

シンポジウム「ポスト富岳で拓くアプリケーションの未来」
(2025年3月25日)

次世代システムに向けた大規模地震シミュレーション研究 開発の取り組み

東京大学 地震研究所

藤田 航平

はじめに

- 地震分野
 - 個々のシミュレーションの計算コストが高く、不確実性も大きいため多数ケースのシミュレーションが必要
 - サイエンス側からも産業界側からも、まだまだ計算パワーが必要
- 新規アーキテクチャを有効活用することで計算性能（time-to-solution, energy-to-solution）の向上が期待される
 - 計算加速機構（小行列演算機構など）、各種メモリ階層、CPUとアクセラレータのheterogeneous computing
- 次世代計算基盤で想定されるアーキテクチャに向けて手法開発を実施してきた
 - アクセラレータにおける行列積・低精度演算加速機構の活用
 - CPU+アクセラレータによるheterogeneous architectureの活用
 - これらの例では、対象問題と計算機構の双方を踏まえてアルゴリズムを開発

次世代システムに向けた大規模地震シミュレーション研究開発の取り組みの例

- 陽的波動解析におけるINT8 Tensor Coreの活用
 - Tsuyoshi Ichimura, Kohei Fujita, Muneo Hori, Maddegedara Lalith: Low-ordered Orthogonal Voxel Finite Element with INT8 Tensor Cores for GPU-based Explicit Elastic Wave Propagation Analysis, *International Conference on Computational Science 2024*
- データ駆動型手法を用いた高速多数回波動場シミュレーション@CPUとGPUによるヘテロジニアス環境
 - Tsuyoshi Ichimura, Kohei Fujita, Muneo Hori, Maddegedara Lalith, Jack Wells, Alan Gray, Ian Karlin, John Linford: Heterogeneous computing in a strongly-connected CPU-GPU environment: fast multiple time-evolution equation-based modeling accelerated using data-driven approach, *Workshop on Accelerator Programming and Directives (WACCPD) 2024@SC24*

次世代システムに向けた大規模地震シミュレーション研究開発の取り組みの例

- **陽的波動解析におけるINT8 Tensor Coreの活用**

- Tsuyoshi Ichimura, Kohei Fujita, Muneo Hori, Maddegedara Lalith: Low-ordered Orthogonal Voxel Finite Element with INT8 Tensor Cores for GPU-based Explicit Elastic Wave Propagation Analysis, *International Conference on Computational Science 2024*

- **データ駆動型手法を用いた高速多数回波動場シミュレーション@CPUとGPUによるヘテロジニアス環境**

- Tsuyoshi Ichimura, Kohei Fujita, Muneo Hori, Maddegedara Lalith, Jack Wells, Alan Gray, Ian Karlin, John Linford: Heterogeneous computing in a strongly-connected CPU-GPU environment: fast multiple time-evolution equation-based modeling accelerated using data-driven approach, *Workshop on Accelerator Programming and Directives (WACCPD) 2024@SC24*

