

jh130015-NA10

## 内点法アルゴリズムの並列計算による超大規模半正定値計画問題の解決

藤澤克樹(九州大学)

### 概要

半正定値計画問題(SDP)に対しては高速かつ安定した反復解法である内点法アルゴリズムが存在しているが、巨大な線形方程式系の計算(行列要素の計算と行列のCholesky分解)が大きなボトルネックとなっている。今回は SDP 用の最適化ソルバとして、すでに世界最速級であった SDPARA に対して様々な改良を行った。具体的には前者のボトルネックに対しては CPU アフィニティやメモリアンターリーブ技術を駆使し、多数 CPU コア(16, 320 コア)の並列計算によって高いスケーラビリティを得ることに成功した。また後者のボトルネックに対しては Cholesky 分解部分の通信と計算のオーバーラップなどに改善を行った。この結果、東工大 Tsubame 2.5 の 4080 台の GPU により、世界記録更新(233 万制約超)およびペタフロップス超(1.713PFlops)の実行速度を達成することに成功した。

課題番号

### 1. 研究の目的と意義

目的：

半正定値計画問題(SDP)は組合せ最適化、システムと制御、データ科学、金融工学、量子化学など非常に幅広い応用を持ち、現在最適化の研究分野で最も注目されている最適化問題の一つとなっている。また今後のエネルギー供給計画(スマートグリッド等)では非線形の複雑な最適化問題を扱う必要があり、これらの問題に対して強力な緩和値を算出できる SDP の高速計算技術の確立が急務とされている。

SDP に対しては高速かつ安定した反復解法である内点法アルゴリズムが存在しているが、巨大な線形方程式系の計算が大きなボトルネックとなっている。申請代表者のグループでは内点法アルゴリズムを記述した汎用 SDP ソルバ SDPARA の開発・評価・公開を15年以上行っており、疎性の追求、計算量やデータ移動量などによる計算方法の自動選択などの技術を他に先駆けて実現し、大規模な並列計算等によって上記のボトルネックの高速化と世界最大規模の SDP を高速に解くことに成功している。今回の研究申請では量子化学分野(縮約密度行列の直接変分法)や組合せ最適化とビッグデータ解析(ソーシャルネットワークデータに対するクラスタリング)、組合せ最適化問題(二次割当問題)

等の SDP を解くことに挑戦し、行列の大きさが 100 万×100 万以上、制約式の数は 120 万以上となる超巨大 SDP を解いて応用分野への貢献を目指す(当初の目的)。さらに世界記録の更新によって最適化と計算の分野での日本の主導権を確立する。

意義：

本研究によって量子化学や組合せ最適化問題などの多くの未解決問題の解決が期待できる。これまではメモリ使用量や倍精度浮動小数点演算性能の制限からこれらの問題の解決はほぼ不可能であった。さらに今後は SDP を子問題として同時並行的に解いていくことによって非線形関数を持つ多彩な応用問題の解決(スマートグリッド等のエネルギー問題)が期待できる。またこれまでの研究成果によって最大規模の SDP を解くことが可能であるので、国内外の研究者から現時点において解くことが可能な SDP の最大規模を把握したいという意味でも大変注目されている。これらの結果は単に応用分野の様々な問題を解決するという意義に留まらず、今後対象となる分野の選定や問題規模の決定などにも大きな影響を与えることが期待できる。また世界記録を更新、つまり世界最大規模の SDP を高速かつ安定に解くことに成功し

た場合では、この分野の研究で日本が主導権を取ることに繋がることも期待できる。

さらに使用するノードの数の増大と実行結果の解析によって、特に2段階並列化(MPI + OpenMP)の効果などの検証を行う。今後 CPU のコア数はさらに増えていくことが予想されているが、スパコンでの並列実装技術はノード数×コア数の増大には追いついていくことが困難と指摘されている。そのため次世代スパコンに向けてコア数の増大やコアあたりのメモリバンド幅の減少に備えた様々なデータを収集することが可能となる。

