jh200037-NAH

高性能・変動精度・高信頼性数値解析手法とその応用

中島研吾(東大情報基盤センター)

概要 本研究は,最先端のスパコン向けに開発された高性能数値アルゴリズムに対して, 半精度から倍精度、倍々精度までの広範囲をカバーする変動精度演算を適用し、精度保 証,そのための自動チューニング手法を開発する。開発された手法を様々なアプリケー ションに適用することで、低精度を中心とした変動精度演算の科学技術シミュレーショ ンへの有効性を検証する。開発したアルゴリズム、アプリケーションの消費電力の直接 測定によって、各計算の特性と低精度演算の有効性を消費電力の観点から検討する。

- 1. 共同研究に関する情報
 - (1) 共同研究を実施した拠点名 北海道大学 東京大学 東京工業大学 名古屋大学 九州大学
 - (2) 共同研究分野 超大規模数値計算系応用分野
 - (3) 参加研究者の役割分担
 - 中島研吾(東大)(代表)全体統括

 ・高性 能アルゴリズム
 - 市村強(東大)(副代表)高性能アルゴ リズム・地震シミュレーション
 - 横田理央(東工大)(副代表)高性能アル ゴリズム・精度保証
 - Sameer Deshmukh, 大友 広幸, Peter Spalthoff, Qianjiang Ma , Muhammad Ridwan Apriansyah (東工大) H行列精度 保証
 - 岩下武史(北大)高性能アルゴリズム
 - 深谷 猛(北大)高性能アルゴリズム
 - 池原 紘太(北大)混合精度アルゴリズム
 - 塙 敏博 (東大) 性能最適化・電力測定・ FPGA
 - 伊田明弘(東大)高性能アルゴリズム
 - 星野哲也(東大)高性能アルゴリズム
 - 坂本龍一(東大)電力測定・AT
 - 有間英志 (東大) 電力測定・AT

- 藤田航平(東大)高性能アルゴリズム
- 近藤正章(東大)精度保証·電力測定·AT
- 奥田洋司(東大)工学シミュレーション ٠
- 森田直樹(東大)工学シミュレーション ٠
- 荻田武史(東女大)精度保証·AT •
- 田中一成(早大)精度保証·AT •
- 尾崎克久(芝工大)精度保証・AT .
- 片桐孝洋(名大) 精度保証・AT •
- 山梨祥平(名大)非構造ステンシル問題 ٠ AT
- 八代 尚(環境研)大気シミュレーショ ン
- 河合直聡(理研)高性能アルゴリズム
- 井上弘士(九大)精度保証·電力測定·AT ٠
- 荒川 隆 (RIST) 大気シミュレーション
- 成瀬 彰 (NVIDIA) 精度保証・AT ٠
- 堀越将司(インテル)精度保証・AT ٠
- 大島聡史(名大)高性能アルゴリズム ٠
- Gerhard Wellein (FAU Erlangen-٠ Nürnberg, Germany)高性能アルゴリズム
- Achim Basermann (DLR, Germany) 高性能 • アルゴリズム
- Osni Marques (LBNL, USA) 高性能アルゴ リズム, AT

2. 研究の目的と意義

エクサスケールシステムにおける高性能数値ア ルゴリズム実現には、メモリ・ネットワークの階 古村孝志(東大)地震シミュレーション 層の深化に対応した通信最適化(Serial, Parallel)

とともに省電力・省エネルギー(以下「省電力」) に向けた検討が必要である。Approximate Computing (S. Mittal, A Survey of Techniques for Approximate Computing, ACM CSUR 48-4, 2016) は, 低精度演算の積極的活用により計算時間短縮、消 費電力削減を図る試みであり、従来は画像認識等 の計算精度の要求されない分野を対象としていた が、昨今は数値計算において半精度から四倍精度 まで演算精度を動的に変動させる変動精度 (Transprecision)の研究が進められている。数値計 算による近似解(数値解)は様々な計算誤差を含 み、計算結果の信頼性の観点から、数値解の正し さを数学的に保証する必要があり,低精度・変動 精度使用時、悪条件問題には重要であるが、実問 題で現れる大規模疎行列・H 行列への応用例はほ とんどない。本研究では、JHPCN システム群の中 で消費電力当たり計算性能(GFLOPS/W 値)の高 いシステムを主たるターゲットとして,以下を実 施する:

