

大規模固有値解法の次世代型並列アルゴリズムと

ソフトウェアの開発

Development of next generation parallel algorithms and software for solving large-scale eigenvalue problems

櫻井鉄也

筑波大学システム情報系

1. 研究目的

本プロジェクトでは、各種の科学技術計算アプリケーションで現れる大規模な固有値問題および固有値計算をはじめとする線形計算に関連のある各種機械学習計算を対象として、次世代ハードウェアでの利用を想定した並列アルゴリズムの研究とその高性能実装技術の開発を目的とする。また、スペクトラルクラスタリングや次元削減手法、グラフの異常検知、非線形非負値行列分解によるディープニューラルネットワークなど、固有値問題等の線形計算に基づく機械学習アルゴリズムの開発と評価を行う。

2. 研究成果の内容

本プロジェクトにおいて科学技術シミュレーションや機械学習計算の基盤となる各種アルゴリズムと実装技術の開発を進め、昨年度に引き続き Oakforest-PACS (以下 OFP)を利用して、メニーコア向けコードの高性能化をさらに進めた。特に並列性の高い複素モーメント型固有値解法とその構造解析への産業応用展開、固有値計算を用いたグラフの異常検知手法、テンソルネットワーク計算、ディープニューラルネットワーク最適化を応用としたアルゴリズム改良や性能評価に取り組んだ。さらに、昨年度人工知能分野トップ国際会議で発表した複素モーメント型並列固有値解法の理論をベースとした独自の次元削減手法について、その並列実装の高度化を進めた。

3. 学際共同利用が果たした役割と意義

本研究プロジェクトでは、並列アルゴリズムの基礎開発における中規模計算から、実アプリケーションへの適用に向けた実装・性能評価等の大規模計算まで幅広い計算を行っており、また Xeon Phi 向けのソフトウェア開発も行ってきた。応用が各種科学技術計算および機械学習手法であることから、本研究プロジェクトでは幅広いスケールでの計算を行う事が必要であり、この点が本プロジェクトを学際共同利用として実施した意義である。また、この学際共同利用を通して、物質科学分野の研究者や構造

解析関連の企業との共同研究が進んでいる。

4. 今後の展望

人工知能・機械学習技術が近年各応用分野から注目されているが、我々はスペクトラルクラスタリングや **Eigenmap**、グラフの異常検知手法などの固有値計算に基づく機械学習アルゴリズムや新しいディープニューラルネットワーク学習計算手法の開発を進めており、昨年度の AI トップ国際会議 AAAI 会議に引き続き、本年度も IJCAI への採択など成果が出ている。学際共同利用により、機械学習手法の理論基盤だけでなく、並列実装の高度化への今後の展開も期待できる。今後も **OFF** や **Cygnus** を活用し、開発するアルゴリズムの高性能化を押し進め、実応用における性能評価・実証に取り組み、さらに次世代のスーパーコンピュータへの展開に繋げる。

5. 成果発表

(1) 学術論文

- [1] A. Imakura, T. Sakurai, Data Collaboration Analysis Framework Using Centralization of Individual Intermediate Representations for Distributed Data Sets, *ASCE-ASME Journal of Risk and Uncertainty in Engineering Systems, Part A: Civil Engineering*, 6(2), 04020018 (2020).
- [2] Y. Futamura, X. Ye, A. Imakura, T. Sakurai, Spectral anomaly detection in large graphs using a complex moment-based eigenvalue solver, *ASCE-ASME Journal of Risk and Uncertainty in Engineering Systems, Part A: Civil Engineering* 6(2), 04020010 (2020).
- [3] X. Ye, H. Li, A. Imakura, T. Sakurai, Distributed Collaborative Feature Selection Based on Intermediate Representation, *Proceedings of the Twenty-Eighth International Joint Conference on Artificial Intelligence (IJCAI-19)*, pp. 4142--4149 (2019).
- [4] H. Chen, J. Meng, T. Sakurai, X. Wang, Backward error analysis for linearizations in heavily damped quadratic eigenvalue problem, *Numerical Linear Algebra with Applications*, Vol. 26, e2253 (2019).
- [5] A. Imakura, Minimal residual-like condition with collinearity for shifted Krylov subspace methods, *Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics*, 36 (2), pp. 643--661 (2019).
- [6] A. Imakura, Y. Yamamoto, Efficient implementations of the modified Gram-Schmidt orthogonalization with a non-standard inner product, *Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics*, 36 (2), pp. 619--641 (2019).

- [7] A. Alvermann, A. Basermann, H.-J. Bungartz, C. Carbogno, D. Ernst, H. Fehske, Y. Futamura, M. Galgon, G. Hager, S. Huber, T. Huckle, A. Ida, A. Imakura, M. Kawai, S. Kocher, M. Kreutzer, P. Kus, B. Lang, H. Lederer, V. Manin, A. Marek, K. Nakajima, L. Nemeč, K. Reuter, M. Rippl, M. Rohrig-Zollner, T. Sakurai, M. Scheffler, C. Scheurer, F. Shahzad, D. S. Brambila, J. Thies, G. Wellein, Benefits from using mixed precision computations in the ELPA-AEO and ESSEX-II eigensolver projects, Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics, 36 (2), pp. 699-717 (2019).

(2) 学会発表

- [1] A. Imakura, T. Sakurai, A novel dimensionality reduction method using a complex moment-based subspace, International Congress on Industrial and Applied Mathematics (ICIAM2019), Valencia (2019).
- [2] A. Imakura, T. Sakurai, Nonlinear semi-NMF based method for deep neural network computations and its improvements, International Congress on Industrial and Applied Mathematics (ICIAM2019), Valencia (2019).
- [3] T. Sakurai, Y. Funamura, X. Ye, A. Imakura, A complex moment-based spectral method for detecting anomalous structures in large graphs, International Congress on Industrial and Applied Mathematics (ICIAM2019), Valencia (2019).
- [4] T. Sakurai, T. Yamashita, Y. Futamura, A. Imakura, Development of Efficient Algorithms for Higher Order Tensor Renormalization Group, Computational Approaches to Quantum Many-body Problems, Kashiwa (2019).
- [5] T. Sakurai, Development of an Eigen-analysis Engine for Large-scale Simulation and Big Data Analysis, SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing (PP20), Seattle (2020).
- [6] 櫻井鉄也, 積分型固有値解法の開発とその AI への展開, RIMS 研究集会 諸科学分野を結ぶ基礎学問としての数値解析学, 京都 (2019).

使用計算機	使用計算機 に○	配分リソース※	
		当初配分	追加配分
Cygnus	○	5000	
Oakforest-PACS	○	225000	
※配分リソースについてはノード時間積をご記入ください。			