学術的背景とその中での本課題の位置付けについて：

最適化問題とは様々な制約条件の下で目的関数を最大化(最小化)する問題の総称である。例えば企業経営では様々な条件(人件費,輸送費,在庫管理費,税金など)を考慮しながら利益を最大化することが求められている。しかし単純な問題は別として一般的な最適化問題すべてを効率良く(つまり高速かつ安く)解く万能的な手法は現在まで発見されていない。最も基礎的で代表的な線形計画問題(LP)は、50年以上に渡って研究されており、経営、工学、理学、医学、商業、農業、公共政策等の幅広い分野で、最適化を達成するための基本的な道具として使われている。最適化問題の中で特に SDP は以下のような理由から 21 世紀の LP として近年大変注目されている。

- 主双対内点法などのアルゴリズムによって多項式時間で最適解を求めることができる(高速で安定したアルゴリズムが存在する)
- SDP は線形計画問題(LP), 凸二次計画問題や二次錐計画問題(SOCP) などを含んだより大きな凸計画問題の枠組である
- 非凸最適化問題に対する強力な緩和値を導き出すことができる。そのため SDP を繰り返して解くことによって非凸最適化問題(例えば双線形行列方程式(BMI) など)を扱える可能性を持っている

- 組合せ最適化問題, 整数計画問題, ノルムなどを用いた配置問題, システムと制御, ロバスト最適化, 量子化学など非常に多くの SDP の応用が存在する(非常に多彩な応用分野を持っている)
- 多くの SDP に対するソフトウェアが開発され, インターネットより公開されている(公開されているソフトウェアで実際に大きな問題を解くことができる)

今日では, 超大規模な SDP を高速かつ安定的に解くことが求められているが, すでに上記の応用分野で必要とされる SDP においては, メモリ使用量や計算時間の観点から1台のサーバや中小規模のクラスタ計算機で扱うことが困難となっており, スーパーコンピュータ上での SDP の高速&安定計算の達成及び実装や計算技術の確立が急務とされている。

当該分野における本課題の特色・独創性について：

本課題のグループでは代表的な数理計画問題である半正定値計画問題(SDP) に対する内点法を記述したソフトウェア(SDPA, SDPARA, SDPA-GMP 等 : <http://sdpa.sourceforge.net/>)の開発・評価・公開を19年以上(1995年~)行っている。

特にソフトウェア SDPA は初期の段階から先進的な機能を備え, SDP に対するソフトウェアの世界をリードしてきた。最適化分野では世界中で広く使用されている国産のソフトウェアは他にはあまり見られない。

- 最適化ソフトウェアに関する世界最大の Web ポータルサイト(Online Solver) 米アルゴン国立研究所の NEOS サーバ (<http://neos.mcs.anl.gov/neos/solvers/index.html>) には 1999 年から SDPA が登録されているが, 現在国産の最適化ソフトウェアで登録されているのは SDPA のみ。
- 公開されているデータでは, NEOS サーバに登録されている全ての SDP ソフトウェアの中でユーザによる SDPA の実行回数が一番多くな

っている (2006 年).

- 我々が 1995 年に提案したデータフォーマット (SDPA Sparse format) が, SDP での世界標準フォーマットになっている (NEOS サーバ参照).

SDPA 以外にも, これまで SDP に対する多くのソフトウェアの開発, 公開を行っているが, 特に4つのソフトウェア (SDPA, SDPARA, SDPARA-C, SDPA-GMP) についてはその先進的な機能と高い性能から国際的にも大変注目され, これまで数百本の学術論文 (英語のみ) から引用が行われている.

今回の課題で用いるソフトウェア SDPARA は以下に述べるように現時点で超大規模 SDP に対応可能な唯一のソフトウェアであり, また後述するようにこれまで世界最大規模の SDP を解くことに成功している. SDPARA の独創的かつ先進的な機能は以下の通りである.

- 線形方程式系に対する Cholesky 分解時の Fill-in 回数を最小化するための ordering (並び替え) を考慮した上で行列を保持するデータ構造を自動決定する (Dense または Sparse)
- 一般的に内点法アルゴリズムでは各反復において探索方向の計算のための線形方程式系の計算がボトルネックになる. SDPARA では多くの入力問題に密行列と疎行列が混在していることに注目して, 入力問題の特性 (問題の大きさや疎性) に対して自動的に最適な計算方法を選択する仕組みを開発した.
- コンピュータの計算能力やメモリバンド幅などに応じて, マルチコア CPU 上で自動的に線形方程式系の行列の並列計算を行っていく (動的負荷分散も含む).

