

戦略的創造研究推進事業 SPPEXA(CREST)
研究領域「ポストペタスケール高性能計算に
資するシステムソフトウェア技術の創出」
研究課題「ポストペタスケールに対応した階層
モデルによる超並列固有値解析エンジンの開発」

研究終了報告書

研究期間 平成28年4月～平成30年3月

研究代表者：櫻井 鉄也
(筑波大学大学院システム情報工学研
究科、教授)

§ 1 研究実施の概要

(1) 実施概要

本プロジェクトでは、次世代スパコンに向けた固有値計算ソフトウェアの高性能化のために日独の協力の下、非線形固有値問題への拡張、耐故障技術の開発、ブロックやシフトなどの性質を利用した疎行列線形ソルバの開発、統計的手法を利用した効率的なパラメータ推定法の開発および実アプリケーションに対する高性能実装技術の開発を行った。さらに開発ソフトウェアの産業分野での応用を目指し、構造解析分野で広く用いられている統合ソフトウェアへの組み込みを進めた。

本プロジェクトにおいて、これまで大規模疎行列を対象として超並列固有値解析エンジンの開発を進めてきた。次世代のスパコンを想定したより大並列な環境においては、耐故障技術、より性能の高い疎行列線形ソルバ、効率的なパラメータ推定法が課題となっている。一方、ドイツの ESSEX チームは SPPEXA 領域において、エクサスケールを対象とした疎行列向けのソフトウェアを開発している。ESSEX においても、先に挙げた課題に取り組んでおり、エクサスケールに向けて取り組むべき課題には共通性が高い。

これらの課題は、これまで日本とドイツで独立に開発を進めてきたが、本プロジェクトを通して互いに協力して開発にあたることで双方のソフトウェアの開発が大きく加速された。

本研究プロジェクトを通じて達成された成果として、以下が挙げられる。

1. 疎行列向け階層型固有値解析エンジン z-Pares の高性能化
2. 実アプリケーションに対する高性能実用化技術
3. 開発技術のデータ解析や AI 技術への展開

疎行列向け階層型固有値解析エンジン z-Pares の高性能化に関しては、ドイツグループの開発するエクサスケール環境ライブラリとの融合に関して研究を進めた。また、非線形固有値問題に対する高速・高精度な Sakurai-Sugiura 法を新規提案した。実アプリケーションに対する高性能実用化技術に対しては、企業の研究者と協力し、自動車部品の振動解析で現れる固有値問題求解の高速化に取り組み、企業で用いられているソフトウェアに対して z-Pares の優位性を示した。また、本プロジェクトで開発を進めてきた固有値解析エンジンの基盤技術である並行列計算法の技術をデータ解析や AI 技術へ展開し、部分特異値計算、非線形 NMF 型ディープラーニング計算、テンソルネットワーク計算などの高速化手法の開発を進めた。

ポストペタスケール規模のシミュレーションは、高性能なハードウェア開発は言うまでもなく、その性能を十分に引き出すためのコンパイラやミドルウェア、通信制御、計算アルゴリズム、現象モデリングなどの技術を結集して初めて到達できる。本プロジェクトの成果はその一翼を担うものである。

本課題が遂行されたことによって、ポストペタスケールに資するシステム技術の主要な階層の一つとして、固有値計算を中心とする数理アルゴリズム・ソフトウェア・ライブラリが開発が達成され、固有値計算がボトルネックとなっている実アプリケーションの今後のポストペタスケールへの飛躍に大きく貢献したと考える。また、現状のアプリケーションの高速化にとどまらず、現状では固有値計算を利用していないアプリケーション分野に対しても、高速固有値計算を基盤とした新しい解析手法の確立も期待される。

(2) 顕著な成果

< 優れた基礎研究としての成果 >

1.

概要:

超並列固有値解法である Sakurai-Sugiura 法について特に非線形固有値問題に対して理論整備を行い、またそれに基づき高速・高安定な新規解法として Communication-Avoiding Arnoldi 法を利用した新しい Sakurai-Sugiura 法を開発した。さらに非線形固有値問題向けに開発ソフトウェア z-Pares の拡張を行い、非線形固有値問題への展開を進めた。

2.

概要:

物理分野の研究者と協力して、非線形固有値問題を基盤とした物理量計算法の開発を進めた。また、問題の特性に合わせた高性能実装技術を開発し、筑波大学と東京大学が共同運用する Oakforest-PACS の 2048 ノードを利用して 1 万原子 BN-CNT の計算を行った。本研究成果はスーパーコンピューティングのトップカンファレンスである SC17 のテクニカルペーパーに採択された。

< 科学技術イノベーションに大きく寄与する成果 >

1.

概要:

ドイツで開発しているハイブリッド並列向け反復解法ツールキットである PHIST を z-Pares のカーネルとして利用した実装を行い、MPI 並列化で高いスケーラビリティが得られることを確認した。これにより z-Pares がハイブリッドな並列環境においても高性能実行可能となり、様々なアーキテクチャに対応できる。

2.