- 疎行列演算,H行列演算,ステンシル演算等の 代表的数値アルゴリズム,各アプリケーション (地震,大気科学,量子科学,構造力学)について,Serial・Parallel 通信最適化に着目した高 性能最適化手法を各システムにおいて実装し, 低精度演算・変動精度演算について検討し,消 費電力を測定する。
- ・ 疎行列演算やH行列演算を対象として,特に悪 条件問題における実用的な精度保証法を確立 する。更に前項の各アルゴリズム,アプリケー ションについて所望の結果精度達成という条 件下で,計算時間や消費電力を最小化する最適 な演算精度を自動チューニング技術によって 動的に制御する手法を確立する。
- 本研究によって開発された高性能・変動精度・ 高信頼性数値解法を、自動チューニング機構を 有するアプリケーション開発・実行環境 ppOpen-HPC (JST-CREST 2011-2018, <u>https://github.com/Post-Peta-Crest/ppOpenHPC</u>)及 び(計算+データ+学習)融合を実現する革新

的ソフトウェア基盤 h3-Open-BDEC (科研費基 盤 S 2019-2023, <u>http://nkl.cc.u-tokyo.ac.jp/h3-</u> <u>Open-BDEC/</u>) に実装し,東大 Oakforest-PACS (OFP),東大 Reedbush (RBH, RBL),東大 Oakbridge-CX(OBCX),東工大 Tsubame-3(TSB3) で公開する。将来的には「富岳」も含む他のセ ンターのスパコンへの導入も視野に入れる。

本研究は、最先端のスパコン向けに開発された高 性能数値アルゴリズムに対して、半精度から倍精 度、倍々精度までの広範囲をカバーする変動精度 演算を適用し、精度保証、そのための自動チュー ニング手法を開発する試みとしては初めてのもの であり、開発された手法を様々なアプリケーショ ンに適用することで、低精度を中心とした変動精 度演算の科学技術シミュレーションへの有効性を 検証できる。開発したアルゴリズム、アプリケー ションの消費電力の直接測定によって、各計算の 特性と低精度演算の有効性を消費電力の観点から 検討可能となる。

3. 当拠点公募型研究として実施した意義

JHPCN は多様な計算機環境を備え,実用的なシ ステムとして最も GFLOPS/W 値の高い OFP, RBH, RBL, OBCX, Tsubame-3 等の大規模システムを有 し、本研究の目指す高性能・変動精度・高信頼性 数値解法の研究には最適である。RBL, OBCX で は「ノード固定」における設定カスタマイズによ り、個別ノードの消費電力測定が可能である。 JHPCN は様々な分野の専門家を擁し、本研究の ような学際的研究を推進する体制を容易に構築で き,北大,東大,東工大,名大,九大各センターか ら様々な分野の研究者が参加している。JHPCN 各センターはオープンソースソフトウェア活用に 積極的であり、本研究の成果を公開、各センター のスパコンにデプロイし,講習会等の普及活動を 協力して行い、利用者拡大、ソフトウェアの更な る改良が可能となる。

4. 前年度までに得られた研究成果の概要

本研究では、ステンシル計算(①構造格子,② 半構造格子)、疎行列演算(③一般行列,④悪条 件問題,⑤Adaptive CG)、⑥H行列,⑦精度保 証,⑧消費電力測定,⑨自動チューニング手法, の各項目についての研究開発を実施する。本研究 は2018年度から、3年計画として実施し、上記 ①~⑨の項目について、研究開発成果を学会等で 発表する他、ISC18・19、SC18・19等の国際会議 の展示ブースでも紹介した。2018年度の段階で 低精度・混合/変動精度演算をアルゴリズム、最 適化、精度保証、消費電力まで含めて扱った研究 事例はほとんどなかったが、SC19(2019年11 月)では、低精度・混合/変動精度演算を数値計 算に取り入れた研究事例が多数見られた。2019 年度までに得られた知見は以下の通りである:

- 従来, 倍精度演算が適用されていた科学技術 計算に単精度・半精度・混合演算を適用し, 反復改良法(Iterative Refinement)併用によ り,同等の精度の計算結果がより短時間で得 られる場合がある。一般に,計算時間短縮に 比例して消費エネルギー(Joule)は減少。
- ・ 悪条件問題では、低精度演算では正解が得られない場合がある。特に半精度演算は変数の範囲が限定されるため注意が必要であり、精度の要求されない反復法前処理等に適用するべきである。
- 従来の M 疎行列向け精度保証手法(T. Ogita 他, 2001)は、相対誤差上限の見積もりが厳 しめであったため、より現実的な手法を開発 し、悪条件問題への有効性が示された。
- 演算精度の影響は、問題規模・疎行列格納手
 法、アーキテクチャによって多様である。
- 局所的に演算精度を変更する手法の開発に着
 手し、有効性が示された。

① 実問題向け精度保証手法の開発(疎行列)

係数行列 A が M 行列性を持つ場合, 高速な精度 保証法〔Ogita et al., Computing, 2001〕を適用可能 である。不均質場におけるポアソン方程式を解く ICCG法〔6〕への適用事例では、条件数が大きく なると誤差限界が過大評価になっている可能性が ある。本年度は〔Ogita et al., Computing, 2002〕に 基づく手法を開発し, Reedbush-U(1ノード)を 使用して、昨年度と同様の条件で数値実験を実施 した。図1に示すように、提案方式によって誤差 限界の過大評価が大幅に抑制できている。また、 近似解と精度保証の計算時間は同程度である。



