

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学習など、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線形計算アルゴリズムの理論および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進めた。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を進めた。固有値計算を用いたグラフの異常検知手法、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。複素モーメント型固有値解法のアルゴリズム中で現れる複数一般化シフト・複数右辺線形方程式を高速に解く解法を開発し、**OFP** 上での実アプリケーションから現れる行列に対する数値実験で、従来アプローチと比べ高速となることを示した。この成果は **HPC Asia 2021** の論文として採択された (学術論文[1])。さらに、2019 年度に人工知能分野トップ国際会議 **AAAI** 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、その研究成果をまとめた論文が **HPC Asia 2021** に採択された (学術論文[2])。

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 Intel 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必要があるであり、それを可能となった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およびそのユーザー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、分散協調機械学習技術、ディープニューラルネットワーク学習計算手法等の開発を進めてきており、AI 分野トップ国際会議 AAAI や 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、並列実装の高度化をさらに推し進めていく。今後も OFP や Cygnus を活用し、開発するアルゴリズムの高性能化を実施し、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] Y. Futamura, T. Sakurai, Efficient Contour Integral-based Eigenvalue Computation Using an Iterative Linear Solver with Shift-Invert Preconditioning, HPC Asia 2021: The International Conference on High Performance Computing in Asia-Pacific Region, pp. 90-99 (2021).
- [2] T. Yano, Y. Futamura, A. Imakura, T. Sakurai, Efficient Implementation of a Dimensionality Reduction Method Using a Complex Moment-Based Subspace, HPC Asia 2021: The International Conference on High Performance Computing in Asia-Pacific Region, pp. 83-89 (2021).

(2) 学会発表

- [1] Y. Futamura, T. Sakurai, Efficient Contour Integral-based Eigenvalue Computation Using an Iterative Linear Solver with Shift-Invert Preconditioning, HPC Asia 2021: The International Conference on High Performance Computing in Asia-Pacific Region, online (2021). (学術論文 [1]に付随した発表)
- [2] T. Yano, Y. Futamura, A. Imakura, T. Sakurai, Efficient Implementation of

a Dimensionality Reduction Method Using a Complex Moment-Based Subspace, HPC Asia 2021: The International Conference on High Performance Computing in Asia-Pacific Region, online (2021). (学術論文 [2]に付随した発表)

- [3] Y. Futamura, T. Sakurai, Parallel Contour Integral-Based Eigenvalue Computation using a Block Krylov Linear Solver with Shift-Invert Preconditioning, SIAM CSE21, online (2021).
- [4] T. Sakurai, Y. Futamura, A. Bogdanova, X. Ye, A. Imakura, Collaborative Data Analysis Method based on Dimensionality Reduction, SIAM CSE21, online (2021).

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	○	240000	
※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。			