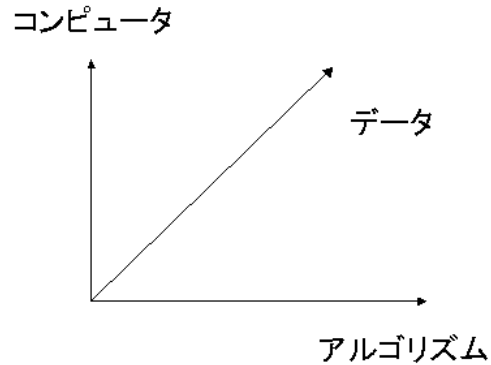


図5. アルゴリズムとコンピュータの評価

4. おわりに

ITBL ポータルにおいて、計算サービスとデータの交換によって、アルゴリズムとコンピュータの評価に利用できる基本的なデータが取得できるようになりつつある。現在、アルゴリズムとして連立1次方程式に対する反復解法を用いたシステムを構築中である。現システムの仮定は

利用者は限定しない（だれでも使える）

係数行列は一般疎行列を対象

データ形式は $i, j, a_{i,j}$

データサイズは CD-R 1枚（700MB）程度まで

Krylov 部分空間法アルゴリズムを用意

最初は一般実行列（対称行列、複素行列は今後）

計算環境として WS と NEC SX-6 を予定（並列版は今後）

Templates 準拠のプログラム、内部では CRS 形式

である。

利用者の使いやすいデータ形式、データの特徴分類、アルゴリズムの品揃えなどについては、システムを運営しながら決めていくつもりである。また、解法アルゴリズムに前処理を組み込んだものの評価をどのように提供するかも大きな問題である。

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)