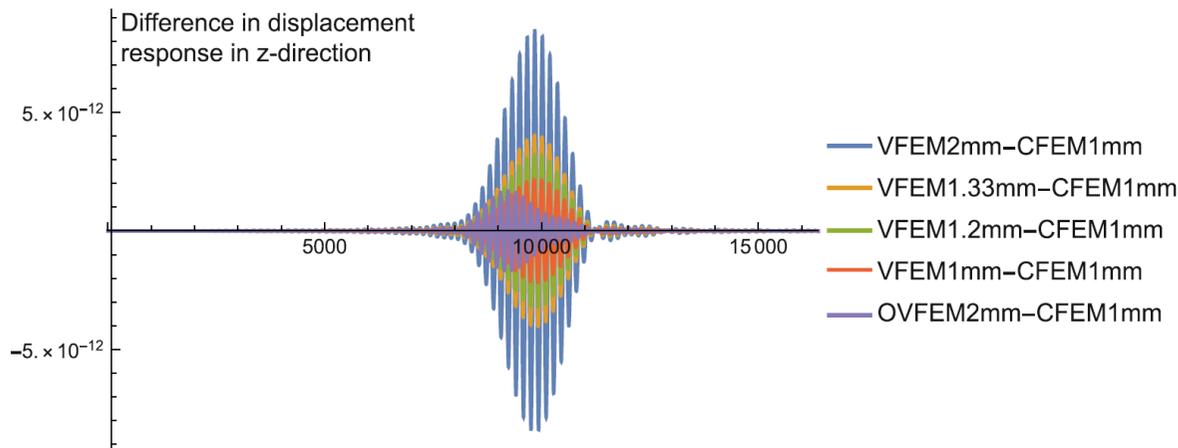
陽的波動解析におけるINT8 Tensor Coreの活用

- 対象問題：陽的波動場解析@ボクセル有限要素法
 - メッシュ作成が容易なため内部構造最適化などのシミュレーションで活用
 - 多数回シミュレーションが必要となるため、計算高速化が望まれる
- 低精度演算のシミュレーションへの活用
 - 精度が担保される陰解法シミュレーションにおける前処理などへの活用は進むものの、陽解法では精度の担保が難しく利用が限定的
- 本研究では
 - 陽解法内で低精度演算を用いた場合でもFP64相当の精度が担保されるようなアルゴリズムを開発し、INT8 Tensor Coreによりシミュレーションを加速
 - 併せて直交不連続基底に基づく有限要素により波動計算の精度を向上

直交不連続基底に基づくボクセル有限要素

- 波動場解析 ($\rho \ddot{\mathbf{u}} - (\nabla \cdot \mathbf{c} \cdot \nabla) \cdot \mathbf{u} = \mathbf{f}$) におけるボクセル有限要素法
 - 要素質量行列が対角ではないため、質量行列の対角近似 (集中質量化) が行われる

$$\mathbf{K} \mathbf{u}^{it} + \mathbf{M} (\mathbf{u}^{it+1} - 2\mathbf{u}^{it} + \mathbf{u}^{it-1}) / dt^2 = \mathbf{f}^{it}$$
 - 陽解法で計算可能となるが、数値分散につながる
- 直交不連続基底によるボクセル有限要素[1]を用いることで数値分散を抑え波動計算の精度向上を図る



計算波形の誤差 (参照解(CFEM1mm)との差)

	ds (mm)	dt (s)	Err
TCOVFEM	2.000	5.0×10^{-8}	0.03947
VFEM	2.000	5.0×10^{-8}	0.28057
VFEM	1.500	2.5×10^{-8}	0.09579
VFEM	1.333	2.5×10^{-8}	0.05743
VFEM	1.200	2.5×10^{-8}	0.03602
VFEM	1.091	2.5×10^{-8}	0.02343
VFEM	1.000	2.5×10^{-8}	0.01570
VFEM	0.500	1.25×10^{-8}	0.00104

直交不連続基底ボクセル有限要素(要素サイズ2 mm)を用いることで、要素サイズ1.2 mmの通常のボクセル有限要素と同等の精度を実現

[1] Ichimura, T., Hori, M., Wijerathne, M. L. L.: Linear finite elements with orthogonal discontinuous basis functions for explicit earthquake ground motion modeling, International Journal for Numerical Methods in Engineering, 86:286-300 (2011)

INT8 Tensor Coreによる疎行列ベクトル積計算

- 主要計算部となる疎行列ベクトル積 $\mathbf{K}_e \mathbf{u}_e$ の計算を、整数係数による行列とFP64によるベクトルの積に変換：

$$\bullet \mathbf{K}_e \mathbf{u}_e = \frac{\kappa ds}{256} \mathbf{K}_e^{int} \bar{\mathbf{u}}_e + \frac{ds}{3G} \mathbf{u}_e \quad [\text{赤太字は整数行列・ベクトル、黒太字はFP64行列・ベクトル}]$$

