

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。

今年度の主要な研究成果として、第一原理分子動力学シミュレーションにおいて各原子の近傍原子との関係性を記述した原子フィンガープリント記述子を用い、次元削減やクラスタ分析によって分子内の局所的な構造を捉える手法の開発が挙げられる。記述子の高次元空間上の局所的な関係性を捉えるため、新たな次元削減手法を導入し、同法が主成分分析や t 分布型確率的近傍埋め込みといった他の次元削減手法と比較して高い性能を発揮することを示した。提案法によって得られた低次元空間への射影を用い、新たな原子が与えられた際に低次元空間上で振る舞いを効果的に可視化できることを示した。本研究成果の論文は **Physical Review B** に採録された。

また、グラフ上の測地線距離に基づく高速な部分空間生成法を用いたグラフ分割アルゴリズムを新たに提案した。提案法を C++ 言語および OpenMP を用いてマルチスレッド並列実装し、実応用のグラフに対して性能評価を行い、Metis やその並列化版である mt-Metis と同等の性能が得られることを示した。さらに従来法に対する優位性とし

て、繰り返しの実行に対し分割結果が再現可能な並列化が可能であることを示した。本研究成果の論文は IEEE High Performance Extreme Computing Conference 2021 に採択された。

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 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事が必要であり、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、HPC 分野の国際会議への採択等の成果が出ている。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 Wisteria-O 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, R. Wakaki, T. Sakurai, Spectral Graph Partitioning Using Geodesic Distance-based Projection, IEEE High Performance Extreme Computing Conference (HPEC), 7 pages, online, Sep.20-24 2021.
- [2] R. Tamura, M. Matsuda, J. Lin, Y. Futamura, T. Sakurai, T. Miyazaki, Structural analysis based on unsupervised learning: Search for a characteristic low-dimensional space by local structures in atomistic simulations, Physical Review B Vol. 105 (7), 075107, 18 pages, Feb. 2022.

(2) 学会発表

- [1] Y. Futamura, R. Wakaki, T. Sakurai, Spectral Graph Partitioning Using Geodesic Distance-based Projection, IEEE High Performance Extreme Computing Conference (HPEC), online, Sep.20-24 2021. (学術論文[1]に付随した発表)

(3) その他

- [1] Outstanding Paper Award, Y. Futamura, R. Wakaki, T. Sakurai, Spectral Graph Partitioning Using Geodesic Distance-based Projection, IEEE High Performance Extreme Computing Conference (HPEC), online, Sep.20-24 2021. (学術論文[1]に対する賞)

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。			