#### 利用課題にて予想される結果とその他の意義:

- 組合せ最適化, 量子化学などの多くの未解決問題の解決と世界記録の更新が期待できる. これまではメモリ使用量や浮動小数点演算性能の制限からこれらの問題の解決はほぼ不可能であった. さらに今後は SDP を子問題として同時並行的に解いていくことによって非線形

関数を持つ多彩な応用問題の解決 (スマートグリッド等のエネルギー問題) が期待できる.

- すでに触れたように, SDPARA は SDP の世界において最大規模の問題を解くことが可能であるので, 国内外の研究者から現時点において解くことが可能な SDP の最大規模を把握したいという意味でも大変注目されている. これらの結果は単に応用分野の様々な問題を解決するという意義に留まらず, 今後対象となる分野の選定や問題規模の決定などにも大きな影響を与えることが期待できる. また世界記録を更新, つまり世界最大規模の SDP を高速かつ安定に解くことに成功した場合は, この分野の研究で日本が主導権を取ることに繋がっていく
- CPU-GPU ハイブリッドスパコン上での大規模実験の結果の解析により, MPI, OpenMP (pthread), CUDA といった異種並列環境利用の効果などの検証を行う. SDPARA は異なる特性を持つ複数カーネルから成り, さらに入力データに対しても用いるカーネルを変えするという特徴を持つが, このようなソフトウェアにおける, 異種並列環境の適切な使い分けの必要性の検証を行う. さらに将来のスパコンアーキテクチャでは, プロセッサ内の演算性能の増大に伴い, 相対的なメモリ・ネットワークバンド幅不足の懸念が指摘されているが, そのような問題に備えて様々なデータを収集することが可能となる.
- 内点法アルゴリズムにおいては反復回数が進むに連れて変数行列の条件数が増加する傾向にあり, 特に最適解近辺では急速に増大していく. そのために大規模な SDP では数値的な不安定が発生することが多いが, アルゴリズム的な工夫, 補正のみでは改善は不十分であって, 倍精度演算の限界が指摘されている. 今後は多倍長計算の導入 (GPU による4倍精度の高速化) も睨み, 倍精度演算の限界点も推定することができる.

## 当該分野における国内外での大規模計算の現状について:

SDP のソフトウェアについては欧米諸国を中心に SDPA の他にも多数のソフトウェアが公開されている(CSDP, SeDuMi, SDPT3, DSDP 等).ただし,大規模な並列計算に対応したソフトウェアは SDPARA 以外では PDSDP(米アルゴン国立研究所)と PCSDP(オランダ チルブルグ大)の2つしか存在せず,しかも両者とも超大規模な SDP を同じく超大規模な計算資源上で解く能力では SDPARA と比較した場合、かなり劣っている.

## 2. 当拠点公募型共同研究として実施した意義

### (1) 共同研究を実施した拠点名および役割分担

代表者:

藤澤克樹(中央大学):最適化アルゴリズムの設計及びソフトウェアの開発

共同研究者:

遠藤敏夫(東京工業大学・学術国際情報センター):ソフトウェアの開発(MPI や GPU 関連)とスパコン上での大規模実行

青木尊之(東京工業大学・学術国際情報センター):ソフトウェアの開発(MPI や GPU 関連)とスパコン上での大規模実行

佐藤仁(東京工業大学・学術国際情報センター):スパコン上での大規模実行及びプロファイリングや性能解析等

### (2) 共同研究分野

超大規模数値計算系応用分野

### (3) 当公募型共同研究ならではの事項など

現在では大規模な計算基盤としてペタスケールスパコンが用いられている. 2015 年頃にポストペタスケールスパコン, さらに2018年から2020年頃にエクサスケールスパコンの登場を目指して,日本,米国,欧州,中国などで研究開発が行われている. しかし,現在の最適化理論とソフトウェア実装方

法では数千万規模の並列性を備えているポストペタスケールシステム上でのスケーラブルなソフトウェアの並列実行は困難であり,アルゴリズムとシステムソフトウェアの同時並行的な解決が求められている. 現在,複雑化&大規模化が進んでいる実問題に対しては高次元データに普遍的に内在するスパース(疎)性を利用する手法が大きな期待を集めている. しかしデータのスパース性は最新の計算機アーキテクチャ上での計算性能を大幅に低下させる要因の一つとなっている. 2015 年頃に登場する次世代ポストペタスケールスパコンでは,以下の特性が注目されている.

