各種計算機基本性能調査

平成26度第3四半期

目次

1.はじめに

2.4倍精度演算による数値積分

2.1 倍精度演算と4倍精度演算

2.2 $\int_0^1 \frac{1}{xM^2+(1-x)\lambda^2}dx$計算

2.3 infra box 計算

3.性能評価プログラム

3.1 小規模連立一次方程式計算

3.2 小規模行列積計算

3.3 小規模QDR積計算

3.4 量子モンテカルロ法による物性スペクトル計算

1.はじめに

今四半期でのテーマは以下の3項目

(1) 構造解析などで,部分構造反復法では,すべて反復法で解くのではなく,精度の問題から一部の小さな行列を直接法で解くといった事がなされている。このため小さいサイズでの連立一次方程式及び反復法の性能を調査しています。

(2) ファインマン積分で赤外発散を扱う場合,数値積分では発散しない場合がありその対処法を検討する。二重指数関数型積分法はこの問題に対処するために40年以上前に考えられたものでHadamard積分の計算方法が検討されていました。また当時の計算機の制限により,多倍長演算が適用されていました。このため,これまでの測定結果のまとめと、その意味について考察しています。

(3) 量子モンテカルロ法の意味のある計算を248倍精度演算で行うと非常に時間がかかりました。このためアクセラレータの適用を検討するため、SR16000で実施したものを,アクセラレータで性能向上を行いました。

SR16000/M1 システムでは、並列化及びサブルーチンのインライン化のデバッグ,小さなサイズの連立一次方程式,反復法の性能比較用のデータ採取を行い,また赤外発散の問題解決にも使用しています。

アクセラレータは,E5-2670,Phi5110Pを中心に使用し,指数部が15ビット必要な問題の効果を出す方法の検討に使用しています。
多倍長計算,bsgamma計算はe5430,x5570を使用して行っています。

尚,他の問題にかんしては適宜最適と思われるGPGPUなどを使用しています。

2.4倍精度演算による数値積分

端点特異点を持つ被積 分関数の積分では

数値積分では，所要の精度の範囲内で 正しい

値が得られない場合が あります。

$$I=\int_0^1 \frac{1}{\sqrt{x}}dx=\lim_{\varepsilon->0} 2(1-\sqrt{\varepsilon})=2 \quad (I:\text{有限値})$$

$$I=\int_0^1 \frac{1}{x}dx=\lim_{\varepsilon->0} \log(\frac{1}{\varepsilon})=\log(\frac{1}{\varepsilon_0}) \quad (I=\infty)$$

変数変換区間 $[\varepsilon_0, 1-\varepsilon_0]$ 　発散が確認できませ ん。

$$I=\int_0^1 \frac{1}{x^2}dx=\lim_{\varepsilon->0} -1+\frac{1}{\varepsilon}=-1+\frac{1}{\varepsilon_0}$$

発散は確認でき ます。

2.1 倍精度演算と4倍精度演算

case1 $\int_0^1 \frac{1}{\sqrt{x}} dx = 2$

case2 $\int_0^1 \frac{1}{\sqrt{1-x}} dx = 2$

$h = 0.5^{10}$

誤差一覧

	case1	case2
倍精度	0.133×10^{-14}	0.885×10^{-15}
4倍精度 -1	0.411×10^{-31}	0.217×10^{-15}
4倍精度 -2	0.455×10^{-31}	0.831×10^{-24}

4倍精度 -1 $x = \exp(y)/(\exp(y) + \exp(-y))$

4倍精度 -2 $x = 1.0q0/(1.0q0 + \exp(-2.0q0 * y))$

精度の差はcase2の場合に出てきます。

積分変数変換区間$[\varepsilon_1, 1-\varepsilon_2]$
に対応するtの値を$[-a, b]\,(a, b > 0)$とする。

$$\int_0^1 \frac{1}{x(1-x)}dx = \pi(\sinh(a)+\sinh(b))$$

$\varepsilon_1 = 10^{-100}, h = 0.5^{16}$に固定.