図1条件(λ₁/λ₂)毎の最大相対誤差(実線)と 相対残差ノルム(破線)

② FP21 適用

比較的条件の良い問題では, 倍精度演算(FP64) のかわりに単精度(FP32)を使うことによって計 算時間を短縮できる場合があるが,半精度(FP16) は有効桁数が3桁程度のため、実問題に使用する ことは困難である。本研究では FP16 と FP32 の中 間的な特性を持つデータ型である FP21 を定義し、 有限要素解析における前処理において活用した。 FP21 は符号1ビット・指数部8ビット・仮数部12 ビットの合計 21 ビットからなり, FP32 (符号1ビ ット・指数部8ビット・仮数部23ビットの合計32 ビット)と指数部のビット数が同一となる。FP21は FP32 と同じレンジを持つもののデータサイズが 1/1.5 となるため、メモリバンド幅ネックのカーネ ルにおいては実行時間が 1/1.5 になると期待され る。なお、現在の主要な計算機においては FP21 の 演算器はサポートされていないため、変数のメモ リへの格納時のみにFP21を使い,計算時にはFP21 を FP32 に変換して演算する。本研究では上記の FP21 と共に、人工知能を用いた前処理方法を開発

することで、V100 GPU ベースの計算機において 従来ソルバー比で約4倍の高速化を実現した。

③ H行列向け手法の高速圧縮手法の開発

H 行列計算の中で最も工夫を要するのは,密行 列を低ランク行列に圧縮する部分である。圧縮に は一般的に randomized SVD が用いられ,その内部 カーネルは複数の QR 分解から構成される。昨年 度は多くの小さな QR 分解を GPU 上で並列に行う batched QR 分解を開発したが,本年度はこれを TSQR (Tall & Skinny) に拡張し,任意の大きさの 行列の randomized SVD を行うための QR 分解の枠 組みを開発した。NVIDIA V100 上で FP32 を用い た場合の計算時間は cuSOLVER による QR 分解 と比較して最大 2.17 倍高速となった。

④ 問題規模・行列格納手法と演算精度の関係

倍精度演算(FP64)と比較すると単精度演算 (FP32)では計算時間が減少するが、アーキテク チャ、最適化の程度によってその影響は様々であ る。本年度研究では、ポアソン方程式を解く ICCG 法に対して、OFP (Intel Xeon Phi)、OBCX (Intel CLX)1ノードにおいて様々な疎行列格納形式、問 題規模に対して計算を実施した。



図2 アーキテクチャ・問題規模・疎行列格納法と 演算精度の効果

図2は、CRS・倍精度の計算効率を1.00とした 場合の単精度における計算効率である(CRS: Compressed Row Storage, ELL: Ellpack-Itpack, SCS: SELL-C-σ, OPT: SCS を更に最適化したもの)。 OFP ではベクトル化が不十分な場合には単精度に よる計算時間短縮効果は得られない。OFP, OBCX 共に、問題規模が大きく、データ移動量が増加す るほど単精度による時間短縮の効果が顕著である。 最適精度選択のための自動チューニング手法策定 には、これらの項目を考慮する必要がある。

⑤ 局所的な変動精度演算適用

2018 年 7 月に出席した国際会議 WCCM では, 問題の条件に応じて局所的に演算精度を変動させ る可能性について指摘された。本年度は,大規模 分散並列問題で局所的・動的に演算精度を変動, 動的に負荷分散を適用する手法の開発を進めてい る。まず,領域分割に基づく並列有限要素法にお いて,領域毎に異なる精度を適用した場合の検証 を,並列有限要素法による三次元構造解析におけ る加法シュワルツ法に基づく ICCG 法ソルバーに 対して実施した。規則形状を 8 分割した場合,6 領 域については倍精度,2 領域については混合精度 (前処理・加法シュワルツ法部分のみ単精度)の 疎行列ソルバーを適用し、均質問題において,全

疎行列ソルバーを適用し、均質問題において、全 8 領域倍精度の場合と同じ反復回数で同じ解を得 た。

5. 今年度の研究成果の詳細

本研究では、4. で示した9項目について研究 開発を実施した。ここでは紙面の都合上代表的な 研究事例、すなわち、疎行列演算、H行列演算、 精度保証、自動チューニング、変動精度・任意精 度の研究事例について紹介する。

①疎行列関連(1):前処理付き反復法における混 合精度演算[4,5,6,8,9,10,13,15,20,21,22,23,26]