概要:

本研究プロジェクトで開発を進める z-Pares の産業応用の展開として、自動車・船舶・航空機などの開発に用いる構造解析のデファクト・スタンダードの統合ソフトウェアから利用できるように連携機能の実装を行った。また、実際の大規模モデルにおいて従来手法と比較して高い性能を達成することが出来た。

§ 2 研究実施体制

(1) 研究チームの体制について

研究参加者

氏名	所属	役職	参加時期
櫻井 鉄也	筑波大学大学院 システム情報系	教授	H28.4～
多田野 寛人	筑波大学大学院 システム情報系	助教	H28.4～
今倉 暁	筑波大学大学院 システム情報系	助教	H28.4～
二村 保徳	筑波大学大学院 システム情報系	助教	H28.4～
叶 秀彩	筑波大学大学院 システム情報系	研究員	H28.4～
矢野 貴大	筑波大学大学院 システム情報工学研究科	D3	H28.4～
謹 鴻佳	筑波大学大学院 システム情報工学研究科	D3	H28.4～
荒井 亮祐	筑波大学大学院 システム情報工学研究科	M2	H28.4～

木村 宇任	筑波大学大学院 システム情報工学研究科	M2	H28.4～
関川 悠太	筑波大学大学院 システム情報工学研究科	M2	H28.4～
王家潤	筑波大学大学院 システム情報工学研究科	M2	H28.4～
池上 努	産業技術総合研究所 情報技術研究部門	研究員	H28.4～
中務 佑治	東京大学大学院 情報理工学系研究科	助教	H28.4～
今村 俊幸	理化学研究所	チームリーダー	H28.4～
深谷 猛	理化学研究所・北海道大学	客員研究員・助教	H28.4～
稲川 裕太	筑波大学大学院 システム情報工学研究科	M1	H28.8～
廣田 悠輔	理化学研究所	特別研究員	H28.9～
山田 悠加	筑波大学大学院 システム情報工学研究科	M1	H29.4～
松田 萌望	筑波大学大学院 システム情報工学研究科	M2	H29.5～
松下 達也	筑波大学大学院 システム情報工学研究科	M2	H28.4～H29.3
上田 俊也	筑波大学大学院 システム情報工学研究科	M2	H28.4～H29.3
井上 雄登	筑波大学大学院 システム情報工学研究科	M2	H28.4～H29.3

研究項目

- 疎行列向け階層型固有値解析エンジン z-Pares の高性能化
- 実アプリケーションに対する高性能実用化技術
- 開発技術のデータ解析や AI 技術への展開

(2)国内外の研究者や産業界等との連携によるネットワーク形成の状況について

開発したソフトウェアの応用に関して以下の研究機関との連携を行った。

- 材料分野：NIMS、ロンドン大学、日本原子力研究開発機構
- 振動・構造解析分野：アイシンAW、鹿島建設、東京大学地震研究所

また、基礎理論整備および実装技術に関しては以下の研究機関との連携を行った。

- 大連理工大学、オックスフォード大学、バレンシア工科大学、米サンディヤ国立研究所、テネシー大学

§ 3 研究実施内容及び成果

本プロジェクトでは、次世代スパコンに向けた固有値計算ソフトウェアの高性能化のために日独の協力の下、非線形固有値問題への拡張、耐故障技術の開発、ブロックやシフトなどの性質を利用した疎行列線形ソルバの開発、統計的手法を利用した効率的なパラメータ推定法の開発および実アプリケーションに対する高性能実装技術の開発を行った。さらに開発ソフトウェアの産業分野での応用を目指し、構造解析分野で広く用いられている統合ソフトウェアへの組み込みを進めた。

具体的には、日独連携のもとで、以下の項目に対して取り組んだ。

1. 疎行列向け階層型固有値解析エンジン z-Pares の高性能化
2. 実アプリケーションに対する高性能実用化技術
3. 開発技術のデータ解析や AI 技術への展開

各項目に対する主な実施内容は以下の通りである。

1. 疎行列向け階層型固有値解析エンジン z-Pares の高性能化

1-a) ドイツグループの開発するエクサスケール環境ライブラリとの融合

Sakurai-Sugiura 法の計算主要部である線形方程式のソルバとして Block BiCGSTAB 法をドイツグループが開発する PHIST を用いて実装し性能評価を行った。PHIST が提供する疎行列-密行列積やブロック型 AXPY、ブロック型内積のルーチンを用いることで Block BiCGSTAB を実装し、中規模とテスト行列に対し、MPI 並列化で高いスケーラビリティが得られることを確認した(図 1-a-1)。さらに、実装した Block BiCGSTAB を z-Pares から呼び出すことで、固有値計算全体を PHIST を通じて実行できるようにし、テスト問題で性能評価を行った(図 1-a-2)。

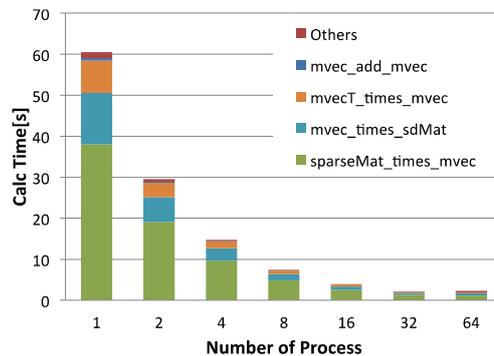


図 1-a-1 : 中規模問題での PHIST を用いた BiCGSTAB 法の並列性能
(Friedrich-Alexander Universität Erlangen-Nürnberg の Emmy Cluster 上での実験)

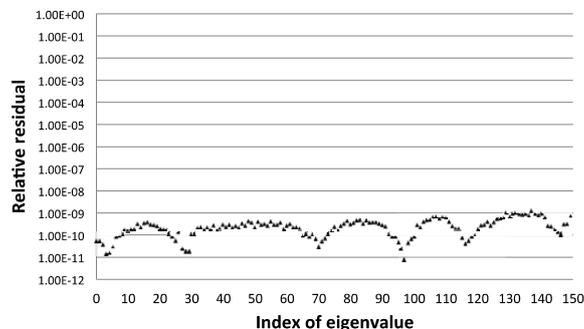


図 1-a-2 : z-Pares と PHIST を組み合わせたテスト問題での固有対の残差

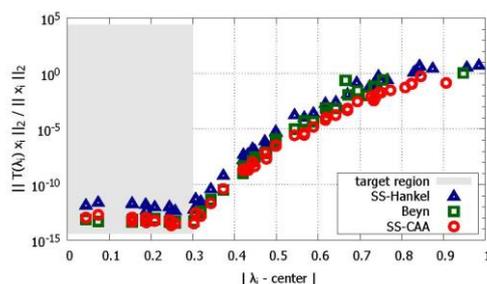
これらの性能評価を基に、日独で協力してソフトウェアの実装を進めた。実装にあたっては、ドイツから 2 名の研究員を 3 週間受け入れ共同で進めた。また、日本から実装担当

