

格子 QCD 共通コードの超並列メニーコア・GPU クラスタ計算機へ の実装

Implementation of Lattice QCD common code to large scale parallel supercomputer with manycore and GPU 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的物質構造の解明」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 **2021** 年 **6** 月公開のバージョン **1.6.1** 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

2021 年 **6** 月に最新版 **ver. 1.6.1** を公開した。**2019** 年 **8** 月の **ver. 1.5.1** より、Oakforest-PACS はターゲットプラットフォームの一つとなっている。**2021** 年度の成果報告としては、学術論文 **1** 編、国際会議での講演 **4** 件、学会講演 **1** 件、HPC-

Phys 勉強会の発表 1 件を行った。格子 QCD 計算において主要な計算時間を占めるフェルミオン(clover)演算子に対する線形方程式の解法部分として、multi-grid solver を Oakforest-PACS(Intel コンパイラ)および Cygnus(OpenACC)用に実装し、weak scaling 測定を行った。コードは特定のアーキテクチャによらない共通部分と各計算機専用部分からなる。コードの実装と性能測定一部については、国際会議(学会発表の[1,2,3,6])で報告を行った。

Bridge++ を使用した研究論文は今年度 10 編追加され、通算 63 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。それぞれのハードウェア構成に応じて行った 192 ノード(Oakforest-PACS)および 16 ノード(Cygnus)の(大規模)スケーリングテストは本格的な格子 QCD 計算への指針となり、大変意義深かった。

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。理研の富岳コンピュータおよび東京大学の Wisteria/BDEC-01 (Odyssey)は SIMD 機構など Oakforest-PACS と共通する特徴を持つため、これらの環境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

[1] I. Kanamori, K-I. Ishikawa, and H. Matsufuru, “Object-Oriented Implementation of Algebraic Multi-grid Solver for Lattice QCD on SIMD Architectures and GPU Clusters”, Lecture Notes in Computer Science, 12953, pp. 218 – 233 (2021) DOI:10.1007/978-3-030-86976-2_15

(2) 学会発表

- [1] K-I. Ishikawa, I. Kanamori, H. Matsufuru, “Multigrid Solver on Fugaku”, The 38th International Symposium on Lattice Field Theory, July 26-30 (2021), Zoom/Gather@MIT (Online).
- [2] Y. Akahoshi, S. Aoki, T. Aoyama, I. Kanamori, K. Kanaya, H. Matsufuru, Y. Namekawa, H. Nemura, and Y. Taniguchi, “General purpose lattice QCD code set Bridge++ 2.0 for high performance computing”, XXXII IUPAP Conference on Computational Physics, August 2-5 (2021), Coventry University, England (Online).
- [3] I. Kanamori, K-I. Ishikawa, and H. Matsufuru, “Object-Oriented Implementation of Algebraic Multi-grid Solver for Lattice QCD on SIMD Architectures and GPU Clusters”, The 21st International Conference on Computational Science and its Applications, September 13-16 (2021), University of Cagliari, Italy (Online).
- [4] 青山龍美、「Python から C++ ライブラリを呼び出す話」、第 13 回 High Performance Computing Physics (HPC-Phys) 勉強会、2021 年 11 月 25 日 (オンライン)
- [5] Y. Akahoshi, S. Aoki, T. Aoyama, I. Kanamori, K. Kanaya, H. Matsufuru, Y. Namekawa, H. Nemura, and Y. Taniguchi, “Lattice QCD code set Bridge++ 2.0 and its performance tuning on Fugaku”, R-CCS International Symposium 2022, February 7-8 (2022).
- [6] 赤星友太郎、青木慎也、青山龍美、金森逸作、金谷和至、松古栄夫、滑川裕介、根村英克、谷口裕介、「格子 QCD 共通コード Bridge++ 2.0」、日本物理学会第 77 回年次大会、2022 年 3 月 15-19 日、岡山大学・岡山理科大学 (オンライン)

(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	○	900	0
Oakforest-PACS	○	14400	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。			