

格子 QCD 共通コードの超並列メニーコアクラスタ計算機への実装

Implementation of Lattice QCD common code to large scale parallel supercomputer with manycore architecture

根村英克

大阪大学核物理研究センター

1. 研究目的

格子 QCD 共通コードプロジェクトは、2008 年に発足した新学術領域研究「素核宇宙融合による計算科学に基づいた重層の物質構造の解明」の中の A04 班「分野横断的アルゴリズムと計算機シミュレーション」の一環として開始された。開発方針は、(a) 可読性: 初心者にも理解しやすいものであること、(b) 拡張性: 新しい機能の追加が容易であること、(c) 移植性: 様々なプラットフォームで動作すること、(d) 高性能: 実際の研究に利用できるだけのパフォーマンスを備えていること、である。これらを同時に実現することを目指し、オブジェクト指向に基づいて C++による開発を行っている。Bridge++と名付けたコードの最初の公開版を 2012 年 7 月にリリースし、最新版は 2020 年 3 月公開のバージョン 1.5.4 である [<http://bridge.kek.jp/Lattice-code/>]。

本プロジェクトの大きな柱のひとつは、共同利用可能な大型計算機を具体的なターゲットとして、その性能を引き出せるようにコード開発を継続し、本格的な研究への適用に向けて整備していくことである。従って、本学際共同利用プログラムへの申請は、(1) Oakforest-PACS 等のメニーコアを持つ大型計算機の性能を引き出すコードの開発により、格子 QCD 共通コードの有用性を高めること、(2) それに伴って、格子 QCD 共通コードのユーザー数を増やすこと(格子 QCD 計算を主としている研究者だけでなく原子核や宇宙など関連分野の研究者が格子 QCD 計算を理解するための教材的な役割も含める)、(3) 格子 QCD 計算の基礎はもとより、アルゴリズムや実践的チューニングのノウハウなどを公開された形で共有することにより、ひいては原子核や宇宙などの関連分野を含めた日本における基礎科学研究体制の層の拡大・充実に資することである。

2. 研究成果の内容

2020 年 3 月公開の最新版 ver.1.5.4 まで、2019 年度に 4 回のリリースを行った。2019 年 8 月の ver.1.5.1 より、OFP はターゲットプラットフォームの一つとなっている。2019 年度の成果報告としては、国際会議での講演 1 件とポスター発表 5 件、学会講演、チュートリアル、計算科学フォーラムの発表を各 1 件行った。

本年度には OFP での最適化を引き続き進め、公開版へ統合するための実装の改良と整理を進めた。これには Intel Xeon プロセッサでも有効な AVX-512 命令 intrinsic の利用や、手動プリフェッチ、データレイアウト最適化などの手法が含まれる。Cygnus のような GPU を搭載した計算機のために、線形方程式ソルバー等のボトルネックを、OpenACC を用いてオフロードする機能を開発している。Cygnus 上でフェルミオン演算子の性能測定を行いながら最適化を進めている。アルゴリズムの改良として、マルチグリッド法を用いて線形方程式解法を高速化する研究を進めた。これらの最適化コードを共通のフレームワークで統合し、アルゴリズムを統一的に適用するためのデザインの改良を行った。

Bridge++を使用した研究論文は今年度 8 編追加され、通算 45 編となった。これらの情報は、以下のページ [<https://www.bridge-hpc.org/dokuwiki/>] から参照できる。

3. 学際共同利用が果たした役割と意義

他分野と同様、格子 QCD 計算においても、様々なアーキテクチャの大規模並列計算機を活用している。我々が行っている格子 QCD 共通コード開発プロジェクトでは、ワークステーションから

スーパーコンピュータまで、幅広い環境で利用されることを想定している。様々な環境で動作確認を行い、十分なパフォーマンスを提供するために最適化を行うことが不可欠である。超並列型であり SIMD 演算機能を持つ Oakforest-PACS、メニーコア演算加速器として GPU を搭載した並列計算機 Cygnus は、それぞれ特徴のあるアーキテクチャとして、移植性を保ちながら実装する方法の整備と、性能測定及び最適化手法の確立において本質的な役割を果たした。また大規模計算を行える環境は本格的な格子 QCD 計算に貢献するために不可欠であった。今後も機能の充実、拡張性のあるデザイン開発を続けてゆくために重要な資源である。

4. 今後の展望

今後のエクサスケールでの計算機では、オーダー10,000 の超並列環境で効率よく動作するコードが不可欠である。稼働を開始した理研の富岳コンピュータは SIMD 機構など Oakforest-PACS と共通する特徴を持つため、両者で高速に動作し最小限の変更で対応可能なコード実装を実現したい。GPU のようなメニーコア演算加速部をもつヘテロジニアスな計算機に対しては、効率的なコード開発に加え、アルゴリズムの最適化という観点からも研究を進めてゆく予定である。

5. 成果発表

(1) 学術論文

(2) 学会発表

- [1] 青山龍美、「格子 QCD 計算への NEC SX-Aurora TSUBASA システムの適用」日本物理学会 2019 年秋季大会 (2019.09.17-20), 山形大学
- [2] 松古 栄夫、「Tutorial: Bridge++ による格子 QCD 計算の初歩」第1回数理と数値セミナー (2019.10.10), 高エネルギー加速器研究機構つくばキャンパス
- [3] H. Matsufuru, “Bridge++ for Fugaku”, Fugaku QCD coding workshop (2019.12.12-13), Riken-RCCS, Kobe.
- [4] Y. Namekawa, “Activity of Lattice QCD common code Bridge++ for manycore and GPU supercomputers” (poster), Fugaku QCD coding workshop (2019.12.12-13), Riken-RCCS, Kobe.
- [5] I. Kanamori, “Multigrid Solver with Bridge++ Code Set” (poster), Fugaku QCD coding workshop (2019.12.12-13), Riken-RCCS, Kobe.
- [6] Y. Namekawa, “Activity of Lattice QCD common code Bridge++ for manycore and GPU supercomputers” (poster), QUCS 2019 (2019.12.16-19), YITP, Kyoto Univ.
- [7] I. Kanamori, “Multigrid Solver with Bridge++ Code Set” (poster), QUCS 2019 (2019.12.16-19), YITP, Kyoto Univ.
- [8] H.Matsufuru, “Lattice QCD code Bridge++: preparation to Fugaku” (poster), The 2nd R-CCS International Symposium (2020.02.17-18), Nichii Gakkan Kobe Port Island Center and R-CCS, Kobe
- [9] 松古栄夫、「格子ゲージ理論ための汎用コード Bridge++ の開発」2019 年度第 2 回計算科学フォーラム (2020.02.27), 東京会場: 東京大学本郷キャンパス

(3) その他

使用計算機	使用計算機に○	配分リソース※	
		当初配分	追加配分
Cygnus	○	1000	0
Oakforest-PACS	○	16000	0
※配分リソースについてはノード時間積をご記入ください。			