- $\bar{\mathbf{u}}_e$ を係数 $s \cdot a$ と M 個の整数ベクトルの組で表す ($\bar{\mathbf{u}}_e = s \sum_{i=1}^M a^{-i} \bar{\mathbf{u}}_{eint(i)}$) ことで、主要計算部 $\mathbf{K}_e^{int} \bar{\mathbf{u}}_e$ を以下のように整数行列・ベクトル積 $\mathbf{K}_e^{int} \bar{\mathbf{u}}_{eint(i)}$ に変換しINT8 Tensor Coreにより計算

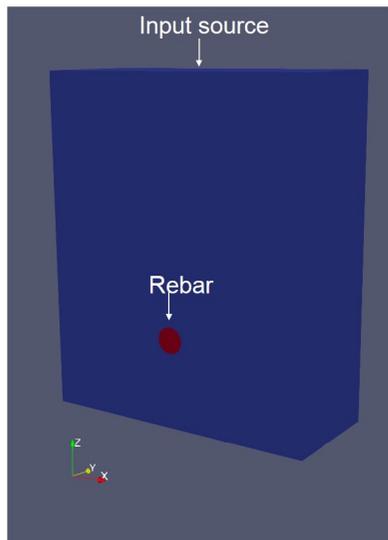
$$\bullet \mathbf{K}_e^{int} \bar{\mathbf{u}}_e = s \sum_{i=1}^M a^i \mathbf{K}_e^{int} \bar{\mathbf{u}}_{eint(i)}$$

- INT64を経てFP64変数をINT8に変換 ($\bar{\mathbf{u}}_e \rightarrow \bar{\mathbf{u}}_{eint64(i)} \rightarrow \bar{\mathbf{u}}_{eint8(i,j)}$)することでデータ変換コストを削減
- 疎行列ベクトル積の結果比較を通して、 $M = 8$ 段のINT8計算によりFP64相当の精度が得られることを確認

Computation type	Fraction bits	Value
FP128	112	507813.690592559616827867910192902549
FP64	52	507813.6905925632
FP32	23	507814.750
INT8 ($M = 4$)	28	507813.7802133318
INT8 ($M = 8$)	56	507813.6905925595

通常のボクセル有限要素法との性能比較

- 同等の波形計算精度を得るための性能を比較@A100 PCIe GPU
 - FP64精度相当を保ちつつ行列ベクトル積部において $43.3/9.62 = 4.5$ 倍、シミュレーション全体で3.4倍の高速化につながった
 - 直交不連続基底要素により要素サイズを大きくできることから、通常のボクセル有限要素法と比べて17倍の高速化につながった



	Computation type	ds (mm)	Elapsed time (s)	
			Time-step loop	Matrix-vector product
Orthogonal voxel FEM	OVFEM FP64	2.0	48.3	43.3 [2.1 TFLOPS]
	OVFEM FP32	2.0	18.9	15.5 [5.9 TFLOPS]
	TCOVFEM INT8 ($M = 8$)	2.0	14.2	9.62 [64.4 TOPS]
Standard voxel FEM	VFEM FP64	1.2	242.8	-