倍精度

計算解 $= 0.26983125568872014 8D+03$

解析解 $= 0.26986328840490330 1D+03$

4倍精度 -1

計算解 $=\ \ 0.306598504184176 5Q+03$

解析解 $=\ \ 0.306582722324397 2Q+03$

4倍精度 - 2

計算解 $=\ \ 0.466232522456961 3Q+03$

解析解 $=\ \ 0.466232522447915 2Q+03$

変数変換区間の取り方により値が大きく異なりますので注意が必要です。

以下の場合は変数変換区間$[\varepsilon, 1-\varepsilon]$の場合で，$\displaystyle\int_0^1 \frac{1}{x}dx = \frac{1}{2}\int_0^1 \frac{1}{x(1-x)}dx$となり，計算機上では発散はしません。

$\displaystyle\int_0^1 \frac{1}{x(1-x)}dx$ **の積分結果**

二重指数関数型積分

$\varepsilon = 10^{-n}, h = 0.5^{16}$

n	tmax	積分値	
30	3.78125	実行結果	0.1377527175764281Q+03
		解析解	0.1377527175737553Q+03
40	4.06250	実行結果	0.1825335145091959Q+03
		解析解	0.1825335145056543Q+03
50	4.28125	実行結果	0.2271904668671839Q+03
		解析解	0.2271904668627759Q+03
60	4.46875	実行結果	0.2740603967483030Q+03
		解析解	0.2740603967429856Q+03
70	4.62500	実行結果	0.3204203634779741Q+03
		解析解	0.3204203634717572Q+03
80	4.75000	実行結果	0.3630915590459988Q+03
		解析解	0.3630915590389539Q+03
90	4.87500	実行結果	0.4114434511893274Q+03
		解析解	0.4114434511813443Q+03
100	5.00000	実行結果	0.4662325224569613Q+03
		解析解	0.4662325224479152Q+03

2.2 $\int_0^1 \frac{1}{xM^2+(1-x)\lambda^2}dx$計算

$\lambda = 10^{-n}$, 変数変換区間$[\varepsilon, 1-\varepsilon]$

$\varepsilon = 10^{-m}, h = 0.5^6, M = 100$

	m=10	
n	0.552620422318570964Q-02	相対誤差
20	0.462115217924113107Q-02	0.1638Q+00
30	0.552620415534452140Q-02	0.1228Q-07
	m=20	
n	0.101313744091738010Q-01	相対誤差
50	0.101313695101732989Q-01	0.4835Q-06

$\lambda = 10^{-n}$, 変数変換区間$[\varepsilon, 1-\varepsilon]$

$\varepsilon = 10^{-m}, h = 0.5^6, h = 0.5^7, h = 0.5^8$

$M = 100$

	m=30,n=100	
h	0.147365445951618924Q-01	相対誤差
0.01562500	0.147363377222335175Q-01	0.1404Q-04
0.00781250	0.147365446342540535Q-01	0.2653Q-08
0.00390625	0.147365445951618910Q-01	0.9649Q-16

10進10桁の相対誤差を得るには, ε を充分に小さく取るのと刻み幅hを充分に小さくする必要があります。

2.3 infra box計算

$$I = \int_0^1 \int_0^{1-x} \int_0^{1-x-y} \frac{1}{D^2} dzdydx$$

$$D = -sxy - tz(1-x-y-z) + (x+y)\lambda^2$$
$$+ (1-x-y)(1-x-y-z)m_e^{\ 2} + z(1-x-y)m_f^{\ 2}$$

$$s = -500^2, t = -150^2, m_f = 150, m_e = 0.5\times 10^{-3}$$

infra box

$\lambda = 10^{-15}$ **実行結果**

解析近似解	1.9278611224396412D−07
倍精度	

N	結果
1024	1.9115375286159712D−07
2048	1.9118621391363518D−07
4096	1.9124293394409909D−07
8192	1.9118217730236708D−07

N=1024

拡張倍精度	1.9278610942042685D−07

倍精度演算では物理的に意味のある計算は出来ない事を示しています。

infra box 4倍精度計算結果

$\boxed{\lambda = 10^{-30}}$

解析近似解	3.56173681291824538D-07	
分点数	value	ソース
1024	3.56107323854343038D-07	修正なし
4096	3.56152442514549826D-07	修正なし
1024	3.56173712303736817D-07	修正あり
1024	3.56173681720991588D-07	修正あり