不均質場における三次元熱伝導方程式を ICCG 法で解く場合において,表1に示すように,各演 算部分を倍精度(FP64),単精度(FP32),半精度 (FP16)を適用した場合,熱伝導率比λ1/λ2(行列 の条件数に比例)との関係について,富士通FX700 (A64FX)1ノード,48コアを使用した検討を実 施した。前処理に半精度演算を適用した D-H,S- Hは λ_1/λ_2 =10⁶の場合は収束解が得られていない他 は、D-S、D-H は D-D と比較して計算誤差は無い。 一方で S-S、S-H は λ_1/λ_2 =10³の以下の場合は誤差 も 1%以下であるが λ_1/λ_2 が増加すると急速に誤差 が増加する。図 3 は、各ケースにおける無次元化 した反復回数であり、D-S、D-H では解が得られる 範囲では、反復回数は D-D の場合と変化していな ことがわかる。S-H は S-S とほぼ同様である。

	反復法主要部	前処理	前処理部分ベクトル
D-D	倍精度	倍精度	倍精度
D-S	倍精度	単精度	単精度
D-H	倍精度	半精度	単精度
S-S	単精度	単精度	単精度
S-H	単精度	半精度	単精度

表1 混合精度演算における設定





②疎行列関連(2): SIMD・メニーコア計算機用の精度混合疎行列ソルバー[1]

地震解析等で使われる低次の非構造格子有限要 素法において、ソルバー本体は倍精度・前処理は 単精度を使う精度混合演算により計算コストを削 減、行列ベクトル積カーネル中のランダムアクセ スの一部を連続アクセスに変換しコア間の競合を 低コストで解決する方法を提案することで、 SIMD・メニーコア CPU の能力を引き出す手法を 開発した。Oakforest-PACS (OFP) において、従来 手法比で 3.99 倍の高速化を実現した。

③疎行列関連(3): Parareal 法への低精度演算・ 混合精度演算適用〔12,16,18〕

時間並列計算法の一つである Parereal 法におい て予測・修正計算に使用される SOR 前処理付き BiCGStab 法について,従来は倍精度のみ適用して いたが,前処理に単精度演算を適用し,反復回数 は増加するものの,名古屋大「不老」Type I サブシ ステムによる予備評価では,前処理1回当たりの 実行時間を47%削減できることが示された。更に 適切な型変換タイミングの検討,半精度演算適用 などの研究開発を実施した。

④TensorCore 上での低ランク近似〔2,3〕

TensorCore への数値データの入力は半精度 (FP16) である必要があり、このため単精度行列 積を行う場合は入力行列を半精度へキャストする 必要があり計算精度が劣化する。本研究ではこの 半精度へキャストする際に失われる仮数部を別の 半精度変数で保持する。この補正計算では、失わ れる仮数部を計算する際にアンダーフローを起こ す確率が高い。このため、同時に指数部の調整を 行うことでアンダーフローを抑制し、この補正計 算自体の精度の向上を行った。また, TensorCore の 内部では足し込みが単精度を用いて行われるが, その際の丸めの方法が通常の単精度とは異なるな るため、これも精度劣化の原因となる。このため、 中間報告では TensorCore を用いた行列積を 5-6 桁 の有効数字の精度で行なうことができたが、単精 度の誤差と比べると大きい結果となった。

最終報告では、この丸めの問題に対処するため TensorCore の足し込みを用いない方法を導入し、 TensorCore を用いた行列積において単精度と全く 同じ精度を得ることに成功した。図4に単精度の cuBLAS, TensorCore を用いた cuBLAS, TensorCore+ 精度補正の3通りの行列積における 10^{-1} 10^{-1} 10-2 10-2 10-3 10-3 error residual 10 10^{-4} X 10⁻⁵ 10^{-5} 10-6 10^{-6} 10-7 10-7 10-8 10^{-8} 215 217 2¹⁹ 215 211 211 219 213 213 2^{17} Accumulation size K ($A \in \text{float}^{2048 \times K}, B \in \text{float}^{K \times 2048}$) Accumulation size K ($A \in \text{float}^{2048 \times K}, B \in \text{float}^{K \times 2048}$)

• 🛧 cuBLAS FP32-SIMT

図4 単精度の cuBLAS(青), TensorCore を用いた cuBLAS(緑), TensorCore+精度補正(橙)の比較

誤差を示す。これは、中間報告で示した(1)補正項 の追加,(2)アンダーフロー抑制のための正規化, に加え、今回初めて行った(3)足し込みの抑制,の 3 つがそろって初めて実現できる。また, TensorCore+精度補正は、単精度のcuBLASと比べ て約半分の計算時間で実現できることが分かった。

⑤精度保証関連〔4,6,17〕

2019 年度に開発した疎行列ソルバー向け精度保 証手法を単精度演算による不均質熱伝導場に対す る ICCG 法に適用した。精度保証部分は, λ1/λ2=10⁴ で破綻する。



