

# ITBL における反復解法を用いた連立 1 次方程式の評価システム

福井義成  
理化学研究所

長谷川秀彦  
筑波大学

ITBL ポータル上のアルゴリズムと計算環境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 では、利用者はプログラムを作ることなく自分の問題にふさわしい解法の選択ができる。管理者は利用者から送られたデータを新しい解法や計算環境の評価に使うことができる。

## The Test of Iterative Solvers on ITBL

Yoshinari Fukui  
RIKEN

Hidehiko Hasegawa  
University of Tsukuba

As an example of evaluation of algorithms and a computing environments, we developed the TIS which is an evaluation system of the iterative solver for simultaneous linear equations on the ITBL portal. On this system, users can make a selection of a suitable iterative solver for the data without making any program, and the administrator can use them for the evaluation of new iterative solvers and computing environments.

### 1. はじめに

これまでの Grid システムは、主として大規模な分散コンピュータ、分散ファイルシステムとして使われている。ITBL (Information Technology Based Laboratory)<sup>1)</sup> では、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)を目指しており、IT に基づく新しい研究(所)のスタイルを探し求めている。このような新しい環境における研究コミュニティの創生の一例として、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 )<sup>2,3)</sup> を構築している。TIS の利用者は問題のデータを ITBL 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得る。ITBL 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、計算環境の評価に活用する。

### 2. アルゴリズムと計算環境の評価

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。ITBL ポ

ータルがもつ計算サービスの機能を利用して構築された TIS は、ITBL ポータル上でアルゴリズムと計算環境の評価の一例として活用できる。

これまでにインターネット上で提供されているサービスは、

- 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](http://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](http://www.google.co.jp) )

などである。計算資源の制約から、ユーザに対する計算サービスなどは困難だった。ところが、Grid 環境によって計算資源に対する制約がゆるくなってきたため、2 の拡張として、数値データを計算加工して利用者に有益な結果を返すことが可能になった。しかも、計算手続きの詳細を明かすことなく有意義な結果だけを提供できるため、解法プログラムの管理問題も発生しない。

TIS では、連立 1 次方程式  $Ax=b$  の係数行列  $A$ 、右辺  $b$  と初期値  $x_0$  を入力とし、 $Ax=b$  を複数の反復解法で解き、解  $x$  と収束の履歴グラフを提供する。いうなれば、インターネット上の大規模連立 1 次方程式用お勧め解法を表示機能付き電卓である。これまでは、公開された解法プログラムやデータはあっても、それらを組み合わせてテストする環境はなく、自分で計算環境を用意して両方を組み合わせるための作業が必要だった。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。また、付加的な情報を提供することも可能である<sup>4)</sup>。

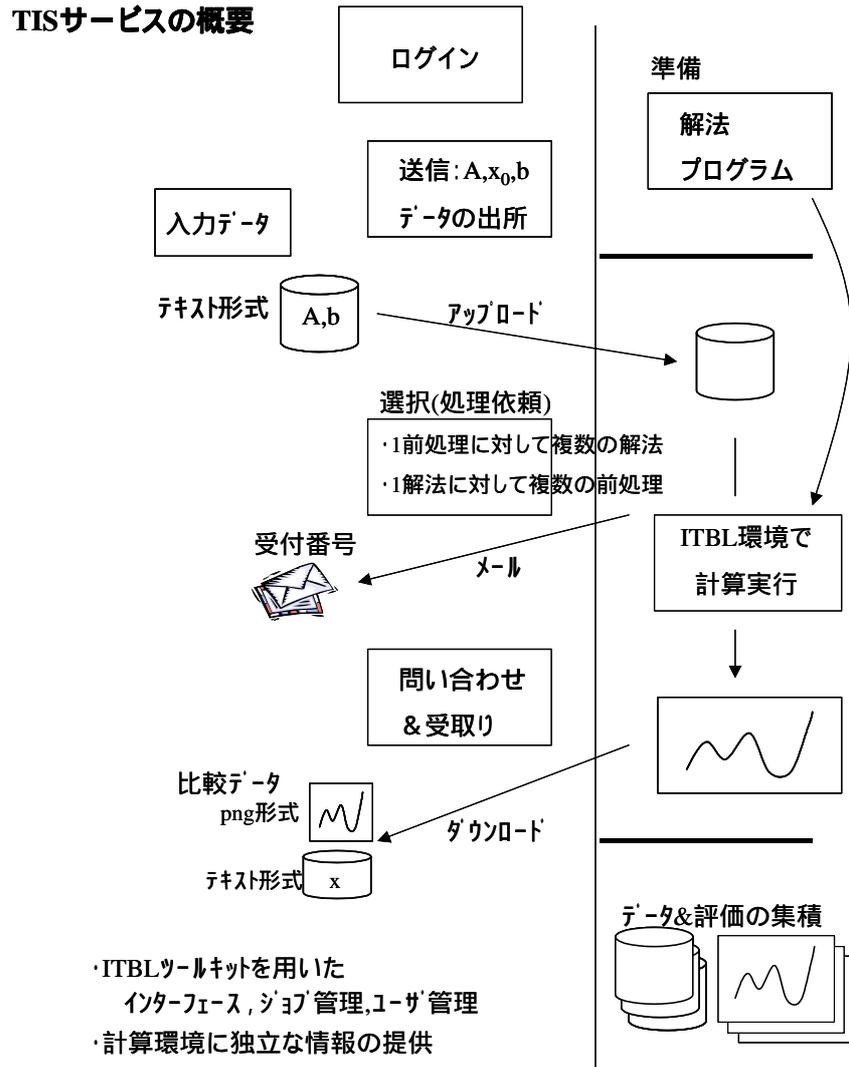
同様な考え方のシステムに Test for Large Systems of Equations (Grid TLSE) がある<sup>5)</sup>。Grid TLSE は Grid 計算環境上で DIET ミドルウェアを用いて構築され、与えられた連立 1 次方程式の係数行列 (大規模疎行列) に対して、どのようなオーダリング、どのような直接解法が計算時間 (演算量) を最小化するかの判断を提供する。TIS が複数の反復解法で実際に問題を解くのに対し、Grid TLSE では疎行列直接解法の前処理段階での見積もりを計算する。疎行列直接解法を実行するのではないため、大きな計算コストを払うことなく、ユーザに最適な解法についての情報が提供できる。

