

受付 ID	17a24
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アルゴリズムと実装技術の開発を進め、Oakforest-PACS (以下 OFP) 及び 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。特に並列性の高い周回積分型固有値解法とそれら $O(N)$ 型密度汎関数法や複素バンド構造計算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。さらにディープニューラルネットワークにおいて、従来のバックプロパゲーション型と異なる非線形非負行列分解を用いた学習計算手法の並列化の研究を進めた。当手法はミニバッチサイズを大きくとれることからメニーコア等の計算環境に適している。

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きた。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進んでいる。

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や新しいディープニューラルネットワーク学習計算手法の開発を進めており、成果が出始めている。今後も 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、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] A. Imakura, Y. Inoue, Y. Futamura, T. Sakurai, Parallel implementation of the nonlinear semi-NMF based alternating optimization method for deep neural networks, *Neural Processing Letters*, 13 pages (2017).
- [2] Y. Futamura, T. Yano, A. Imakura, T. Sakurai, A real-valued block conjugate gradient type method for solving complex symmetric linear systems with multiple right-hand sides, *Applications of Mathematics*, 62 (4), 333-355 (2017).
- [3] A. Imakura and T. Sakurai, Block Krylov-type complex moment-based eigensolvers for solving generalized eigenvalue problems, *Numer. Alg.*, 75(2), 413-433 (2017).
- [4] S. Iwase, Y. Futamura, A. Imakura, T. Sakurai, and T. Ono., Efficient and scalable calculation of complex band structure using Sakurai-Sugiura method, In *Proceedings of the International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (SC '17)*. ACM, New York, NY, USA, Article 40, 12 pages (2017).
- [5] A. Nakata, Y. Futamura, T. Sakurai, D. R. Bowler, and T. Miyazaki, Efficient calculation of electronic structure using $O(N)$ density functional theory, *Journal of Chemical Theory and Computation*, 13 (9), 4146-4153 (2017).

(2) 学会発表

- [1] A. Imakura, R. Arai, T. Sakurai, A Nonlinear Semi-Nmf Based Method and Its Parallel Implementation for Deep Neural Networks, *SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing (SIAM PP18)*, 2018.
- [2] Y. Futamura, A. Imakura, T. Sakurai, Recent Advances on the Algorithm-

based Fault Tolerance of the Sakurai-Sugiura Eigensolver, SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing (SIAM PP18), 2018.

- [3] S. Iwase, Y. Futamura, A. Imakura, T. Sakurai, S. Tsukamoto, F. Julich, T. Ono, Contour Integral Method to Evaluate Self-Energy Matrices for Large-Scale Electron Transport Calculations, SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing (SIAM PP18), 2018.
- [4] T. Sakurai, Y. Futamura, A. Imakura, S. Iwase, T. Ono, Nonlinear Sakurai-Sugiura method for electronic transport calculation, 2017 Meeting of the International Linear Algebra Society, 2017.
- [5] T. Sakurai, Y. Futamura, A. Imakura, Nonlinear Sakurai-Sugiura method for electronic transport calculation on KNL cluster, The Platform for Advanced Scientific Computing (PASC) Conference 2017, 2017.

(3)

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
HA-PACS/TCA			
COMA	○	11000	
Oakforest-PACS	○	192000	
※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。			