者をドイツへ派遣する予定である。これらの連携によって、エクサスケールに向けた高性能ソフトウェアの開発を進め、グランドチャレンジ規模の大規模問題への適用を行う。

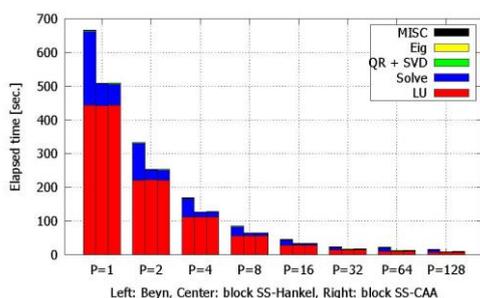
1-b) 固有値解析エンジンの非線形固有値問題への展開

超並列固有値解析エンジン z-Pares の非線形固有値問題への展開として、基盤解法である Sakurai-Sugiura 法をベースとして非線形固有値解法の開発・高性能化を進めた。周回積分を利用した高並列な非線形固有値解法として、SS-H法およびBeyn法が知られているが、SS-H法は精度面で、Beyn法は計算コストの面でそれぞれ問題がある。これに対して本研究プロジェクトでは、両解法の理論的關係性の解析に基づき、communication-avoiding Arnoldi法を利用した新しい Sakurai-Sugiura法 (SS-CAA法)を開発した。

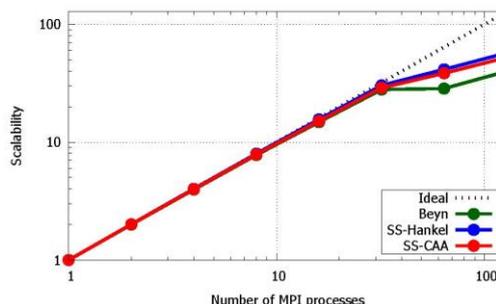
開発した、SS-CAA法はSS-H法と同程度の計算コストかつBeyn法と同程度の計算精度を持ち高い並列性を発揮する結果が得られている(図 1-b-1)。本成果は国際会議で発表し、現在論文投稿中である。



(a) 近似固有対の精度



(b) 計算時間



(c) スケーラビリティ

図 1-b-1: SS-CAA 法の計算精度と計算時間、スケーラビリティ

1-c) 耐障害技術の開発

米サンディア国立研究所およびテネシー大学と連携して、Sakurai-Sugiura法の耐障害技術の開発を進めた。Sakurai-Sugiura法は、1:積分点毎の大規模連立一次方程式の求解、2:周回積分による複素モーメント計算、3:小規模固有値問題の求解、の3つのステップからなり、ステップ1が計算コストの主要部であり、使用メモリも最も大きい。このため、ステップ1で障害が発生する確率が高い。

ある積分点での計算の際にソフトウェアが発生した場合、その連立一次方程式の解には誤差が生じる。その誤差は周回積分により伝搬するため、全ての固有対は誤差を含み正しい結果を得ることができないことが予想される。これに対して、本プロジェクトでは、連立一次方程式の解に含まれる誤差の周回積分による伝搬を部分空間の性質に着目して解析を行った。その結果として、生成される部分空間はソフトウェアに依存する誤差を含むものの、高次の複素モーメントを利用することで生成される部分空間が情報の冗長性を持ち、

誤差の持つ次元は部分空間の次元に対して小さく抑えられることを示した。この誤差解析結果は、ソフトウェアにより発生した連立一次方程式の解の誤差の大きさによらず、単に部分空間サイズを少し大きく取ることによって正しい固有対を計算できることを意味する。

この誤差解析に基づき、Sakurai-Sugiura 法の耐障害戦略を提案した。具体的には、アルゴリズムの各ステップで異なる耐障害戦略を適用する。計算コストが大きく並列性の高いステップ 1 に対しては、誤差解析に基づき、予め部分空間サイズを大きくすることで耐障害性を実現する。ステップ 2 は計算コストが極めて小さいため、チェックポイント・リスタートを利用する。また、ステップ 3 は計算コストが比較的小さく並列性が必ずしも高くないため、冗長計算により耐障害性を実現する。

ある積分点の連立一次方程式の解に直接誤差を混入する単純な障害モデルを用い、提案した耐障害戦略の有効性について検証を行った。その結果として、障害発生時においても同程度の精度で固有対を計算できることが示された (図 1-c-1)。

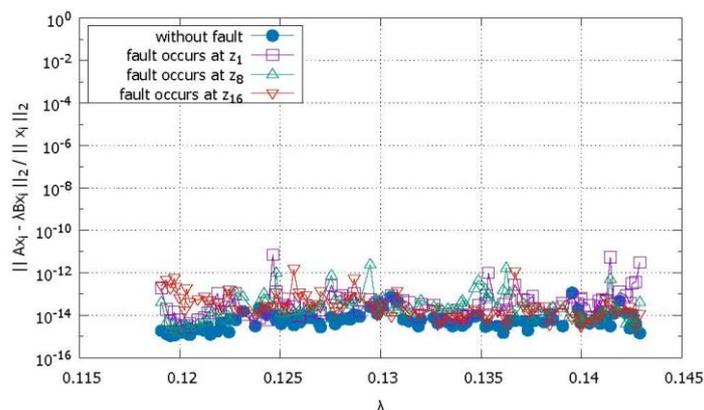


図 1-c-1 : 障害の有無による固有対の精度変化

また、代表的なソフトウェアエラーであるビットフリップを実際の計算中に人工的に発生させる現実的な故障モデルを開発し、Sakurai-Sugiura法の障害発生時の性能を評価した。この結果として、連立一次方程式の解に直接誤差を混入する単純な障害モデルの場合と比較して、解法がよりロバストであり、複数の連立一次方程式に大きく誤差が混入した場合に対してもよい精度の固有対が得られる結果が示された (図1-c-2)。