- 演算器の高密度化及び並列同時実行数の爆発的増大. アクセラレータ搭載による不均質化
- 記憶装置の多階層化・大容量化及び電力制限による省電力性能の重視

データのスパース化は劇的にデータ量や演算量を減らす効用がある一方でデータ構造の複雑化をもたらす単純なデータ構造を前提とした大規模並列実行性を低下させる可能性があり(上記の1), さらにデータ移動量の増大(あるいは演算量/データ移動量の比の低下)から電力性能を悪化させる可能性(上記の2)が高い. よってデータのスパース化後の計算基盤技術に対する対応の遅れがスパース性を持つ大規模実問題への適用時の大きな障害になる恐れがある. そのため今後,数理系及び情報系研究者による共創(co-design)による解決が必要かつ重要となる.

## 3. 研究成果の詳細と当初計画の達成状況

### (1) 研究成果の詳細について

半正定値計画問題(SDP)は組合せ最適化, システムと制御, データ科学, 金融工学, 量子化学など非常に幅広い応用を持ち, 現在最適化の研究分野で最も注目されている最適化問題の一つとなっている.

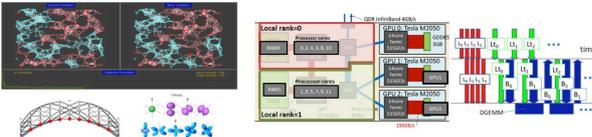
SDP に対しては高速かつ安定した反復解法である

内点法アルゴリズムが存在しているが、巨大な線形方程式系の計算(行列要素の計算と行列の Cholesky 分解)が大きなボトルネックとなっている。今回の実行においては申請者らが開発したソフトウェア SDPARA の拡張を行い、多数 GPU の活用や計算と通信のオーバーラップ技術を応用することによって、主要なボトルネックの一つである線形方程式系の Cholesky 分解の高速化と世界最大規模の SDP を高速に解くことに成功した(最大で 1.713PFlops の性能を達成)。今回の実施では疎性の追求、計算量やデータ移動量などによる計算方法の自動選択などの技術によって、入力データから密と疎な部分が自動的に抽出され、前者は主に GPU、また後者は密データに変換後に CPU アフィニティやメモリアンターリーブ技術等によって CPU コアで高速に大規模並列処理されることを検証し、様々な応用問題に対して SDPARA が高性能な汎用ソルバであることを示した(図 1)。

内点法アルゴリズムの並列計算による超大規模半正定値計画問題の解決

半正定値計画問題(SDP)は現在最も注目されている数理最適化問題の一つ

- ・ 組合せ最適化、データマイニング、量子化学、制御分野など非常に幅広い応用を持っている
- ・ 高速かつ安定した反復解法である内点法アルゴリズムが存在している



- ・ SDPARA は現在開発 & 公開を行なっている大規模な SDP に対する並列ソルバ
- ・ 内点法アルゴリズムには**2つの大きなボトルネックが存在** ⇒ 大規模な並列化
  - ・ ELEMENTS ⇒ 線形方程式系の行列(SCM)の生成 ⇒ **メモリアンターリーブ依存**
  - ・ CHOLESKY ⇒ SCMに対するコレスキー分解 ⇒ **倍精度浮動小数点演算依存**
- ・ ELEMENTS : ノード内の NUMA 関係の情報を読み取り、自動的に最適な processor affinity や memory interleaving の設定を行う ⇒ MPI + OpenMP による2段階並列計算 ⇒ 東工大 Tsubame 2.0 1360 ノード(16,320 CPU cores)での高いスケーラビリティ
- ・ CHOLESKY : 通信と計算のオーバーラップと多数 GPU による並列計算 ⇒ 東工大 Tsubame 2.5 4080 GPUs(NVIDIA K20X)での大規模分散並列化 ⇒ 浮動小数点演算**1.713 PFlops**の達成と**世界最大規模の SDP(233万制約超)**を初めて解くことに成功した