ソース修正なし

分点数	value	精度
1024	3.56173440437069590D-07	ieee754-2008データ形式
1024	3.56173675238162110D-07	拡張倍精度*2の4倍精度
2048	3.56173681291800095D-07	拡張倍精度*2の4倍精度

SR16000の4倍精度の形式では,ソースの修正が絶対に必要となる事を示しています。

3. 性能評価プログラム

実アプリケーションで使用される行列計算は,
直接法ではサイズは数十,数百のサイズが
ほとんどで,大きくても2000以下と言えます。
この為,一般的なコーディングで,smp並列でどの
程度性能が出るかを見ています。また他機種
との比較のため,量子モンテカルロ法による物性
スペクトル計算の性能測定結果を記載しました。

3.1 小規模連立一次式計算

プログラム名称exnnmmで
nnは段数,mmは列数を示しています。
ex0101はオリジナルソースを示しています。
段数,列数の変更以外のチューニングは一切
実施していません。

連立一次方程式性能一覧表(GFLOPs)

SR16000 64smp

N	ex0101	ex0202	ex0404	ex0505	ex0808
1000	4.15	2.29	6.91	6.98	7.01
1200	9.15	10.71	9.74	9.72	9.74
1400	11.76	13.77	12.88	10.77	12.91
1600	14.53	17.31	15.21	16.52	16.31
1800	17.20	20.96	15.33	20.17	19.98
2000	19.93	25.68	23.56	24.01	23.77

SR16000 32core

N	ex0101	ex0202	ex0404	ex0505	ex0808
1000	9.29	9.93	9.34	9.91	9.56
1200	12.74	13.44	13.21	13.85	13.60
1400	15.90	17.43	17.40	18.02	17.88
1600	19.98	21.69	22.06	22.43	22.44
1800	23.63	25.86	26.98	27.03	27.38
2000	27.26	30.33	32.29	31.73	32.41

このサイズでは標準的なコーディングでは
実行効率5%を超えません。

3.2 小規模行列積計算

ソースはどの教科書にも掲載されている標準的なものでチューニングなしの自動並列で実行しています。

SR16000	行列積	実行時間			
	N=240	1000回実行			
精度	演算量	32core	64smp		
	(GFLOP)	(秒)	(秒)		
4倍精度	470	7.360	3.753		
6倍精度	1849	21.274	14.789		
8倍精度	3866	37.599	24.575		
10倍精度	8657	79.776	53.658		
	N=480	1000回実行			
精度	演算量	32core	64smp		
	(GFLOP)	(秒)	(秒)		
4倍精度	3760	55.214	29.658		
6倍精度	14789	164.514	119.144		
8倍精度	30928	289.634	196.611		
10倍精度	69265	605.880	436.391		

実行効率は10%前後です。

3.3 小規模QDR積計算

量子モンテカルロ法で用いたソース(N=100)からサイズのみ変更して実行しています。

SR16000 1ノード QDR積計算				
	N=240			
精度	演算量	32core	64smp	
	(GFLOP)	(秒)	(秒)	
6倍精度	2878	34.628	21.655	
8倍精度	5969	66.474	41.406	
10倍精度	13102	110.507	70.498	
	N=480			
精度	演算量	32core	64smp	
	(GFLOP)	(秒)	(秒)	
6倍精度	23026	259.771	172.937	
8倍精度	47755	499.358	331.659	
10倍精度	104823	842.099	573.847	

実行効率は15%前後です。

3.4　量子モンテカルロ法による物性スペクトル計算

SR16000 量子モンテカルロ法		
実行時間一覧表(秒)		
精度	32core	64smp
6倍精度	28.837	23.743
8倍精度	52.739	42.074
10倍精度	109.902	90.534
10倍精度ー2	648.738	713.924
(注)10倍精度ー2　に関しては		
scopeオプションで実行。		
inline化の効果	4倍	
if文削除の効果	4倍	
6,8倍精度	scope	
10倍精度	noscope	

**オプション及チューニングの知見が
E5-2670,Phi5110Pでの実行に
生かされています。**