

jh210015-NAH

荻田武史(東京女子大学現代教養学部数理科学科)

# 高性能かつ高信頼な数値計算手法とその応用

High-performance and Highly-reliable Numerical Methods and Applications



岩下武史(副代表)<sup>1</sup>, 深谷猛<sup>1</sup>, 藤田航平(副代表)<sup>2</sup>, 有間英志<sup>2</sup>, 伊田明弘<sup>2</sup>, 市村強<sup>2</sup>, 河合直聡<sup>2</sup>, 近藤正章<sup>2</sup>, 坂本龍一<sup>2</sup>, 中島研吾<sup>2,7</sup>, 塙敏博<sup>2</sup>, 星野哲也<sup>2</sup>, 横田理央(副代表)<sup>3</sup>, 片桐孝洋<sup>4</sup>, 大島聡史<sup>4</sup>, 尾崎克久<sup>5</sup>, 荻田武史(代表)<sup>6</sup>, 田中一成<sup>7</sup>, 今村俊幸<sup>8</sup>, 寺尾剛史<sup>8</sup>, 椋木大地<sup>8</sup>, 八代尚<sup>9</sup>, 荒川隆<sup>10</sup>, 堀越将司<sup>11</sup>, 成瀬彰<sup>12</sup>, A. Basermann<sup>13</sup>, G. Wellein<sup>14</sup>, O.A. Marques<sup>15</sup>

1: 北大, 2: 東大, 3: 東工大, 4: 名大, 5: 芝工大, 6: 東女大, 7: 早大, 8: 理研 R-CCS, 9: 国環研, 10: RIST, 11: Intel, 12: NVIDIA, 13: DLR, Germany, 14: FAU, Germany, 15: LBNL, USA



## 本研究の背景と目的

### エクサスケール⇒ポストムーア時代

- スーパコンピュータの質的な変化・多様化: (計算+データ+学習)融合により、「知的」な計算科学へ
- 単位面積あたり消費電力・計算性能が不変
- 多様なWorkload, 多様なHW: CPU, GPU, FPGA, 量子, 専用プロセッサ等
- 消費電力すなわち計算時間・計算量の削減が大きな課題

### 低精度・変動精度演算による新計算原理の必要性

- 低・変動精度演算: 計算量・計算時間・消費電力・メモリ容量・I/O削減
- 科学技術計算の多くは倍精度(64bit)で実施されているが、条件の良い問題であれば、単精度(32bit)・半精度(16bit), 混合精度でも可能
- 我々は不必要に高精度な計算を実施して貴重な時間やエネルギーを無駄にしている...かも知れない
- 昨今, 低精度演算の活用は盛ん
  - 混合精度演算の研究, アプリへの適用は既に行われている
  - Approximate Computing: 省電力のための研究, 元々は画像処理, FPGAを含むハードウェア, システムソフトウェア, コンパイラ
  - ポストムーア時代へ向けた重要な技術の一つ
- 計算結果の信頼性を担保することの重要性**

先行JHPCNプロジェクト「高性能・変動精度・高信頼性数値解析手法とその応用(2018~2020年度, 代表: 中島研吾)」

## 本研究の目的

科学技術シミュレーションに現れる大規模行列に対して有効な疎行列ソルバーや階層型行列(H行列)演算等の高速計算に関する研究を推進し、同時にそれらの計算の信頼性及び電力効率を重視しながら、さらに悪条件な実問題に適用可能な実用的な手法の研究開発を実施する

## 本研究の概要と意義

- 疎行列ソルバー, H行列演算等の代表的な数値計算アルゴリズム, 各アプリケーション(地震学, 大気海洋科学, 量子科学, 構造力学, 流体力学, 電磁気学等)について, メモリアクセス最適化及び分散メモリ通信最適化に着目し, 安定で高性能な手法を開発, 各システムに実装し, 変動精度演算について検討して, 消費電力を測定する
- 疎行列ソルバー, H行列演算に加えて基本線形計算カーネル群(BLAS・疎行列ベクトル積)を対象として, 計算結果の実用的な精度保証/精度推定法を確立する。I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演算精度を自動チューニング技術により動的に制御する手法を確立する

