

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、コードの高性能化を進めた。我々の技術の生命科学系分野への応用として、遺伝子発現解析における深層学習技術を用いた RNA 分類手法の高度化の検討および、創薬への応用が期待される薬剤・標的タンパク質間相互作用予測の高精度化の研究を進めた。これらの高度化展開には GPU をはじめとした HPC 利活用技術が重要となっている。生命科学や医科学の応用分野の研究者らと連携し、実应用到したアルゴリズム・機械学習手法の応用展開を進めた。さらに、プライバシーを保護した分散協調機械学習技術について HPC 技術を生かした高度化の検討も行った。

3. 学際共同利用プログラム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、またメニーコア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** への採択や **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**, **Pegasus** 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

該当なし

(2) 学会発表

- ① T. Sakurai, A. Imakura, X. Ye, A. Bogdanova, Y. Futamura, Y. Okada, Cost-Efficient Integrated Analysis of Distributed Data in Secure Environments, SIAM Conference on Computational Science and Engineering (CSE23), RAI Congress Centre, The Netherlands, February 26 - March 3, 2023.
- ② X. Ye, A. Imakura, T. Sakurai, Collaborative Future Selection for Distributed Data, SIAM Conference on Computational Science and Engineering (CSE23), RAI Congress Centre, The Netherlands, February 26 - March 3, 2023.
- ③ A. Imakura, T. Sakurai, Complex moment-based method with nonlinear transformation for computing partial singular triplets, Numerical Methods for Large Scale Problems, Belgrade and Online, June 6-10, 2022.

(3) その他

該当なし

筑波大学計算科学研究センター 2022年度学際共同プログラム利用報告書

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	○	3150	
Wisteria/BDEC-01	○	212500	
※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。			