

## スペクトラルフレームワークによる大規模並列線形計算と機械学習計算の高度化

### Development of large-scale parallel numerical linear algebra algorithms and machine learning methods based on spectral framework

代表者氏名 櫻井 鉄也

所属 筑波大学

#### 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、実応用に即したアルゴリズム・機械学習手法の応用展開を進めた。さらに、材料分野での分子シミュレーションにおいて、機械学習による高速な原子間力予測の高精度化を行なった。

#### 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生命・医科学分野の研究者ら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 Pegasus, 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 J. Lin, R. Tamura, Y. Futamura, T. Sakurai, T. Miyazaki, Determination of hyper-parameters in the atomic descriptors for efficient and robust molecular dynamics simulations with machine learning forces , Physical Chemistry Chemical Physics 25 (27), pp.17978-17986.

##### (2) 学会発表

- ① A. Imakura, R. Tsunoda, R. Kagawa, K. Yamagata, T. Sakurai, Data Collaboration Cox Proportional Hazards Model for Privacy-preserving Survival Analysis, 10th International Congress on Industrial and Applied Mathematics (ICIAM2023). Waseda University, Tokyo, Japan, August 20-25, 2023.
- ② K. Morikuni, A. Imakura, A projection method for singular eigenvalue problems of linear matrix pencils, 10th International Congress on Industrial and Applied Mathematics (ICIAM2023). Waseda University, Tokyo, Japan, August 20-25, 2023.
- ③ K. Aihara, A. Imakura, K. Morikuni, Cross-interactive residual smoothing for block Lanczos-type methods for solving linear systems with multiple right-hand sides, 10th International Congress on Industrial and Applied Mathematics (ICIAM2023). Waseda University, Tokyo, Japan, August 20-25, 2023.
- ④ A. Imakura, T. Sakurai, Y. Futamura, Recent progress in complex moment-based eigenvalue solvers , SIAM Conference on Parallel

Processing for Scientific Computing (PP24), Lord Baltimore Hotel, USA,  
March 5-8, 2024.

- ⑤ T. Sakurai, A. Imakura, Y. Futamura, Distributed data analysis through data collaboration technique, SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing (PP24), Lord Baltimore Hotel, USA, March 5-8, 2024.

- (3) その他  
該当なし

使用計算機	使用計算機に ○	配分リソース※		
		当初配分	移行*	追加配分
Cygnus	○	5000		
Pegasus	○	5000		
Wisteria/BDEC-01	○	175000		
※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。 *バジェット移行を行った場合、「+2000」「-1000」のように記入				