

受付 ID	16a14
分野	数値解析

## 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、各種の実アプリケーションで現れる大規模な固有値問題を対象として、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。また新たにスペクトラルクラスタリングなどの固有値解法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アルゴリズムと実装技術の開発を進め、HA-PACS および COMA を利用して、メニーコア向けコードの高性能化を進めた。具体的には、(1)階層的な並列構造をもつ密/疎型の固有値計算アルゴリズムおよび GPU 向けソフトウェアの開発、(2)実アプリケーションによる高性能利用技術の開発、(3)固有値解法に基づく機械学習アルゴリズムの開発を中心に行った。

主な成果として、自動車のオートマチックトランスミッションを開発するアイシン・エイ・ダブリュ（株）との共同研究で、振動解析で現れる固有値解法の高高速化のため COMA において実装や性能評価を行い、共同研究成果をまとめた論文が採択された[学術論文 3]。また、スペクトルクラスタリングやディープニューラルネットワーク計算においても固有値解法に基づくアルゴリズムの開発を進めており、学術論文として採択された[学術論文 4,5]。

#### 3. 学際共同利用として実施した意義

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小規模計算から、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 GPU や Xeon Phi 向けのソフトウェア開発も行っている。このように、本研究プロジェクトでは幅広い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と共同研究が始まった。

#### 4. 今後の展望

近年人工知能・機械学習技術が注目されているが、我々はスペクトラルクラスタリングなどの固有値計算に基づく機械学習アルゴリズムの開発を進めており、成果が出始めている。COMA や OFP を活用し、これらアルゴリズムの開発・高性能化を押し進め、ディープニューラルネットワークなどの既存の機械学習手法と学習性能だけでなく計算時間の観点で比較することを検討している。

#### 5. 成果発表

##### (1) 学術論文

- [1] Akira Imakura, Lei Du, Tetsuya Sakurai, Relationships among contour integral-based methods for solving generalized eigenvalue problems, *Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics*, Vol.33, Issue 3, 2016, pp.721-750.
- [2] Akira Imakura, Tetsuya Sakurai, Block Krylov-type complex moment-based eigensolvers for solving generalized eigenvalue problems, *Numerical Algorithms* (accepted)
- [3] Takaniri Ide, Yuto Inoue, Yasunori Futamura, and Tetsuya Sakurai, Highly Parallel Computation of Generalized Eigenvalue Problem in Vibration for Automatic Transmission of Vehicles Using the Sakurai–Sugiura Method and Supercomputers, *Mathematical Analysis of Continuum Mechanics and Industrial Applications*, pp.207-218, 2016
- [4] Tetsuya, Sakurai, Akira Imakura, Yuto Inoue, Yasunori Futamura, Alternating optimization method based on nonnegative matrix factorizations for deep neural networks, In: A. Hirose, S. Ozawa, K. Doya, K. Ikeda, M. Lee, D. Liu. eds, *Neural Information Processing, ICONIP 2016, Lecture Notes in Computer Science*, Vol 9950, 2016, pp.354-362.
- [5] Xiucui Ye, Kaiyang Ji and Tetsuya Sakurai, “Spectral clustering and discriminant analysis for unsupervised feature selection”, *Proceeding of the European Symposium on Artificial Neural Networks, Computational Intelligence and Machine Learning (ESANN 2016)*, pp.563-668, 2016.

##### (2) 学会発表

- [1] Yasunori Futamura, Akira Imakura, Tetsuya Sakurai, Applications of the

Parallel Complex Moment-Based Eigensolver Package z-Pares to Large-Scale Scientific Computations, SIAM Conference on Computational Science and Engineering (CSE17), Hilton Atlanta, Atlanta, Georgia, USA, February 27-March 3, 2017.

- [2] Tetsuya Sakurai, A deep neural network algorithm using nonnegative matrix factorizations, International Conference on Machine Learning and Computing (ICMLC 2017) Nanyang Executive Centre, Singapore, 2017/2/25
- [3] Tetsuya Sakurai, Yasunori Futamura, Akira Imakura, A quadrature-based parallel eigensolver for large-scale simulations, The 9th International Workshop on Parallel Matrix Algorithms and Applications (PMAA16), Place de la Victoire, Bordeaux, France, July 6-8, 2016.

(3) その他

使用計算機	使用計算機に○	配分リソース*
HA-PACS	○	484
HA-PACS/TCA	○	88
COMA	○	240

※配分リソースについては 32node 換算時間をご記入ください。