図 1: 研究成果の概要

研究成果の詳細:

研究代表者らが開発を行ったソフトウェア SDPARA を用いて数値実験を行う。特に疎性の追求、計算量やデータ移動量などによる計算方法の自動選択などの技術によって、入力データから密と疎な部分が自動的に抽出され、前者は主に GPU、また後者は密データに変換後に CPU コアで高速に大規模並列処理されることを検証する。さらに前者の GPU による計算部分においては前回での性

能値 533TFlops, 4080GPU)を更新することも目指す。

1. n : SDP の変数と定数行列の大きさ(図 2)
2. m : SDP の主問題における制約式の数(図 2)
3. # nonzero : 定数行列  $A_i$  ( $i = 0, \dots, m$ ) における非零要素の総数
4. SCM: 線形方程式系の左辺係数行列(サイズは  $m \times m$ )
5. ELEMENTS : 係数行列(SCM)の全要素の計算(主要なボトルネックの一つ目)
6. CHOLESKY : 係数行列(SCM)の Cholesky 分解(主要なボトルネックの二つ目)

SDP(SemiDefinite Programming)

Primal

$$\left. \begin{aligned} & \text{minimize} && C \bullet X \\ & \text{subject to} && A_p \bullet X = b_p \quad (p = 1, 2, \dots, m), \quad X \in S_+^n \end{aligned} \right\} (1)$$

Dual

$$\left. \begin{aligned} & \text{maximize} && \sum_{p=1}^m b_p z_p \\ & \text{subject to} && \sum_{p=1}^m A_p z_p + Y = C, \quad Y \in S_+^n \end{aligned} \right\} (2)$$

$S^n$  :  $n \times n$  symmetric matrices  
 $X \bullet Y = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n X_{ij} Y_{ij}$   
 $X \in S_+^n$  ( $S_{++}^n$ ) :  $X \in S^n$  is positive semidefinite (or positive definite)  
 $A_p \in S^n$  ( $p = 0, 1, \dots, m$ ) and  $b \in \mathbb{R}^m$

図 2: SDP の等式標準形

- ・ Step 0 内点実行可能解  $(X^0, Y^0, z^0)$ ,  $X^0 \succ O$ ,  $Y^0 \succ O$  を選び,  $k = 0$
- ・ Step 1 もし最適性条件を満たしていれば終了。そうでなければを計算  $\mu^k = \frac{X^k \bullet Y^k}{n}$
- ・ Step 2 ある  $\beta \in (0, 1)$  に対して、
 
$$\begin{cases} A_i \bullet dX = -(A_i \bullet X^k - b_i), & (i = 1, \dots, m) & dX \in S^n, \\ \sum_{i=1}^m A_i dz_i + dY = -(\sum_{i=1}^m A_i z_i^k + Y^k - C), & & dY^k \in S^n, \\ dXY^k + X^k dY = -(X^k Y^k - \beta \mu^k I) \end{cases}$$
 を近似的に解き、探索方向  $(dX, dY, dz) \in S^n \times S^n \times \mathbb{R}^m$  を求める
- ・ Step 3
 
$$\begin{aligned} X^{k+1} &= X^k + \alpha_p dX \succ O, \\ (Y^{k+1}, z^{k+1}) &= (Y^k, z^k) + \alpha_d (dY, dz) \succ O, \end{aligned}$$
 となるようなステップサイズ  $\alpha_p, \alpha_d \in (0, 1]$  を求める  $k := k + 1$

図 3: SDP に対する内点法アルゴリズム

内点法アルゴリズム(図3)の(1 反復の)計算量は上

記の  $n$  と  $m$  を用いると  $O(m^2n^2 + mn^3 + m^3)$  と表現することができる(Step 2 において ELEMENTS が  $O(m^2n^2 + mn^3)$ , CHOLESKY が  $O(m^3)$ ). しかし,上記で述べた工夫等によって SDPARA では Step 2 の計算量を  $O(n^3 + m^3)$  まで減らすことに成功した.次に具体的に今回の課題で解く SDP と計算時間やメモリ量の推定を行う.