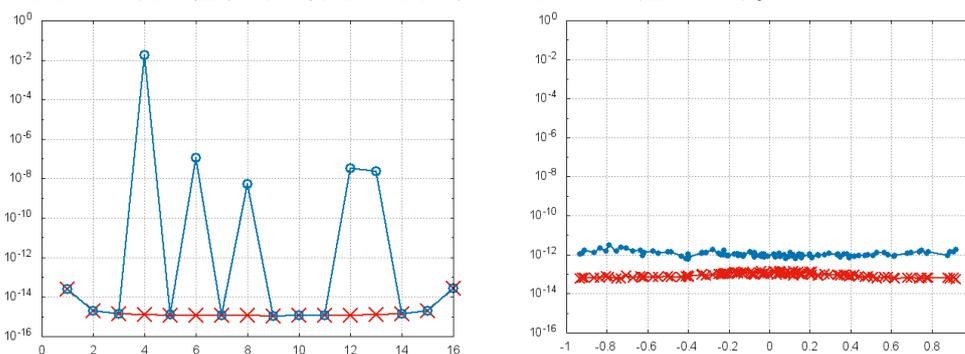


図 1-c-2 左 : 各連立一次方程式の残差、右 : 得られた固有対の残差

2. 実アプリケーションに対する高性能実用化技術

2-a) 自動車部品の振動解析に対する実用化技術の開発

密度汎関数法を用いたナノシミュレーションにおいて固有値解析が現れる。CREST 課題において、物質材料研究機構とロンドン大学が開発した密度汎関数法コード CONQUEST における固有値問題に求解の高速化に取り組んだ。図 2-a-1 に示すように、大規模系の実験に対して筑波大学の並列クラスター COMA において、4 ノードから 256 ノードで 2,245 秒から 90 秒

と、約 25 倍の高速化を果たした。この成果が発展した結果、これまでに例のない 20 万原子規模の系の固有値計算を達成した。このように z-Pares の要素技術は構造解析以外の分野でも高い性能を発揮し、本課題が達成されれば幅広い波及効果が期待される。

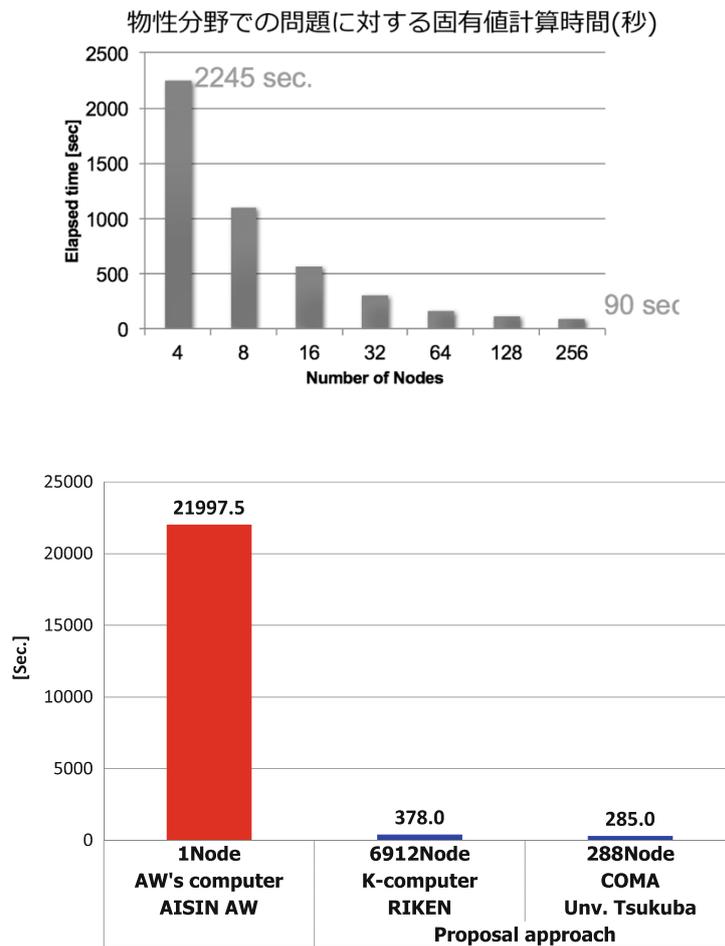


図 2-a-2 : 自動車部品の振動解析で現れる固有値問題に対する z-Pares と従来ソフトウェアとの比較 (Proposal approach が z-Pares)

図 2-a-1 物性物理分野の問題に対する適用事例

オートマチックトランスミッション (AT) の開発製造における世界シェアトップのアイシン AW 社との共同研究では、京コンピュータを用いた実験において、96 ノードから 6912 ノードで 11,617 秒から 378 秒と、約 30 倍の高速化を確認した。対象としたモデルは実際の製品となっている AT の音響解析における約 1700 万自由度のモデルである。また本研究では京コンピュータだけでなく、全 393 ノードのクラスタである筑波大学の COMA を用いて性能評価も行った。最終的に京コンピュータ 6912 ノードを用いてアイシン AW 社の単体サーバーにおける既存ソフトウェアの 58 倍、COMA を用いて 77 倍の速度向上が得られた (図 2-a-2)。本成果は国際会議査読付き Proceedings に採録され学術的な成果ともなった。