- 計算機としては「富岳(理研)」、「Wisteria/BDEC-01(東大)」、「不老(名大)」等に搭載されたA64FXを中心に、NVIDIA A100, Intel Xeon Cascade Lake/Ice Lake, AMD Rome等のCPU・GPU及びその後継機種を念頭におくが、変動精度演算手法については、FPGA等に対する検討も実施する
- 得られた成果は東大情報基盤センターを中心に開発を進めている「(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) 19H05662, 研究代表者: 中島研吾(東大), <http://nkl.cc.u-tokyo.ac.jp/h3-Open-BDEC/>)」に展開し, HPCIの様々な計算機資源で利用可能とする

## 研究の意義

- 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計算アルゴリズムに対して、変動精度演算を適用し、精度保証/精度推定及び自動チューニング手法を開発する試みとしては先行プロジェクトである「高性能・変動精度・高信頼性数値解析手法とその応用(2018~2020年度)」に引き続き、国内のみならず国際的にも唯一のものである
- 本研究では、先行研究で得られた知見を基に、疎行列・H行列を係数行列とする、さらに悪条件な実問題に適用可能な実用的数値解法, 精度保証/精度推定法, 自動チューニング手法の研究開発を実施するとともに、これらの数値解法に不可欠な基本線形計算カーネル群(BLASおよび疎行列ベクトル積)に関する研究グループを新たにチームに加え、機械学習等も含めたより広範囲なアプリケーションに対応する
- 本研究において開発した手法を様々なアプリケーションへ適用することによって、科学技術シミュレーションにおける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、各計算の特性と変動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
- 本研究は、来たるべきポストムーア時代, さらにそこで重要な役割を果たすことが予想される確率的コンピューティングの発展に貢献するものと期待される

## 研究計画

- ①疎行列ソルバー, ②H行列演算, ③計算機システムと消費電力測定, ④精度保証/精度推定手法及び自動チューニング手法, の各項目について, ①+③+④, ②+③+④のように複数の項目で緊密に連携しながら, 2021年度から3年計画として研究開発を実施する
- 各項目において, OBCX, OFP, Wisteria(Aquarius), Wisteria(Odyssey), 不老を使用する

- ① 疎行列ソルバー:** 近年の研究で有効性が明らかになった特殊な浮動小数点フォーマットFP21, FP42等を中心として, 前処理付き反復法の研究開発を実施し, 伝熱・流体・構造解析, 大気海洋・地震シミュレーション, 電磁場解析等幅広い問題に対して安定して効率よく解を求められる前処理付き反復法, 疎行列格納法, 演算精度を変化させる変動精度演算手法の研究開発を実施する
  - JHPCN計算機資源の他, 変動精度演算手法の研究開発においては, FPGAの利用も視野に入れる
  - 三次元地震シミュレーションでは, 単精度+倍精度+半精度による混合精度演算がAdaptive CGソルバーに実装されている。本研究では, 過去の計算結果から得られた知見にデータ解析の手法を取り入れた新しい前処理手法(Data Analyticsアプローチ)に関する研究を実施し, 混合精度演算をさらに活用することでAdaptive CGの更なる安定化, 性能改善とともに, 他のアプリケーションへも展開する

- ② H行列演算:** H行列ライブラリへの変動精度演算の実装とともに, 未知数Nに対して悪条件問題をO(N)で解くことが可能な革新的な高性能手法を開発する
  - 電磁気学, 地震発生サイクル等の大規模シミュレーションによる性能検証, 精度評価を実施する
  - 悪条件問題における単精度演算適用の可能性について併せて検討する