(2) 当初計画の達成状況について

これまでの研究結果から主な SDP は以下の三つに分類して効率良く処理することが可能である.疎性の追求,計算量やデータ移動量などによる計算方法の自動選択などの技術によって,入力データから密と疎な部分を自動的に抽出する.その後,以下の三つの計算方法が自動的に正しく選択されて,高性能(絶対性能及びスケーリング)に並列処理されることを示す.

1. SCM が疎な場合 ⇒ SCM に対する Parallel Sparse Cholesky 分解の適用
2. SCM が密かつ  $n \geq m$  の場合 ⇒ CPU に対する affinity の自動設定と多数の CPU コアによる処理(浮動小数点演算性能に非依存:密データへ変換)による SCM 要素の並列高速計算
3. SCM が密かつ  $n < m$  の場合 ⇒ 多数 GPU と通信の計算のオーバーラップ技術による Parallel Dense Cholesky 分解の適用

○問題例1:組合せ最適化問題(二次割当問題):  
上記の3に相当  
二次割当問題(Quadratic Assignment Problem : QAP)はスケジューリング問題や LSI の回路配置,施設配置問題などの定式化に現れる代表的な NP-困難な組合せ最適化問題の一つである.

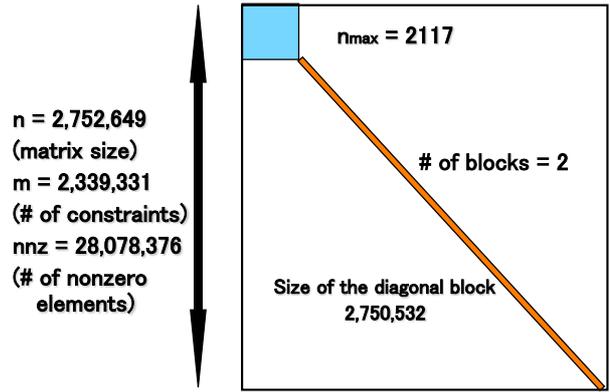


図4:巨大 SDP のデータ構造(二次割当問題)

$m$  は最大で 233 万程度を想定(図4).

ここで東京工業大学 TSUBAME 2.0 (2.5) スーパーコンピュータ(図5)での SDPARA の実行例を紹介する. TSUBAME 2.0 (2.5) は各ノードに 2CPU と 3GPU を搭載している.TSUBAME 2.0 では全ノードに Tesla M2050 が3枚, TSUBAME 2.5 では全ノードに K20X が搭載されている.

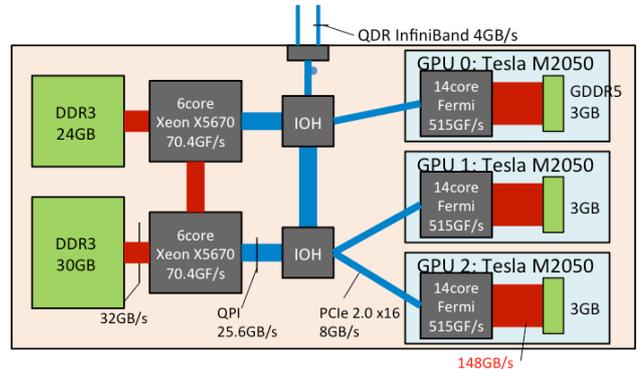
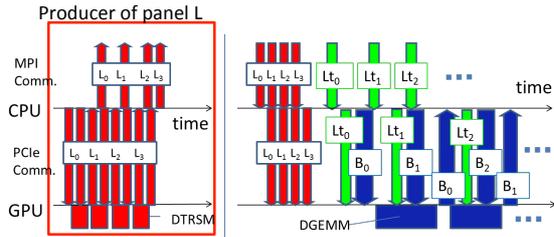


図5:TSUBAME 2.0(2.5) 1ノード内の構成

今回,TSUBAME2.5 を用いて主要なボトルネックの一つである線形方程式系の Cholesky 分解に対して,多数 GPU の活用や計算と通信のオーバーラップ技術(図6)を応用することによって,制約式の数が 233 万以上となる 世界最大規模の巨大 SDP(図4)を解くことに成功した.また SDP の世界記録の更新(233 万制約)及び最大で 1.713PFlops(Cholesky 分解:4080 GPU)の性能を達成した(2013 年 9 月).