2-b) 複素バンド構造計算に対する実用化技術の開発

複素バンド構造計算から現れる大規模非線形固有値問題に対し、Sakurai-Sugiura 法の実用化技術開発と性能評価を行なった。本非線形固有値問題では、円環領域内の固有値が必

要であるが、Sakurai-Sugiura 法が周回積分型の解法であることを利用し、多重連結領域の積分として、計算の効率化を計った。また、この非線形固有値問題の特殊な対称性を考慮した上で、線形方程式求解に双共役勾配法を用い、円環の外周部分の方程式求解過程の副産物として、内周部分の方程式の解を与えることで、計算量を削減する方法を提案した。さらに、問題の特性に合わせた Sakurai-Sugiura 法の新たな3階層 (Top layer, Middle layer, Bottom layer) の並列構造を定義し、それぞれの階層におけるスケラビリティを確認した。実験では最大で Oakforest-PACS 2048 ノードを用い、提案手法が大規模並列計算環境で高い性能を発揮することを確認した (図 2-a-2)。

本研究成果をまとめた論文が、スーパーコンピューティングのトップカンファレンスである SC17 の Technical Paper として採択された。

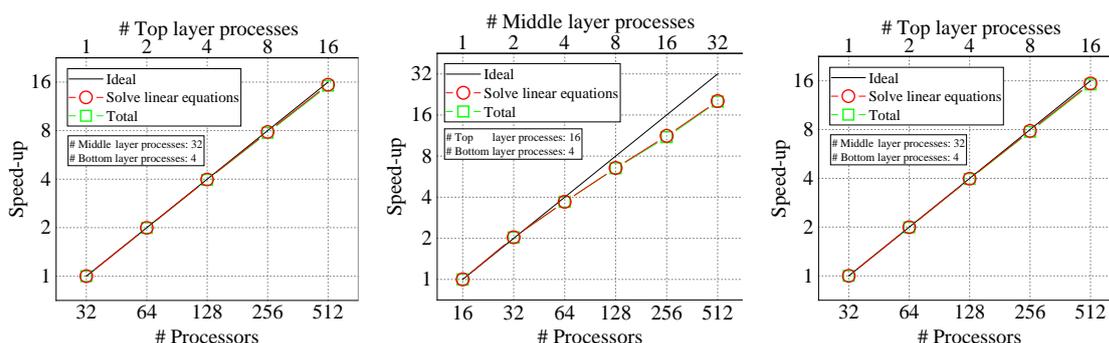


図 2-a-2: 複素バンド構造計算で現れる非線形固有値問題に対する Sakurai-Sugiura 法のスケラビリティ

3. 開発技術のデータ解析や AI 技術への展開

超並列固有値解析エンジンおよびその基盤技術として本プロジェクトで開発を行ってきた各種の並列行列計算手法を発展させ、新しい分野の計算の高速・高並列化を進めた。

・部分特異値分解

固有値解析と同様に幅広い応用を持つ行列計算に特異値分解がある。本プロジェクトで開発している超並列固有値解析エンジンを直接利用した超並列な部分特異対計算法の開発を進めた。

・非線形 NMF 型 DNN 計算法

近年、画像認識等で注目される深層ニューラルネットワーク (DNN) 計算では、確率的勾配降下法に基づく誤差逆伝搬法が広く用いられる。これに対して、本プロジェクトで開発している各種並列行列計算手法を流用し、非線形非負値行列因子分解 (非線形 NMF) に基づく新しい DNN 計算法の開発を進めた。

・テンソルネットワーク計算

近年、素粒子物理学分野において、モンテカルロ法に代わる新たな計算手法としてテンソルネットワーク計算が注目されている。テンソルネットワーク計算の計算コストの主要部は高階テンソルの近似および縮約計算であり、本プロジェクトで開発している各種並列行列計算手法を基盤としてポスト京萌芽課題においてテンソルネットワーク計算の高速化手法の開発を進めた。

§ 4 成果発表等

(1) 原著論文発表 (国内(和文)誌 1 件、国際 (欧文) 誌 25 件)

[1] Akira Imakura, Lei Du, Tetsuya Sakurai, "Error bounds of Rayleigh--Ritz type contour

- integral-based eigensolver for solving generalized eigenvalue problems”, Numerical Algorithms, 71, 1, 103–120, 2016
- [2] Xiucui Ye, Kaiyang Ji and Tetsuya Sakurai, “Unsupervised Feature Selection with Correlation and Individuality Analysis”, International Journal of Machine Learning and Computing (IJMLC), 6, 1, 36–41, 2016
- [3] Xiucui Ye and Tetsuya Sakurai, “Robust Similarity Measure for Spectral Clustering Based on Shared Neighbors”, ETRI Journal, (accepted)
- [4] Tetsuya Hasegawa, Akira Imakura, Tetsuya Sakurai, “Recovering from accuracy deterioration in the contour integral-based eigensolver”, JSIAM Letters, 8, 1–4, 2016
- [5] Akira Imakura, Ren-Cang Li, Shao-Liang Zhang, “Locally Optimal and Heavy Ball GMRES Methods”, Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics, 33, 2, 471–499, 2016
- [6] 齋藤周作, 多田野寛人, 今倉暁, “Shifted Block BiCGSTAB(l) 法の構築とその高精度化”, 日本応用数理学会論文誌, 26, 3, 318–352, 2016
- [7] Akira Imakura, Lei Du, Tetsuya Sakurai, “Relationships among contour integral-based methods for solving generalized eigenvalue problems”, Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics, 33, 3, 721–750, 2016
- [8] Noritaka Shimizu, Yutaka Utsuno, Yasunori Futamura, Tetsuya Sakurai, Takahiro Mizusaki, Takaharu Otsuka, “Stochastic Estimation of Nuclear Level Density in the Nuclear Shell Model: An Application to Parity-Dependent Level Density in 58Ni ”, Physics Letters B, 753, 1–17, 2016
- [9] 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), (accepted)
- [10] Xiucui Ye, Kaiyang Ji and Tetsuya Sakurai, “Global Discriminant Analysis for Unsupervised Feature Selection with Local Structure Preservation”, Proceeding of the Florida Artificial Intelligence Research Society Conference (FLAIRS-29), (accepted)
- [11] 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, 9950, 354–362, 2016
- [12] Xiucui Ye, Kaiyang Ji and Tetsuya Sakurai, “Global Discriminant Analysis for Unsupervised Feature Selection with Local Structure Preservation”, Proceeding of the Florida Artificial Intelligence Research Society Conference (FLAIRS-29), 454–459, 2016
- [13] 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), 563–568, 2016
- [14] Xiucui Ye and Tetsuya Sakurai, “Similarity Measure Based on Adaptive Neighbors for Spectral Clustering”, Proceeding of International Conference on Machine Learning and Computing (ICMLC 2017), 405–409, 2017
- [15] Hongjia Chen, Yasuyuki Maeda, Akira Imakura, Tetsuya Sakurai, Françoise Tisseur, “Improving the numerical stability of the Sakurai-Sugiura method for quadratic eigenvalue problems”, JSIAM Letters, 9, 17–20, 2017
- [16] Takanori Ide, Yuto Inoue, Yasunori Futamura, 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. Mathematics for Industry, 26, 207–218, 2017