- ③ 計算機システムと消費電力測定:** 変動精度演算を効率的に扱う計算機システムについての検討を行う
  - 上記①, ②の各項目と連携し, 問題規模, 諸パラメータ, 演算精度, 消費電力, 計算時間の関係の体系化を行う。ジョブの電力特性はジョブのフェーズや演算精度によって異なるため, ジョブ毎の演算精度, 電力特性を考慮したうえでシステム全体での最適化手法を検討する
  - 変動精度に適した計算機アーキテクチャの検討を行う
  - 電力計測を自動化するためのツール, 計測結果の分析を簡便に行うためのツール整備を行う

- ④ 精度保証/精度推定と自動チューニング手法:** 上記①~③の知見を活用し, 各項目と連携しながら, ユーザ所望の演算精度/結果精度で計算時間と消費電力を最小化する自動チューニング(AT)手法を確立する。
  - 反復改良法による悪条件問題向け精度保証手法, 機械学習も含めた手法によって, 計算時間, 消費電力・エネルギー等を最小にする演算精度・疎行列格納法・前処理手法を自動選択するAT手法を開発する
  - アプリケーションの演算, 問題サイズ, ハードウェア環境等に基づきAT技術によって動的に制御する手法を, 個別のアプリケーション及び, ppOpen-AT(ppOpen-HPCのAT機構)(片桐他2013), h3-Open-AT(h3-Open-BDECのAT機構)にプロトタイプ化する
  - 尾崎スキーム(Ozaki他2012), DotK(Ogita他2005)等の高精度計算法を活用した, 低精度から高精度までをカバーする基本線形計算カーネル群(BLASおよび疎行列ベクトル積)のCPU・GPUにおける高性能実装および電力性能の検討を行う

## 2021年度研究計画

実施項目	担当者	概要
① 疎行列ソルバー	主担当: 岩下・中島・藤田 担当: 市村・深谷・星野・河合・八代・荒川・大島・Wellein・Basermann	1. 悪条件問題を含む様々なアプリケーションを対象としてFP21, FP42に関するフィージビリティスタディを実施し, 消費電力測定も含めた性能評価を実施し, 変動精度演算手法(計算途中で空間によって精度を変化させる手法)に関する研究開発(予備的検討実施済み)を実施する。 2. 倍精度と単精度を併用した混合精度型GMRES法を主な対象として研究を実施する。具体的には, 多様なテスト行列を用いた収束性の評価や, 混合精度計算に適したソルバー内のパラメータ設定の検討等を行う。また, SIMDベクトル命令に適合する不完全LU分解前処理に関する研究を行う。 3. Data Analyticsアプローチを含む混合精度演算によるAdaptive CGのプロトタイプ開発を実施する。
② H行列演算	主担当: 横田 担当: 岩下・伊田・星野・塙・大島・河合	1. 混合精度演算をH行列に用いた場合の精度への影響を調べるため, 疎行列における Suite Sparse Matrix Collection (旧 University of Florida Sparse Matrix Collection) のような密行列のコレクションを作成し, それによる精度の評価を行う。 2. H行列を直接法として用いた場合の密行列の条件数と低ランク近似の精度及び浮動小数点の精度の関係性を明らかにする。
③ 計算機システムと消費電力測定	主担当: 坂本 担当: 塙・近藤・成瀬・堀越・有間	1. 上記①, ②の各項目の性能・電力の評価を行う。また, ツールの実装を行う。 2. ベンチマーク用プログラムPoisson-3Dをベースに, 様々な条件下で固有値の算出ツールの整備を実施する。
④ 精度保証/精度推定と自動チューニング手法	主担当: 荻田・片桐 担当: 横田・近藤・尾崎・田中・今村・椋木・寺尾・Marques	1. 反復改良法による悪条件問題向け精度保証/精度推定手法の検討を, 不均質場における構造解析問題を対象として実施する。 2. ATに使用する固有値分布等係数行列の特性を効率的に抽出するためのツールの開発を上記①と連携しながら実施する。 3. 椋木らによって開発した尾崎スキームに基づくOzBLAS, DotKIに基づくBLAS-DOT2の複数精度対応版の実装・評価を実施する。