### Parallel Algorithm of Cholesky Factorization

Version 4: GPU computation, PCIe communication, and MPI communication are overlapped



- Diagonal block factorization → PANGEL factorization → Panel broadcast and transposition →
- Update: Each process updates its own part of the rest matrix, taking the corresponding part of  $L$  and  $Lt$  (trace of  $L$ ). Then  $B' = B' - L \times Lt(Lt)$  is computed.

図6: Cholesky 分解における計算と通信のオーバーラップ技術

• 最大並列数 : 1360 ノード, 4080 GPU.

なお,各ノードの3GPUにそれぞれ1MPIプロセスずつを割り当てたため,このときの MPI プロセス数は4080である.さらに各プロセスはGPUに加え,初期化・行列生成のためにOpenMPを介して複数CPUコアを用いている.この時,Cholesky分解部分は約2490秒であり,演算性能1.713PFlops(倍精度)(図7)となり,TSUBAME2.5を有効活用することにより,実用的な数理最適化問題においてペタスケールの演算を実現することができた.

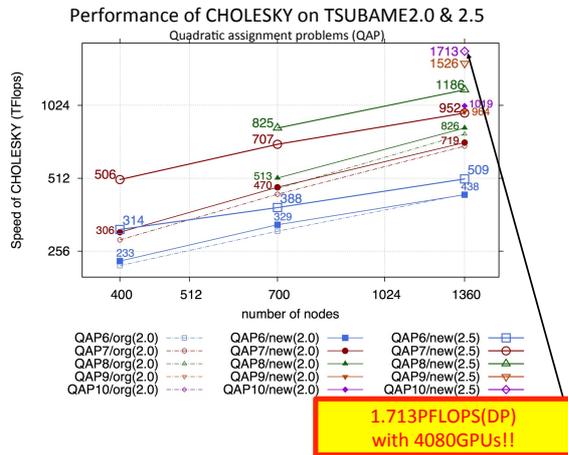


図7: Tsubame 2.0(2.5)における Cholesky 分解の並列計算の性能

○問題例2:量子化学分野に対するSDPの適用:上記の2に相当

縮約密度行列法では分子の基底状態が2次の縮約密度行列に相当し,今回は基底状態エネルギーの下界値を(固有値問題に変換して)SDPを用いて計算する(図8).

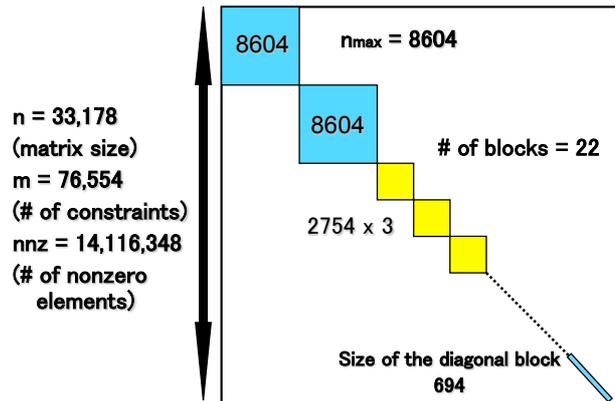


図8: 巨大SDPのデータ構造(量子化学)

今回,ノード内のNUMA関係の情報を読み取り,自動的に最適なprocessor affinityやmemory interleavingの設定を行うツールの開発を行い,MPI + OpenMPによる2段階並列計算と組み合わせることによって,東工大 Tsubame 2.0 1360 ノード(16,320 CPU コア)で高いスケーラビリティを得ることが出来た(図9).