図 5 単精度演算時の各*λ1/λ2*における精度保証か ら得られた相対誤算上限と倍精度演算との最大相 対誤差

図5に示すように、*λ1/λ2*=10³までは倍精度演算と の最大相対誤差と精度保証から得られる相対誤差 の上限はほぼ一致しており、本手法が単精度演算 にも有効であることが示された。 更に本手法を分散メモリ環境向けに拡張し、
 Oakforest-PACS (OFP), 8 ノード, 128 ノードを使用し、不均質場における並列多重格子前処理付き
 CG 法によるポアソン方程式求解プロセスに適用を実施した(表 2,図 6)。

表2 多重格子法による精度保証実施ケース	i (6	زر
----------------------	------	----

	Problem Size	Environment for Computing
Small	2,097,152 (=128 ³)	1 node of OFP8 MPI processesHB 8×8
Large	536,870,912 • 128 nodes of OFP (=1,024×1,024 • 1,024 MPI processes ×512) • HB 8×8	



図 6 不均質場における並列多重格子前処理付き CG 法によるポアソン方程式求解プロセスについ て精度保証から得られた相対誤算上限と倍精度演 算との最大相対誤差(表2参照)

⑥ AT 関連: AT 言語 ppOpen-AT による混合精度 演算の AT [14,19]

ppOpen-AT により生成される混合精度演算コード(「最適化候補」と呼ぶ)のうち,どの最適化候補を使用するかを性能パラメタにする AT 方式を提案した。対象箇所の実行時間の計測し,ユーザからの精度要求を考慮した上で,どの最適化候補を利用するかを決定する AT 機能を提案した。

本提案では,(1)演算対象の演算精度を変化させる;(2)ユーザによりあらかじめ提示された演算 誤差以下となる;という条件で,最高速となる最 適化候補の組み合わせを選ぶ AT 機能を実現する ことを目的にする。以下の指定を前提とする:

1)ソフトウェア開発者による演算精度要求指定: 基準演算に対する相対的な演算精度劣化の許容値 (許容相対誤差)を事前に与える。たとえば,倍 精度演算結果に対し,相対誤差で 1e-10 以下にす る等,の指定である。

2) 最適化対象:基準となる演算精度に対し,より 低い精度の演算(もしくは,より高い精度の演算) による混合精度演算により,1)の要求を満たし,最 高速となる組み合わせを選ぶ。

スーパーコンピュータ「不老」TypeIサブシステ ム(Fujitsu PRIMEHPC FX1000)を用いて, 倍精度 (DP)演算と単精度(SP)演算の混合精度演算の予備 評価を行った。「不老」TypeIサブシステムは, ノー ド当たり, DP 演算は 3.3792 TFLOPS, SP 演算は 6.7584 TFLOPS である。全球雲解像モデル NICAM (Non-hydrostatic ICosahedral Atmospheric Model)(非 静力学 正二十面体 大気モデル)の, 雲の微小な物 理演算を行うカーネル physicskernel_microphysics に含まれるサブルーチンmp_nsw6を評価対象とし た。

本年度前期からの知見に基づき最終報告では, ユーザが任意のプログラムの部分に混合精度演算 の AT 適用場所をユーザが与える方式を提案し, 予備評価を行った。結果を表3に示す。

表3スーパーコンピュータ「不老」TypeIサブシ ステムでの混合精度実行の速度向上率と演算精度

演算精度の組み	速度向上率	演算精度
合わせ		(QV)
[グループ番号]		
すべて DP	1.00	1.172E-12
すべて SP	2.28	2.099E-08
<u>28</u>	<u>1.35</u>	<u>6.902E-12</u>
29	1.33	6.899E-12

表3の結果により, すべて SP にすれば2.28 倍の 速度綱領を得るが, すべて DP の時の精度(NICAM でのQV 変数)に対して約4桁の大幅な精度劣化 を招くことがわかる。そこで, グループ28の混合 精度にすれば, ほぼ同一の桁数の演算精度で, か つ6倍ほどの精度劣化を許容できれば, 1.35倍の 速度向上を享受することができる。

以上のことにより, 実アプリケーションにおい て, 本提案の AT の効果があることを明らかにし た。

⑦ 変動精度・任意精度への取り組み(1): CPU への FP21・FP42 実装〔25〕

一般的に FP64 が用いられる ICCG 法の IC 前処 理に対して,汎用 CPU 上での FP16 や FP32 に加 えて,IEEE754 に定義されていない FP21, FP42 の 実用性について評価を行った。結果,問題の条件 に依存するが,低精度でも十分な収束性を示し, 計算時間短縮に寄与することが確認できた。

