

課題名(タイトル):

## 大規模・高並列・高性能な数値計算ソフトウェアライブラリの研究開発

利用者氏名:

○今村 俊幸(1,2), 伊奈拓也(1,2), 工藤 周平(1,2), 椋木 大地(1,2), Yiyu Tan(3), Franz Frachetti(1), 寺尾剛史(1)

理研における所属研究室名:

- (1) 計算科学研究センター 大規模並列数値計算技術研究チーム
- (2) 計算科学研究センター FS2020 開発プロジェクト アーキテクチャ開発チーム
- (3) 計算科学研究センター 次世代高性能アーキテクチャ研究チーム

### 1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

本課題では「富岳」およびエクサスケールコンピュータに向けた、大規模・高並列・高性能な数値計算ソフトウェアライブラリの実現に向けた研究開発を行うことを目的とする。計算科学で用いられるアプリケーションの多くは、連立一次方程式や固有値計算、高速フーリエ変換、非線形方程式などの様々な数値計算ソフトウェアライブラリの上に構築されている。申請チームで業務として推進している「京」コンピュータでの高度利用化プロジェクトと比べてさらなる大規模化・高並列化が次世代のスーパーコンピュータにおいて進むことが明確になっている。これらのソフトウェアライブラリが十分な性能を発揮できるようにするためには、アルゴリズムや実装方法の見直しが不可欠である。当初、本研究では京コンピュータをベースとする FX10 の後継機 FX100 と GPU クラスタ、さらに Intel のサーバ向け CPU である SkyLake-SP を活用して、次世代のスーパーコンピュータに向けた数値計算ソフトウェアライブラリに必要なアルゴリズムの選定・評価、プログラムの実装技術に関する基礎研究を行っていたが、機種変更などにより本年度以降の活動における HOKUSAI システム依存を再考する時期となった。今年度は、現役 HPC システムとして活用できる範囲で、精度保証付き数値計算や混合精度数値計算を用いた高性能かつ高信頼な数値計算法の開発を目的とした。

### 2. 具体的な利用内容、計算方法

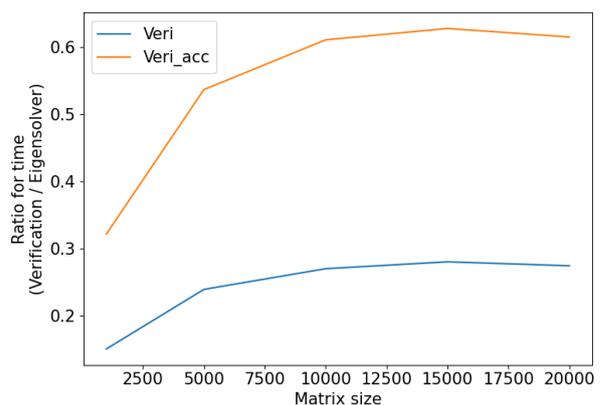
スーパーコンピュータ「HOKUSAI」上で、固有値問題に対する精度保証付き数値計算の実装と数値実験を行った。これまでに提案・実装されてきた精度保証付き数値計算法は、丸めモードの変更が必要なものが多かった。しかし、丸めモードの変更の可否は計算機やソフトウェアに依存するため、現代の多種多様な計算機環境で汎用的に扱うことは

難しい。実際に「HOKUSAI」での丸めモードの変更を用いた精度保証は失敗している。そこで、本課題では丸めモードの変更が必要ない精度保証付き数値計算の実装を行った。

さらに、従来通りチームで開発するソフトウェア群の機能整備を継続する目的で、固有値ソルバ EigenExa, タスクベースの BLAS ライブラリ Batched BLAS の動作確認作業にも HOKUSAI を利用した。

### 3. 結果

まず、実対称行列に対する標準固有値問題の精度保証法の数値実験結果を紹介する。本課題では丸めモードを変更しない 2 種類の精度保証付き数値計算法 (Veri と Veri\_acc) を実装し検証した。



上図では、(精度保証の計算時間)/(固有値の計算時間)を示している。計算時間の比は、Veri は 0.1~0.3、Veri\_acc は 0.3~0.6 程度で抑えられている。

$n$	$\delta$	$\delta_{acc}$
2000	6.21e-11	3.96e-14
4000	2.41e-10	7.73e-14
6000	5.39e-10	1.54e-13
8000	9.41e-10	1.54e-13
10000	1.47e-09	2.41e-13

次に計算された誤差上限を表記する。  $\delta$  は Veri の計算結果、  $\delta_{acc}$  は Veri<sub>acc</sub> の計算結果である。 Veri<sub>acc</sub> は計算コストが掛かるが、よりタイトな誤差上限を計算できる。一方、Veri は誤差上限が悪化するが計算時間が抑えられる。

次に、チーム開発物の動作検証作業についてまとめる。HOKUSAI を用いて、Intel 環境 (Skylake プロセッサ) でのソフトウェア動作環境を行い、2020 年 11 月に最新版の EigenExa、2021 年 2 月に Batched BLAS を公開した。

#### 4. まとめ

本年度は、1) 実対称行列に対する標準固有値問題の精度保証法、2) チーム開発物の Intel 環境での動作検証に HOKUSAI を有効活用した。とくに、1) では丸めモードの変更を無くすことで「HOKUSAI」上で実装の難しかった精度保証付き数値計算の実装を行った。また、全固有対の計算時間から、高速なものは 1.3 倍、高精度なものは 1.6 倍程度で精度保証が可能であることを示し、予備実験を外部発表することができた。

#### 5. 今後の計画・展望

今後は HOKUSAI 上で得られた結果をさらに発展させる。特に、一般化固有値問題や特異値問題、連立 1 次方程式の数値計算法の実装・評価を行い、高性能・高信頼数値計算環境の基盤を作成し、論文等々のアウトリーチ活動を積極化していく。同様に高度機能を有する数値計算ライブラリの検証も引き続き行う予定であるが、その中で HOKUSAI の役割は極めて重要でとなる。所属センターは「富岳」を有するが、AMR64 のアーキテクチャとは異なる最新コンピュータアーキテクチャ (Intel Xeon) として HOKUSAI を今後とも有効活用していく。

2020 年度 利用研究成果リスト

**【会議の予稿集】**

- 寺尾 剛史、尾崎 克久、荻田 武史、今村 俊幸、「最近点丸めのみを用いた実対称行列に対する標準固有値問題の精度保証法」、情報処理学会研究報告書、2020 (16), pp. 1-8.

**【口頭発表】**

- 寺尾 剛史、尾崎 克久、荻田 武史、今村 俊幸、「最近点丸めのみを用いた実対称行列に対する標準固有値問題の精度保証法」、第 177 回 HPC 研究発表会、2020/12/22、オンライン開催
- Takeshi Terao, “Verification Method for Eigenvalue Problems without Directed Rounding”, 12<sup>th</sup> JLESC workshop, Feb. 25, 2021, Online.