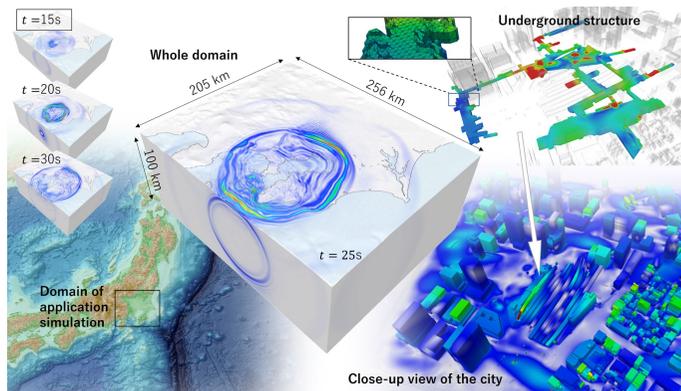
次世代システムに向けた大規模地震シミュレーション研究開発の取り組みの例

- 陽的波動解析におけるINT8 Tensor Coreの活用
 - Tsuyoshi Ichimura, Kohei Fujita, Muneo Hori, Maddegedara Lalith: Low-ordered Orthogonal Voxel Finite Element with INT8 Tensor Cores for GPU-based Explicit Elastic Wave Propagation Analysis, *International Conference on Computational Science 2024*
- **データ駆動型手法を用いた高速多数回波動場シミュレーション@CPUとGPUによるヘテロジニアス環境**
 - Tsuyoshi Ichimura, Kohei Fujita, Muneo Hori, Maddegedara Lalith, Jack Wells, Alan Gray, Ian Karlin, John Linford: Heterogeneous computing in a strongly-connected CPU-GPU environment: fast multiple time-evolution equation-based modeling accelerated using data-driven approach, *Workshop on Accelerator Programming and Directives (WACCPD) 2024@SC24*

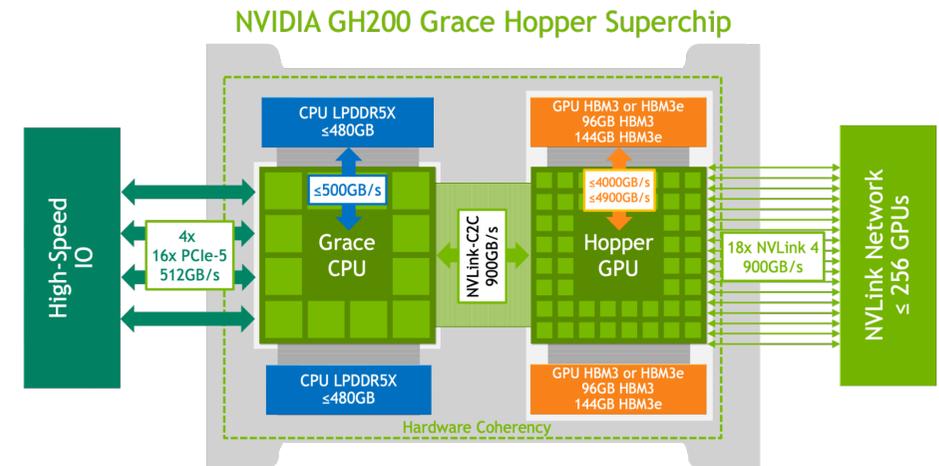
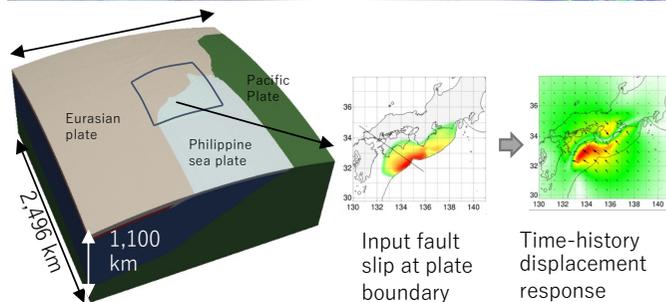
データ駆動型手法を用いた高速多数回波動場シミュレーション@CPUとGPUによるヘテロジニアス環境

- 本研究では、CPUとGPUを同時に活用することで多数ケースの時刻歴シミュレーションのtime-to-solutionとenergy-to-solutionの双方を削減する手法を開発
- データ駆動型手法を活用：
 - 時刻歴シミュレーションにおける過去の求解結果を用いることで、次タイムステップの初期解を推定
 - これにより反復法ソルバーの反復数を削減し、精度劣化なくシミュレーションを高速化

