

高性能・高信頼な数値計算手法と応用の新展開



● 研究の意義

- I) 疎行列ソルバ、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、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各システムに実装し、消費電力の効果を検証しつつ、変動精度演算を実用的レベルまで引き上げることを目指す。
- II) 疎行列ソルバ、H行列やFMMの演算に加えて、基本線形計算カーネル群（BLAS、テンソル演算、疎行列-ベクトル積）を対象として、実用的な精度保証法/精度推定法のアプリケーション適用拡大を目指す。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（Auto-tuning, AT）技術により、動的に制御する手法の確立を目指す。

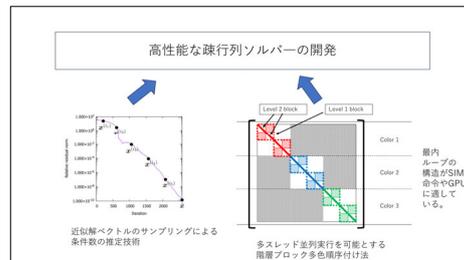
● 主な構成員と研究計画

- ① 疎行列ソルバ（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）
- ② H行列演算（主担当：横田、担当：岩下・伊田・星野・塙・大島・河合）
- ③ 計算機システムと消費電力測定（主担当：坂本・塙、担当：近藤、Wellein・Basermann）
- ④ 精度保証と自動チューニング手法（主担当：片桐・荻田、担当：伊田・横田・近藤・尾崎・今村・Marques）

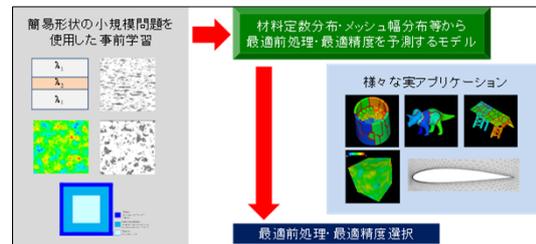
● 研究内容紹介

● ① 疎行列ソルバ

- (1) 低・任意精度を適用したICCG法：スパースな単調行列向け精度保証手法を、不均質場における熱伝導方程式を有限体積法で解く場合に得られる連立一次方程式求解（ICCG法）へ展開する
- (2) 疎行列ソルバ及び前処理手法：近似逆行列前処理（AINV）はILU/IC前処理と比べGPUを用いた計算に適す。しかし、前処理行列生成のコストが他の前処理と比べて大きい。そこで、前処理行列の生成過程で一部の計算を簡略化することで、生成部の高速化を図る方法を発展させる（図1(a)）
- (3) Data Analyticsアプローチ：非構造格子有限要素法により離散化し、Maxwell modelに基づく粘弾性地殻変動解析を対象に、過去時間ステップにおける解を学習し、次の時間ステップの解を高精度で推定する手法を発展させる
- (4) 疎行列演算における最適前処理・演算精度の選択：対象問題の材料定数分布とメッシュ幅分布等から、計算実施前に計算時間を最短とし、消費エネルギーを最小とする最適前処理・最適演算精度を選択する手法の開発を行う（図1(b)）



(a) 疎行列ソルバおよび前処理手法



(b) 疎行列演算における最適前処理・演算精度の選択
図1：① 疎行列ソルバの研究内容

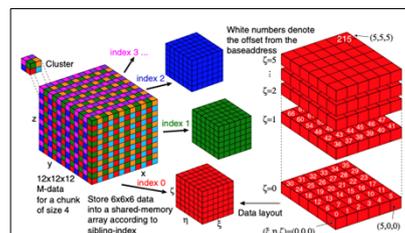
```

Algorithm 1: LU-IR
Input:  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ,  $b \in \mathbb{R}^n$ ,  $k_{max} \in \mathbb{N}$ ,  $\epsilon_{max} \in \mathbb{R}$ 
Output: approximate solution  $\hat{x} \in \mathbb{R}^n$  to  $Ax = b$ 
1 compute the factorization  $A = LU$  in precision  $u_f$ 
2 solve  $LUx_0 = b$  in precision  $u_f$ 
3 store  $x_0$  at precision  $u$ 
4 for  $k = 1$  to  $k_{max}$  do
5   compute  $r_k = b - Ax_{k-1}$  in precision  $u$ 
6   round  $r_k$  to precision  $u$ 
7   if  $\|r_k\| \leq \epsilon_{max}$  then
8     return  $x_{k-1}$ 
9   end
10 solve  $LUd_k = r_k$  in precision  $u$ 
11 store  $d_k$  at precision  $u$ 
12  $x_k = x_{k-1} + d_k$  in precision  $u$ 
13 end
14  $\infty$  iteration has not converged
  
```

(a) 混合精度演算を用いたH行列のCholesky分解

● ② H行列演算

- (1) 混合精度演算を用いたH行列のCholesky分解：従来では反復改良法の前処理に低精度演算が使われてきた。本研究では、低精度演算だけでなく、H行列による低ランク近似も用いる手法開発を行う(図2(a))。
- (2) FMMのTensor Core実装：FMMのセル同士の計算は通常は行列-ベクトル積となる。セルの位置関係の並進不変性や回転対称性を利用すると行列-行列積となる。この行列積をTensor Coreで計算することで、FMMを高速化する手法を研究する(図2(b))



(b) FMMのTensor Core実装

図2：② H行列演算の研究内容