- [17] Hiroki Nagakura, Wakana Iwakami, Shun Furusawa, Kohsuke Sumiyoshi, Shoichi Yamada, Hideo Matsufuru, Akira Imakura, "Three-dimensional Boltzmann-Hydro code for core-collapse in massive stars II. The Implementation of moving-mesh for neutron star kicks", *The Astrophysical Journal Supplement*, 229, 2, 2017
- [18] Akira Imakura, Tetsuya Sakurai, "Block Krylov-type complex moment-based eigensolvers for solving generalized eigenvalue problems", *Numerical Algorithms*, 75, 2, 413-433, 2017
- [19] Akira Imakura, Yuto Inoue, Tetsuya Sakurai, Yasunori Futamura, "Parallel implementation of the nonlinear semi-NMF based alternating optimization method for deep neural networks", *Neural Processing Letters*, (accepted)
- [20] Hongjia Chen, Akira Imakura, Tetsuya Sakurai, "Improving backward stability of Sakurai-Sugiura method with balancing technique in polynomial eigenvalue problem", *Applications of Mathematics*, 62, 4, 357-375, 2017
- [21] Yuki Nagai, Yasushi Shinohara, Yasunori Futamura, Tetsuya Sakurai, "Reduced-shifted conjugate-gradient method for a green's function: Efficient numerical approach in a nano-structured superconductor", *J. Phys. Soc. Jpn.* 86, 1, 014708, 2017
- [22] Yasunori Futamura, Takahiro Yano, Akira Imakura, Tetsuya Sakurai, "A real-valued block conjugate gradient type method for solving complex symmetric linear systems with multiple right-hand sides", *Application of Mathematics*, 62, 4, 333-355, 2017
- [23] Ayako Nakata, Yasunori Futamura, Tetsuya Sakurai, David R. Bowler, Tsuyoshi Miyazaki, "Efficient calculation of electronic structure using O(N) density functional theory", *Journal of Chemical Theory and Computation*, (accepted)
- [24] Xiukai Ye and Tetsuya Sakurai, "Spectral Clustering with Adaptive Similarity Measure in Kernel Space", *International Journal of Intelligent Data Analysis*, (accepted)
- [25] Kohsuke Sumiyoshi, Hiroki Nagakura, Wakana Iwakami, Shun Furusawa, Hideo Matsufuru, Akira Imakura, Shoichi Yamada, "Core-Collapse Supernovae Explored by Multi-D Boltzmann Hydrodynamic Simulations", In *Proceedings of the 14th International Symposium on Nuclei in the Cosmos (NIC2016)*, 010606, 2017
- [26] Xiukai Ye and Tetsuya Sakurai, "Unsupervised Feature Learning for Gene Selection in Microarray Data Analysis", *Proceeding of the International Conference on Medical and Health Informatics (ICMHI 2017)*, 101-106, 2017

(2)その他の著作物(総説、書籍など)

(3)国際学会発表及び主要な国内学会発表

① 招待講演 (国内会議 0 件、国際会議 2 件)

- * [1] Akira Imakura, Yasunori Futamura, Tetsuya Sakurai, "Complex moment-based eigensolvers with hierarchical parallelism", *International Workshop on Massively Parallel Programming for Quantum Chemistry and Physics 2017*, RIKEN AICS, Kobe, Japan, January 9-10, 2017
- [2] Tetsuya Sakurai, Yuto Inoue, Akira Imakura, Yasunori Futamura, "A Deep Neural Network Algorithm using Nonnegative Matrix Factorizations", *2017 9th International Conference on Machine Learning and Computing (ICMLC 2017)*, Feb 24, 2017

② 口頭発表 (国内会議 16 件、国際会議 17 件)

- [1] Tetsuya Sakurai, Akira Imakura, Yasunori Futamura, "Algorithm-Based Fault Tolerance of the Sakurai-Sugiura Method", *SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing (SIAM PP16)*, Universite Pierre et Marie Curie, Cordeliers Campus, Paris, France, April 12-15, 2016