Seismic wave propagation



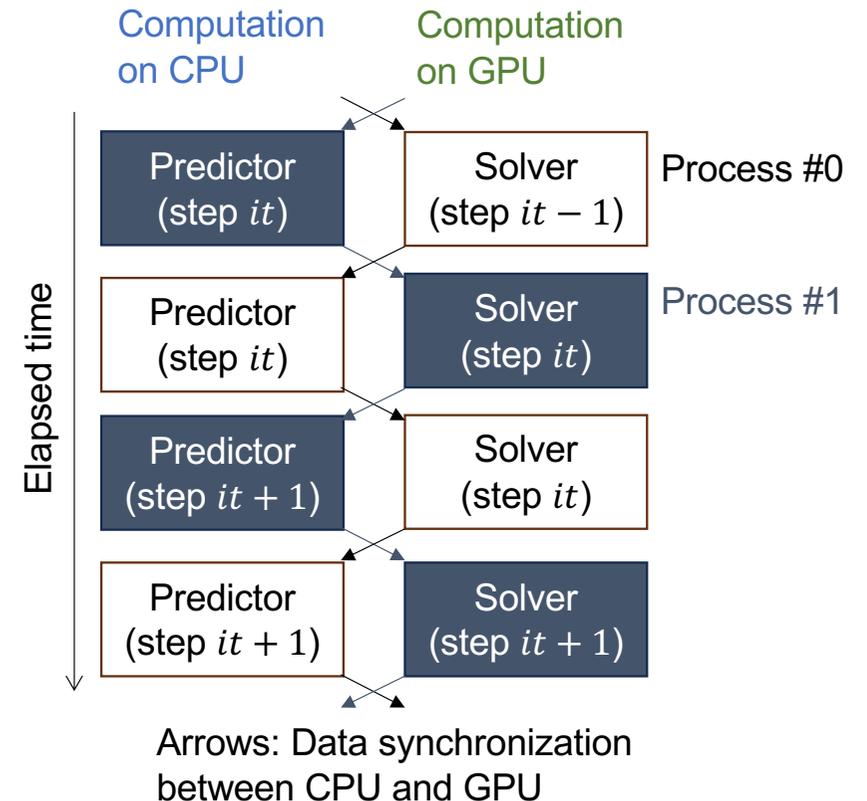
Crustal deformation



**Data-driven part on memory rich CPU,
Solver part on high-performance GPU,
with fast CPU-GPU synchronization** 10

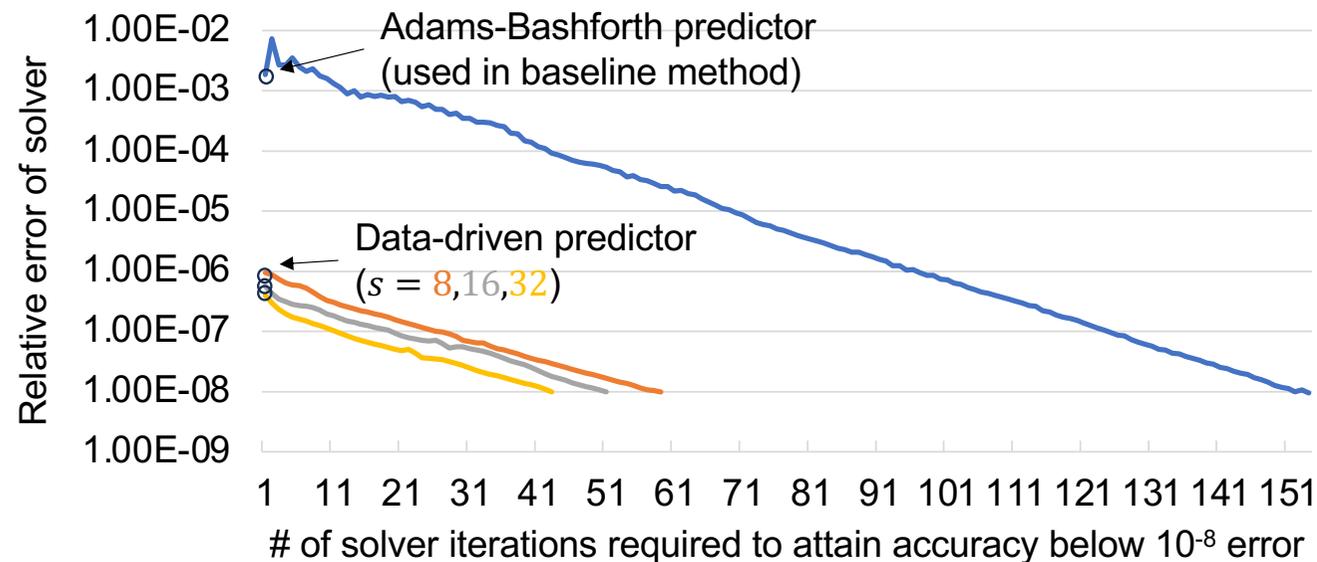
提案手法

- 多数ケースのシミュレーションを同時に実施
- Predictor@CPU：過去の求解データを活用することで、次のタイムステップの解を推定
- Solver@GPU：反復法ソルバーにより求解
- 高速な CPU-GPU インターコネクタにより predictor/solver 結果を高速に同期