低精度演算の実アプリケーションへの適用は SIMD 演算の効率化やメモリ転送量の削減による 計算時間短縮の効果が期待できるが,同時に演算 精度の低下による影響も評価する必要がある。本 研究では ICCG 法での低精度演算の実用性につい て,IC 前処理の行列やベクトルを低精度化し,検 討を行った。IC 前処理の演算精度による ICCG 法 全体の収束性への影響は比較的小さく,低精度化 による効果が得やすい。ただし,悪条件問題を解 く場合には前処理行列で係数を表現できなくなる など,精度による影響が発生する。実際に構造格 子での構造解析の問題を ICCG 法で解く場合の, IC 前処理の低精度化による効果を図7に示す。構 造解析の問題ではポアソン比を変化させることで

学際大規模情報基盤共同利用·共同研究拠点 2020 年度共同研究 最終報告書

問題の条件が大きく変化する。本評価ではポアソ ン比を 0.3~0.49 まで変化させ, IC 前処理の行列 部のみにFP21,32,42,64を適用した場合の反復回数 および計算時間を計測した。評価では OBCX スー パーコンピュータの1ノードを使用した。係数行 列の格納形式は CRS 形式である。なお、中間報告 時に課題としていた FP21, FP42 の使用によるオ ーバーヘッドに関しては, OBCX 上では 0.4%程度 と十分に小さいことを確認している。ポアソン比 が 0.3~0.43 の間では演算精度の収束性に対する 影響は小さく,低精度なデータ型ほど計算時間短 縮の効果が大きくなった。0.44~0.49の間では FP21 の収束性悪化が目立ち, FP32 の方か高速で あった。本評価では FP42 の優位性が見いだせなか ったが、非構造格子の問題など、より悪条件の問 題では FP42 の効果が得られる条件があると考え



図7 構造解析問題での低精度化の効果

次に、A64FX プロセッサを搭載した FX700 上 で、FP16を含めた評価結果を図8に示す。本評価 で使用した問題は、構造格子上で差分法を用いて 離散化したポアソン方程式を対象としている。解 くべき問題の条件は一定とし、純粋に低精度化に よる計算時間短縮の効果のみを計測した。行列の 格納形式は SIMD 化の効果を得やすい Sell-C-o形 式で係数行列を用いており、また行列だけでなく ベクトルの精度も変化させた。図8に示すように、 行列およびベクトルの低精度化により計算時間が 短縮されており、行列、ベクトルともに FP64 で計 算した場合と比較して、行列を FP16、ベクトルを FP32 で格納した場合には、IC 前処理部のみで 42.8%、ICCG 法全体で 16.9%の計算時間短縮を達 成した。FP16 などのより低精度なデータ型の使用 による計算時間短縮への影響や当問題での FP21, FP42 の効果は今後評価していく。



図8 ポアソン方程式での低精度化の効果

⑧変動精度・任意精度への取り組み(2): FPGA [7,24]

CPU, GPU では、あらかじめ演算器として用意 された FP64, FP32, FP16 しか利用できず、任意精 度の実現にはこれらを組み合わせエミュレーショ ンする必要がある。FPGA を用いることで、任意精 度の浮動小数点演算をハードウェアとして実現可 能である。そこで、任意精度の演算器をハードウ ェア記述言語(HDL)または高位合成(HLS)によっ て実現する。一方、アプリケーションから FPGA に演算オフロードを実現するために、現状では OpenCL によるフレームワークを利用する必要が あり、これらの演算器をライブラリとして実現し OpenCL から wrapper により呼び出す必要がある。

本年度は、IEEE754 浮動小数点表現を拡張した 任意精度の演算器について、Verilog HDL および SystemVerilog による実装と、C++による実装を試 み、Intel Stratix10 GX FPGA 上で性能を比較した。 その結果、C++による実装においても低コストで HDL に匹敵する演算性能が得られた。

さらに、行列積およびステンシル計算のベンチ マークにこれらの任意精度演算器を適用し、期待 通りの計算結果が得られていることを確認すると 同時に、浮動小数点ビット数を削減した場合には 演算器の搭載数を増加させることができ、全体と して高い性能が得られることを示した。本研究に ついては,2021 年 7 月に開催される xSIG 2021 で の発表,および Best Master's Student Award の受賞 が決定している [7]。

6. 今年度の進捗状況と今後の展望

本研究は、計算科学・計算機科学・数値アルゴ リズム分野の研究者の協力のもと、様々な数値ア ルゴリズムの最新アーキテクチャに向けた最適化、 低精度・変動精度導入による高速化、消費電力節 約、および精度保証に基づく最適精度選択のため の自動チューニング選択手法の確立と実アプリケ ーションでの検証を目指したものである。本研究 は 2018 年度に 3 年計画で開始し、4. で示した 9 項目 (ステンシル計算 (2 項目)、疎行列演算 (3 項 目)、H 行列、精度保証、消費電力測定、自動チュ ーニング手法) について研究開発を実施し、2020 年度は最終年度にあたっていた。

当初計画は,2018年度:各アルゴリズム・アプ リケーション最適化,多様な演算精度適用,消費 電力測定,2019年度:精度保証手法確立,2020年 度:自動チューニング手法確立,であった。