- [2] Yasunori Futamura, Tetsuya Sakurai, "Real-Valued Technique for Solving Linear Systems Arising in Contour Integral Eigensolver", 17th SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing (SIAM PP16), Paris, France, April 12-15, 2016
- [3] Xiucan Ye, "Global Discriminant Analysis for Unsupervised Feature Selection with Local Structure Preservation", Florida Artificial Intelligence Research Society Conference (FLAIRS-29), Key Largo, Florida, USA, May 16-18, 2016
- [4] Kohsuke Sumiyoshi, Hiroki Nagakura, Wakana Iwakami Shun Furusawa, Hideo Matsufuru, Akira Imakura, Shoichi Yamada, "Core-collapse supernovae explored by multi-D Boltzmann hydrodynamic simulations", 14th International Symposium on Nuclei in the Cosmos XIV, Toki Messe, Niigata, Japan, June 19-24, 2016
- [5] 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
- [6] Akira Imakura, Tetsuya Sakurai, "Block Krylov-type complex moment-based nonlinear eigensolver with hierarchical parallelism", The 9th International Workshop on Parallel Matrix Algorithms and Applications (PMAA16), Place de la Victoire, Bordeaux, France, July 6-8, 2016
- [7] Yasunori Futamura, Yuto Inoue, Tetsuya Sakurai, "A real-valued method for solving complex symmetric linear systems arising in contour integral eigensolver", The 9th International Workshop on Parallel Matrix Algorithms and Applications (PMAA16), Bordeaux, France, July 6-8, 2016
- [8] 今倉 暁, 山本 有作, "一般内積に対するグラム・シュミット直交化の演算量削減およびその性能評価", 2016 年並列/分散/協調処理に関する『松本』サマー・ワークショップ (SWoPP2016), キッセイ文化ホール, 2016/ 8/ 8-10
- [9] Akira Imakura, Tetsuya Sakurai, "Complex moment-based eigensolver using two Krylov subspaces", Sapporo Summer HPC Seminar 2016, Hokkaido University, Japan, August 22, 2016
- [10] 井上 雄登, 櫻井 鉄也, 今倉 暁, 二村 保徳, "非負値行列分解を用いた多層ニューラルネットワークとその並列化", 日本応用数理解析学会 2016 年度 年会, 北九州国際会議場, 2016/ 9/ 12-14
- [11] 今倉 暁, 二村 保徳, 櫻井 鉄也, "複素モーメント型並列固有値解法の耐障害性とその性能評価", 日本応用数理解析学会 2016 年度 年会, 北九州国際会議場, 2016/ 9/ 12-14
- [12] Tetsuya Sakurai, Akira Imakura, Yuto Inoue, Yasunori Futamura, "Alternating optimization method based on nonnegative matrix factorizations for deep neural networks", The 23rd International Conference on Neural Information Processing (ICONIP 2016), Kyoto, Japan, October 16-21, 2016
- [13] 今倉 暁, 櫻井 鉄也, "2 つの Krylov 部分空間による複素モーメント型固有値解法の改良", RIMS 研究集会: 現象解明に向けた数値解析学の新展開 II, 京都大学数理解析研究所, 2016/ 10/ 19-21
- [14] Xiucan Ye, "Global Discriminant Analysis for Unsupervised Feature Selection with Local Structure Preservation", RIMS 研究集会現象解明に向けた数値解析学の新展開 II, 京都大学数理解析研究所, 2016/ 10/ 19-21
- [15] 荒井 亮祐, 今倉 暁, 櫻井 鉄也, "非負値行列因子分解手法の非線形問題への拡張", 日本応用数理解析学会「行列・固有値問題の解法とその応用」研究部会, 第 22 回研究会, 東京大学, 2016/ 11/ 25
- [16] Xiucan Ye, "Similarity Measure Based on Adaptive Neighbors for Spectral Clustering", International Conference on Machine Learning and Computing (ICMLC 2017), Singapore, Feb 24-26, 2017

- [17] Hiroki Nagakura, Wakana Iwakami, Shun Furusawa, Kohsuke Sumiyoshi, Shoichi Yamada, Hideo Matsufuru, Akira Imakura, Sherwood Richers, Christian Ott, "Multi-Dimensional Boltzmann-Neutrino-Radiation-Hydrodynamic Simulations in Core Collapse Supernovae", SIAM Conference on Computational Science and Engineering (CSE17) Hilton Atlanta, Atlanta, Georgia, USA, February 27-March 3, 2017
- [18] 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
- [19] Yasunori Futamura, Akira Imakura, Tetsuya Sakurai, "Applications of the Parallel Complex Moment-Based Eigensolver Package z-Pares to Large-Scale Scientific Computations", 2017 SIAM Conference on Computational Science and Engineering (CSE17) Atlanta, Georgia, USA, February 27-March 3, 2017
- [20] 松田 萌望, 保國 恵一, 櫻井 鉄也, "スペクトラルクラスタリングにおける特徴量スケーリング", 日本応用数学会 第 13 回 研究部会連合発表会 電気通信大学, 2017 年 3 月 6-7 日
- [21] 山本 有作, 今倉 暁, "一般内積に対する修正グラム・シュミット直交化の効率的実装法の誤差解析", 日本応用数学会 第 13 回研究部会連合発表会, 電気通信大学, 2017/ 3/ 6-7
- [22] 荒井 亮祐, 今倉 暁, 櫻井 鉄也, "正則化項を加えた制約付き非線形半非負値行列因子分解手法", 日本応用数学会 第 13 回研究部会連合発表会, 電気通信大学, 2017/ 3/ 6-7
- [23] 今倉 暁, 井上 雄登, 櫻井 鉄也, 二村 保徳, "非線形非負行列因子分解に基づくディープニューラルネットワーク計算法", 日本応用数学会 第 13 回研究部会連合発表会, 電気通信大学, 2017/ 3/ 6-7
- [24] Xiucui Ye, "Unsupervised Feature Learning for Gene Selection in Microarray Data Analysis", International Conference on Medical and Health Informatics (ICMHI 2017), Taichung, Taiwan, May 20-22, 2017
- [25] Tetsuya Sakurai, Yasunori Futamura, Akira Imakura, "Nonlinear Sakurai-Sugiura method for electronic transport calculation on KNL cluster", The Platform for Advanced Scientific Computing (PASC) Conference 2017 Palazzo dei Congressi, Lugano, Switzerland, June 26-28, 2017
- [26] 荒井亮祐, 今倉 暁, 櫻井 鉄也, "行列分解型ニューラルネットワーク計算法におけるバイアス・正則化項の導入", 第 46 回数値解析シンポジウム(NAS2017), 滋賀県グリーンパーク思い出の森, 2017/ 6/ 28-30
- [27] 山本有作, 今倉 暁, "一般内積における直交化のための MGS-HP 法の誤差解析", 第 46 回数値解析シンポジウム(NAS2017), 滋賀県グリーンパーク思い出の森, 2017/ 6/ 28-30
- [28] 今倉 暁, 保國恵一, 高安亮紀, "実対称行列に対する周回積分を用いた精度保証付き部分固有値計算", 第 46 回数値解析シンポジウム(NAS2017), 滋賀県グリーンパーク思い出の森, 2017/ 6/ 28-30
- [29] 松田萌望, 保國恵一, 櫻井鉄也, "特徴量スケーリングを用いた教師ありスペクトラルクラスタリング", 第 46 回数値解析シンポジウム -NAS2017-, グリーンパーク思い出の森に, 2017 年 6 月 28-30 日
- [30] 今倉暁, 保國恵一, 高安亮紀, "実対称行列に対する周回積分を用いた精度保証付き部分固有値計算", 第 46 回数値解析シンポジウム -NAS2017-, グリーンパーク思い出の森に, 2017 年 6 月 28-30 日
- [31] Yasunori Futamura, Akira Imakura, Tetsuya Sakurai, "A real-valued method for improving efficiency of a contour integral eigenvalue solver", 2017 Meeting of the International Linear Algebra Society, Iowa State University, Iowa, USA, July 24-28, 2017
- [32] Tetsuya Sakurai, Yasunori Futamura, Akira Imakura, Shigeru Iwase, Tomoya Ono, "Nonlinear Sakurai-Sugiura method for electronic transport calculation", 2017 Meeting of the