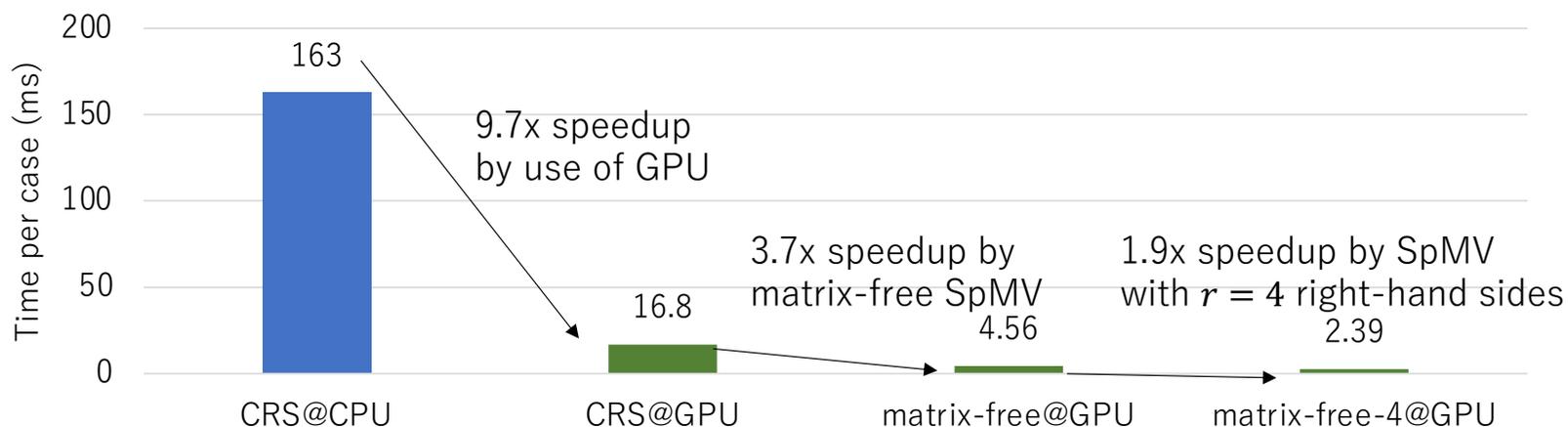
Predictor@CPU

- 過去の s 時間ステップのデータ $\mathbf{X}^{it} = \{\mathbf{x}^{it-s}, \mathbf{x}^{it-s+1}, \dots, \mathbf{x}^{it-1}\}$, $\mathbf{F}^{it} = \{f^{it-s}, f^{it-s+1}, \dots, f^{it-1}\}$ を用いることで、次のステップの解を $\bar{\mathbf{x}}^{it} = \text{predictor}(\mathbf{X}^{it}, \mathbf{F}^{it}, f^{it})$ と予測
- 初期解予測精度の向上により反復法ソルバーの反復数が削減される
- 多数ステップのデータはGPUメモリに格納できないため、大容量のCPUメモリを活用しCPUで計算



演算稠密化による計算速度向上

- 通常、疎行列ベクトル積を実施する際はメモリに全体行列を格納し疎行列ベクトル積の都度全体行列を読み出すタイプの計算が使われる
- マトリクスフリーの行列ベクトル積計算手法を使うことで、演算量は増えるもののメモリ転送量が減るためGPUにおいては高速化を実現
- マトリクスフリーの行列ベクトル積計算手法を使うことで生じた余分なメモリ容量を用いて多数ケースの計算を同時に計算することで演算をさらに稠密化・高速化