2020年度は各アルゴリズムの、演算精度、最適 化、アーキテクチャの他、問題規模も考慮して消 費電力・エネルギーへの体系的な影響評価を継続 して実施する他、低精度・混合/変動精度演算に 関する研究開発を、これまでの研究成果を元に継 続して実施し,自動チューニング手法確立を目指 す。精度保証手法については, 疎行列演算に加え て, H 行列向け手法の研究開発も実施する。各セ ンターの保有する NVIDIA V100, 東大情報基盤 センターに 2019 年度末迄に導入される富士通 FX700 (A64FX (富岳)) クラスタ等を使用して, 新アーキテクチャ向け検討も実施する。特に富士 通FX700クラスタを使用した,半精度演算(FP16) のフィージビリティースタディを様々な手法、ア プリケーションについて重点的に実施する予定で あった。

全体的に研究として順調に進捗しており,特に 疎行列演算については,FX700 クラスタを使用し た半精度演算(FP16)のフィージビリティースタ ディ, FP21・FP42の実装, FPGAによる実装については大きな進展があり,国内外で高い評価を得ている。また,2019年度に提案した疎行列演算向け精度保証手法を分散環境に拡張し,検証を実施し,成果を国際会議で発表する予定である。

一方,H行列演算向けの精度保証手法,最適精 度選択のための自動チューニング手法の確立,に ついては予備的検討に留まり,あまり研究を進展 させることができなかった。本研究は2021年度か ら新たに3年計画で第2フェーズに入るが,これ らの未達成項目については継続して取り組む予定 である。

当初目標に対する達成度としては、上記①~⑥, ⑧の各項目において、ほぼ100%、ただ⑦精度保証 については70%、⑨自動チューニングについては 50%である。大きな目標としていた自動チューニ ング手法の確立が達成できなかったこと、ライブ ラリ等の公開があまり進まなかったこともあり、 全体としての達成度は3年間で80%である。

最適演算精度選択のための自動チューニングに は機械学習の知見を併用する。そのために,行列 の性質(固有値分布,条件数等)を短時間で精度 良く算出する手法の研究開発を実施するが,この ような手法については,2019年度に予備的検討を 実施済である。

7. 研究業績一覧

- (1) 学術論文(査読有り)
- [1] K. Fujita, M. Horikoshi, T. Ichimura, L. Meadows, <u>K. Nakajima</u>, M. Hori, L. Maddegedara, Development of element-by-element kernel algorithms in unstructured finite-element solvers for many-core wide-SIMD CPUs: Application to earthquake simulation, Journal of Computational Science, Volume 45, 2020, 101174, ISSN 1877-7503, https://doi.org/10.1016/j.jocs.2020.101174

(2) 国際会議プロシーディングス(査読有り)

[2] S. Deshmukh, R. Yokota, Distributed Memory Task-Based Block Low Rank Direct Solver, ISC High Performance 2020 (Research Poster), June 2020

- [3] H. Ootomo, R. Yokota, Randomized SVD on TensorCores, ISC High Performance 2020, (Research Poster), June 2020
- [4] K. Nakajima, T. Iwashita, H. Yashiro, T. Shimokawabe, H. Matsuba, H. Nagao, T. Ogita, T Katagiri, h3-Open-BDEC: Innovative Software Platform for Scientific Computing in the Exascale Era, ISC High Performance 2020, (Project Poster), June 2020
- [5] Nakajima, K., Gerofi, B., Ishikawa, Y., Horikoshi, M., Efficient Parallel Multigrid Solver on Intel Xeon Phi Cluster, IXPUG (Intel Extreme Performance Users Group) HPC Asia 2021, 2021
- [6] Nakajima, K., Ogita, T., Kawai, M., Efficient Parallel Multigrid Methods on Manycore Clusters with Double/Single Precision Computing, IEEE Proceedings of the 16th International Workshop on Automatic Performance Tuning (iWAPT 2021) in conjunction with 35th IEEE International Parallel and Distributed Processing Symposium (IPDPS 2021), 2021 (in press)
- [7] T. Hara, T. Hanawa, Transprecision Calculation Platform Offloaded on FPGA, Proceedings of xSIG 2021, 2021 (in press) (Best Master's Student Award)
- (3) 国際会議発表(査読無し)
- [8] Nakajima, K., Innovative Methods for Scientific Computing in the Exascale Era by Integrations of (Simulation+Data+Learning), MS14: Physicsbased Simulation of Earthquake Hazards with HPC & HQC, COMPSAFE 2020 (The 3rd International Confernce on Computational Engineering & Science for Safety and Environmental Problems)
- [9] Nakajima, K., h3-Open-BDEC: Innovative Software Platform for Scientific Computing in the Exascale Era, Session IV: Toward Effective &