### 3. Test of Iterative Solvers の実際

TIS の利用者は ITBL ポータルにアクセスし、いくつかの項目を入力し、手元から方程式の係数行列  $A$ 、右辺  $b$ 、必要なら初期値  $x_0$  をアップロードする。TIS のサーバは利用者に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。ユーザ管理、データの受付、データの蓄積、計算の実行、ジョブ管理、結果の蓄積などは、すべて ITBL ポータルの機能を利用する。

受け付けるデータは MatrixMarket<sup>6)</sup> (係数行列のみ) のフォーマットに準拠し、右辺ベクトル  $b$  の値を付加する。初期値  $x_0$  は与えなくても良いが、与える場合は  $b$  の後方におく。% で始まる行はコメント行で、任意の場所に許す。TIS ではデータの先頭部分にコメントとして受け付けたデータについての情報を付加し、以後の解析に役立てる。N は次元 (ベクトルデータの数)、NNZ は非ゼロ要素数 (行列データの数) である。入力データの形式は以下の 3 通りで、(2) の場合は NNZ を省略してもよい。

(1) % コメント	(2) % コメント	(3) % コメント
N, NNZ	N, NNZ	N, NNZ
i, j, a <sub>i,j</sub>	b	b
b	{x <sub>0</sub> }	i, j, a <sub>i,j</sub>
{x <sub>0</sub> }	i, j, a <sub>i,j</sub>	{x <sub>0</sub> }



このようなサービスを行うためには、利用者と管理者（サービスを提供者）になんらかのメリットが必要であり、完全に無料のボランティア・サービスとしては長続きしない。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新しい解法や計算環境の評価に使える
- である。利用者は自分のデータを提供することで、解と評価データが入手できる。自分のデータ

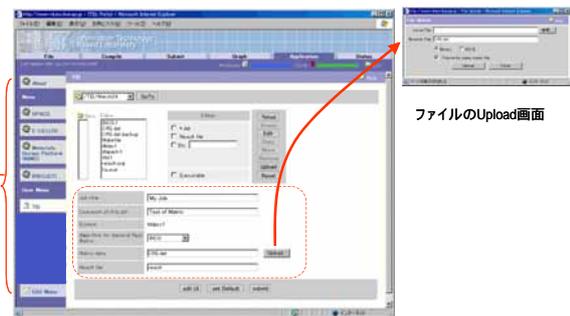
にベストな解法が決まったなら、その解法プログラムを入手して使えばよい。データの傾向が変わって現在の解法に向かなくなったり、新たな解法が提案されたりしたときは、再びデータを送って合う解法を探せばよい。管理者は送られたデータから結果と評価データを作成し、利用者のために用意する。評価用プログラムと計算資源を確保・提供するが、データ転送(アップロード、ダウンロード)は利用者に任せ、積極的な通知・送付などは行わない。システムではサービスの対価として、ユーザのデータを保持し、新たな解法の評価に用いる。たとえば、新しい解法が提案されたとき、蓄積されたすべての問題に適用することで、新しい解法の大まかな評価ができる。

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だろう。アルゴリズムの数学的評価は計算環境に依存しない。一方、データとアルゴリズムの組を異なる計算環境で用いれば、計算環境の比較ができる。計算を依頼された時点だけでなく、蓄積されたデータを新しい計算環境で用いることにより新しい計算環境の基本的な特性データも得られる。これは、アルゴリズムの評価であり、計算環境の評価にもなっている。

#### 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評価用の基本的なデータが取得できるシステムとして、連立1次方程式に対する反復解法の評価システム TIS を構築した。このシステムは、開かれたコミュニティに対する仮想研究所としての機能を持つと同時に、インターネット上の計算サービスのさきがけとも言える。使いやすさ、アルゴリズムの品揃えなどは今後の課題だし、データ提供サイトと TIS を組み合わせてデータとアルゴリズムの特徴分類をすることなどは今後の新たな研究課題である。

百聞は一見にしかず。 <http://www.itbl.jp/> からお試しを。



参考文献等：

- 1) <http://www.itbl.jp/>
- 2) 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予稿集, 熱海, 2004, pp. 106-109.
- 3) 長谷川秀彦, 福井義成. インターネットを利用した反復解法のテスト, 日本応用数学会 2004年年会講演予稿集, 東京, 2004-10, 中央大学後楽園キャンパス, 2004, pp. 408-409.
- 4) 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)
- 5) <http://www.enseeiht.fr/lima/tlse/>
- 6) <http://math.nist.gov/MatrixMarket/>