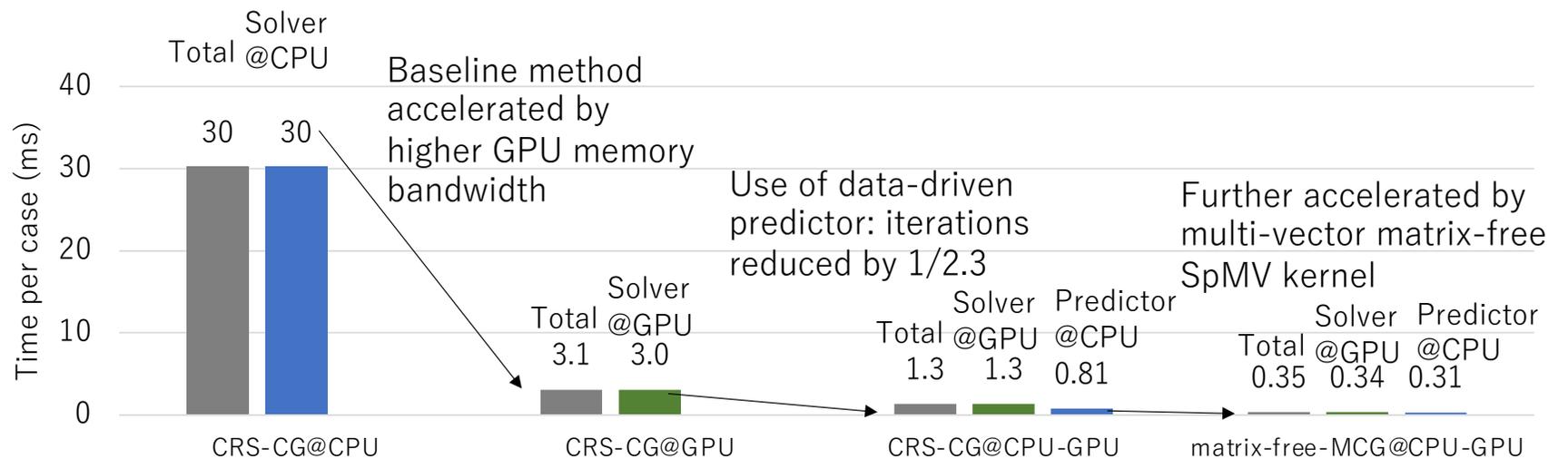


GH200での性能計測結果：
 CPU: 72-core Grace with 480 GB (384 GB/s) memory
 GPU: H100 (34 TFLOPS) with 96 GB (4000 GB/s) memory

Memory Bandwidth (% to peak)	0.21 TB/s (55%)	2.0 TB/s (51%)	0.58 TB/s (15%)	0.51 TB/s (13%)
TFLOPS (% to peak)	0.049 TFLOPS (1.4%)	0.47 TFLOPS (1.4%)	9.5 TFLOPS (28%)	18 TFLOPS (53%)

GH200における性能計測結果

- CPU・GPUの同時活用アルゴリズム + 演算稠密化により
 - CPUのみを用いた従来手法比で86倍の高速化・エネルギー使用量を1/32に削減
 - GPUのみを用いた従来手法比で8.7倍の高速化・エネルギー使用量を1/7に削減



Relative speedup	1.0	10	26	86
Relative energy usage	32	7.0	3.2	1.0

まとめ

- 次世代計算機のアーキテクチャを踏まえた地震シミュレーションの計算手法開発を実施
 - アクセラレータにおける行列積・低精度演算加速機構の活用
 - CPU+アクセラレータによるheterogeneous architectureの活用
- これらの検討を進めることで計算の高速化だけでなくエネルギー効率の向上にもつながると期待される

謝辞

- 本研究は文部科学省「次世代計算基盤に係る調査研究」事業、JSPS科学研究費助成事業（23H00213, 22K18823）、JST創発的研究支援事業（JPMJFR215Q）の支援を受けています