Efficient Next-Generation HPC Software Ecosystems, The SOS 24 Virtual Conference (March 17, 2021, On-Line) (招待講演)

- [10] Nakajima, K., Matsuba, K., Hanawa, T., Furumura, T., Tsuruoka, H., Nagao, H., Integration of 3D Earthquake Simulation & Real-Time Data Assimilation on h3-Open-BDEC, 2021 Conference on Advanced Topics and Auto Tuning in High-Performance Scientific Computing (ATAT in HPSC) (Online, March 2021)
- [11] T. Fukaya, Exploiting Lower Precision Computing in the GMRES(m) Method, 2021 Conference on Advanced Topics and Auto Tuning in High-Performance Scientific Computing (ATAT in HPSC) (Online, March 2021)
- [12] S. Ohshima, Effectiveness of Low-/Mixed-Precision Computation on Parareal Method, 2021 Conference on Advanced Topics and Auto Tuning in High-Performance Scientific Computing (ATAT in HPSC) (Online, March 2021)
- (4) 国内会議発表(査読無し)
- [13] 中島研吾,坂本龍一,星野哲也,有間英志, 塙敏博,近藤正章,低精度演算とアプリケー ション性能,情報処理学会研究報告(2020-HPC-174-5),2020
- [14] 片桐孝洋, 演算精度と実行時間を考慮する自動チューニング方式とppOpen-ATへの実装について, 第25回計算工学講演会(オンライン, 2020年6月)
- [15] 中島研吾,岩下武史,八代尚,下川辺隆史, 松葉浩也,長尾大道,荻田武史,片桐孝洋, (計算+データ+学習)融合によるエクサス ケール時代の革新的シミュレーション手法, 第25回計算工学講演会(オンライン,2020年 6月)
- [16] 大島聡史,飯塚幹夫,小野謙二,Parareal法に おける低精度計算・混合精度計算の活用につ いて,第25回計算工学講演会(オンライン, 2020年6月)

- [17] 中島研吾, 荻田武史, 塙敏博, 河合直聡, 伊田明弘, 星野哲也, 低精度・混合精度演算による高性能・高信頼性疎行列ソルバー, 情報処理学会研究報告(2020-HPC-175-2), 2020
- [18] 大島聡史,飯塚幹夫,小野謙二,Parareal法に おける低精度演算・混合精度演算の活用,日 本応用数理学会2020年度年会(オンライン, 2020年9月)
- [19] 片桐孝洋,山梨祥平,八代尚,大島聡史,永 井亨,自動チューニング言語ppOpen-ATによ る混合精度演算の最適化機能について,日本 応用数理学会2020年度年会(オンライン, 2020年9月)
- [20] 中島研吾、メニィクラスタ向け並列多重格子 法、日本応用数理学会2020年度年会(オンラ イン、2020年9月)
- [21] 中島研吾、メニィクラスタ向け並列多重格子法,,情報処理学会研究報告(2020-HPC-176-6),2020
- [22] 中島研吾, Balazs Gerofi,石川裕,堀越将司, メニィコアクラスタ向け並列多重格子法の最 適化,日本応用数理学会「行列・固有値問題 の解法とその応用」研究部会 第 30 回研究会 (オンライン, 2020 年 12 月 7 日)
- [23] 中島研吾, 塙敏博, 下川辺隆史, 坂本龍一, 有 間英志, 星野哲也, 伊田明弘, 三木洋平, 河合 直聡, 芝隼人, Society 5.0 を実現する BDEC シ

ステム,大学 ICT 推進協議会 2020 年度年大 会 (AXIES 2020) (オンライン,2020 年 12 月 11 日)

- [24] 原 忠辰, 塙 敏博, FPGAによる変動精度演算に向けた実装方法の検討, 情報処理学会研究報告(2020-HPC-177-11), 2020
- [25] 河合直聡,中島研吾,FP21及びFP42を使用 した不完全コレスキー分解前処理,情報処理 学会研究報告(2020-HPC-177-21),2020
- [26] 中島研吾,岩下武史,八代尚,下川辺隆史, 長尾大道,荻田武史,片桐孝洋,松葉浩也, (計算+データ+学習)融合によるエクサス ケール時代の革新的シミュレーション手法, 第12回 自動チューニング技術の現状と応用 に関するシンポジウム (ATTA2020)(オンラ イン,2019年12月25日)
- [27] 田中一成,中尾 充宏:不連続拡散係数を持つ 3次元ポアソン方程式の解に対する事前誤差 評価,日本応用数理学会2021年研究部会連合 発表会(オンライン,2021年3月)
- [28] 深谷 猛, 岩下 武史, GMRES(m)法における行 列データの低精度化に関する検討, 日本応用 数理学会2020年度研究部会連合発表会(オン ライン, 2021年3月)

(5) その他(特許, プレス発表, 著書等) なし