International Linear Algebra Society, Iowa State University, Iowa, USA, July 24-28, 2017

- [33] 今倉 暁, 荒井亮祐, 櫻井 鉄也, “非負値行列因子分解のための Tall-Skinny 型並列実装法”, 2017 年並列/分散/協調処理に関する『秋田』サマー・ワークショップ (SWoPP2017), 秋田アトリオンビル, 2017/ 7/ 26-28

③ ポスター発表 (国内会議 6 件、国際会議 1 件)

- [1] Yuto Inoue, Tetsuya Sakurai, Akira Imakura, Yasunori Futamura, “Distributed Parallel Implementation of Neural Network for Supercomputers”, “TIA かけはし”ポスター交流会, エポカルつくば, 2016/ 8/ 30.
- [2] Tetsuya Sakurai, Akira Imakura, Yuto Inoue, Yasunori Futamura, “Alternating optimization method based on nonnegative matrix factorizations for deep neural networks”, “TIA かけはし”ポスター交流会, エポカルつくば, 2016/ 8/ 30.
- [3] Akira Imakura, Yasunori Futamura, Tetsuya Sakurai, “Algorithm-based fault tolerance of the complex moment-based parallel eigensolver”, “TIA かけはし”ポスター交流会, エポカルつくば, 2016/ 8/ 30.
- [4] 今倉 暁, 山本 有作, “一般内積に対するグラム・シュミット直交化の効率的実装法の提案およびその性能評価”, 日本応用数理学会 2016 年度 年会, 北九州国際会議場, 2016/ 9/ 12-14.
- [5] Akira Imakura, Tetsuya Sakurai, Yuto Inoue, Yasunori Futamura, “Alternating optimization method based on nonnegative matrix factorizations for deep neural networks”, 情報系 WINTER FESTA Episode2, 一橋講堂, 2016/ 12/ 22-23.
- [6] 山田悠加, 今倉 暁, 櫻井 鉄也, “スパース化によるテンソル繰り込み群計算の高速化”, 第 46 回数値解析シンポジウム(NAS2017), 滋賀県グリーンパーク想い出の森, 2017/ 6/ 28-30
- [7] Akira Imakura, Tetsuya Sakurai, “A complex moment-based nonlinear parallel eigensolver using the block communication-avoiding Arnoldi procedure”, Householder Symposium XX on Numerical Linear Algebra (HHXX), The Inn at Virginia Tech, USA, June 18-23, 2017

(4)知財出願

①国内出願 (0 件)

②海外出願 (0 件)

③その他の知的財産権

(5)受賞・報道等

①受賞

- [1] 今倉暁, 日本応用数理学会 2016 年度年会 最優秀ポスター賞
- [2] 今倉暁, 日本応用数理学会 2017 年研究部会連合発表会 優秀講演賞,
- [3] Xiucui Ye, Best Paper Awards from International Conference on Medical and Health Informatics (ICMHI 2017).
- [4] Xiucui Ye, Excellent Oral Presentation Award from International Conference on Machine Learning and Computing (ICMLC 2017).
- [5] Xiucui Ye, Excellent Oral Presentation Award from International Conference on Machine Learning and Computing (ICMLC 2016).

②マスコミ(新聞・TV等)報道

③その他

(6)成果展開事例

① 実用化に向けての展開

特になし

②社会還元的な展開活動

本研究プロジェクトで開発したソフトウェア z-Pares をインターネット (URL : <http://z pares.cs.tsukuba.ac.jp/>) で公開している。

§ 5 研究期間中の活動

5. 1 主なワークショップ、シンポジウム、アウトリーチ等の活動

年月日	名称	場所	参加人数	概要
2018年3月 5-6日	EPASA2018	つくば国際 会議場	未定	大規模固有値解法の理論と 応用に関する国際会議