#### Scalability for Electronic4 and Electronic5

- high efficiency (75.9% for Electronic4)
- higher efficiency when solving an SDP problem larger than Electronic4 because the efficiency for Electronic4 is higher than that for Electronic5.

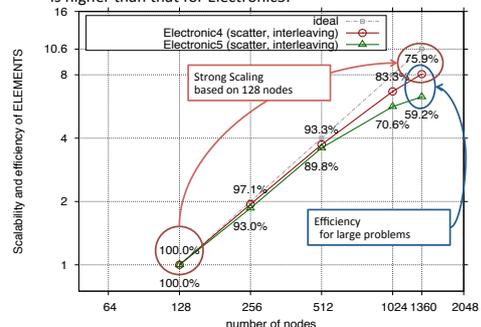


図9: Tsubame 2.0(2.5)における ELEMENST の並列計算とスケーラビリティ

#### 4. 今後の展望

目標とする問題の大きさ及び Cholesky 部分の並列計算性能において, 以下のように当初の目標を大きく上まっている.

- 当初想定していた問題サイズ 100 万制約  
→ これまでの結果 233 万制約
- 当初想定していた並列計算性能 1PFlops  
超え → これまでの結果 1.713PFlops

今後は TSUBAME 2.5 を上回る規模の CPU + GPU 搭載型のスーパーコンピュータが日本に存在しないことから, 大幅な性能向上は望めないが, さらなる省メモリ化と性能向上及び産業応用等に取り組む予定である.

#### 5. 研究成果リスト

##### (1) 学術論文

M. Nakata, M. Fukuda and K. Fujisawa, Variational Approach to Electronic Structure Calculations on Second-Order Reduced Density Matrices and the N-Representability Problem, H. Siedentop (eds.), Complex Quantum Systems - Analysis of Large Coulomb Systems, Institute of Mathematical Sciences, National University of Singapore, pp163-194, 2013(査読付き)

##### (2) 国際会議プロシーディングス

Y. Yasui, K. Fujisawa and K. Goto, NUMA-optimized Parallel Breadth-first Search on Multicore Single-node System, The proceedings of the IEEE BigData2013, 2013 (査読付き)

K. Fujisawa, T. Endo, Y. Yasui, H. Sato, N. Matsuzawa, S. Matsuoka and H. Waki, Peta-scale General Solver for Semidefinite Programming Problems with over Two Million Constraints, The 28th IEEE International Parallel & Distributed Processing Symposium (IPDPS 2014), 2014(査読付き)

Y. Yasui, K. Fujisawa and Y. Sato, Fast and Energy-efficient Breadth-first Search on a single NUMA system, Intentional Supercomputing Conference (ISC 14), 2014. (査読付き)

##### (3) 国際会議発表

K. Fujisawa, T. Endo, H. Sato, Y. Yasui, N. Matsuzawa and H. Waki, Peta-scale General Solver for Semidefinite Programming Problems with over Two Million Constraints, The 9th International Conference on Optimization: Techniques and Applications (ICOTA 9), Taipei, Taiwan, 2013.

##### (4) 国内会議発表

安井 雄一郎, 藤澤 克樹, 竹内 聖悟, 湊 真一, ULIBC ライブラリを用いた共有メモリ型並列アルゴリズムの高速化, ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム, 2014(査読付き)

##### (5) その他 (特許, プレス発表, 著書等)

受賞関係:

○第1回 Green Graph500 ベンチマーク 世界1位 (ISC13, ライプツィヒ, ドイツ)

○第2回 Green Graph500 ベンチマーク 世界1位 (SC13, デンバー, アメリカ)

○日本オペレーションズ・リサーチ学会 研究賞 (単独受賞: 藤澤克樹)

○NVIDIA GTC Japan 2013 最優秀ポスター発表賞

プレス発表:

東工大のスーパーコンピュータ (スパコン) 「TSUBAME シリーズ」が省エネ性能ランキングで2冠を達成: 東工大プレスリリース

[http://cloud.watch.impress.co.jp/docs/news/20131121\\_624581.html](http://cloud.watch.impress.co.jp/docs/news/20131121_624581.html)