格子 QCD 共通コードの
超並列 SIMD・GPU クラスタ計算機への実装

Implementation of Lattice QCD common code to large scale parallel supercomputer with SIMD 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 年より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」のプロジェクトのひとつとして開始された。そこで掲げられた目標は、(a)初心者にも使いやすく理解可能であるシンプルな構造を持つこと、(b)修正・追加が簡単にできること、(c)検証や管理が容易であること、(d)並列化や演算加速機などにも対応していること、(e)充分な計算スピード（効率）を持つこと、特に計算機固有の最適化も可能であること、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 2025 年 3 月公開のバージョン 2.0.3 である [https://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。本学際共同利用プログラムへの申請の目的は、(1)Wisteria-O 及び Cygnus、Pegasus の SIMD・GPU 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

2025 年 3 月に最新版 ver.2.0.3 を公開した。この最新版を含む ver.2.0.x では、cpp11 が利用可能な処理系を前提とし、アーキテクチャ固有の実装を含めるために代替コード(alt-code)ブランチを追加し、A64FX アーキテクチャ用に最適化され

たコードを含んでいる。alt-code は、任意のデータレイアウトを有効にし、double 型と float 型のデータ型をサポートしている。標準的な MPI に加えて富士通提供の MPI 用の Communicator を追加している。alt-code ブランチの一つとして、GPU を利用するコードを OpenACC によって実装したものは、近日公開予定である。またシェアードメモリの利用など、より詳細な最適化が可能な CUDA による実装も進行中である。2024 年度の成果報告としては、会議論文（査読付き）1 件、国際会議での口頭発表 2 件、学会での口頭発表 2 件、国内での研究会等での口頭発表 1 件、ポスター発表 2 件を行った。

Bridge++ を使用した研究論文は今年度 12 編追加され、通算 91 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．学際共同利用プログラム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。富岳をはじめとする A64FX アーキテクチャの SIMD 演算機能を持つ Wisteria-O、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、Pegasus 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、動作の検証において重要な役割を果たした。

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。Pegasus、Miyabi のような GPU を搭載した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する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

Wei-Lun Chen, Issaku Kanamori, Hideo Matsufuru, “Lattice QCD code on GPUs: Implementation and performance comparison with OpenACC and CUDA”, Proceedings of the International Conference on High Performance Computation in Asia-Pacific Region, pp. 80 – 89

DOI: 10.1145/3712031.3712327

(2) 学会発表

[1] Wei-Lun Chen, Issaku Kanamori, Hideo Matsufuru, “Lattice QCD code on GPUs: Implementation and performance comparison with OpenACC and CUDA”, HPC Asia 2025 February 19-21, 2025 in Hsinchu, Taiwan
[2] Wei-Lun Chen, 金森逸作, 松古栄夫, 「GPU implementation of multigrid solver for domain wall fermion」, 日本物理学会　第 79 回年次大会(2024 年)　北海道大学（札幌キャンパス）　2024 年 9 月 16-19 日
[3] 青山龍美，金森逸作，金谷和至，松古栄夫，滑川裕介，根村英克，似鳥啓吾（Bridge++ project）「汎用格子 QCD コード Bridge++の GPU 版について」，日本物理学会 2025 年春季大会 2025 年 3 月 18-21 日　オンライン

(3) その他

[1]　Issaku Kanamori, “Multigrid Solvers in Bridge++”, German Japanese Workshop 2024, Johannes Gutenberg University Mainz, Germany, September 25-27, 2024
[2] 金森逸作, 「ドメインウォールフェルミオンの固有値分布について」, 離散的手法による場と時空のダイナミクス 2024, 東京工業大学大岡山キャンパス, 2024 年 9 月 2-5 日
[3] Issaku Kanamori, Wei-Lun Chen, Hideo Matsufuru, “Spectrum of preconditioned Moebius domain-wall operators” , The 41st Lattice Conference (Lattice　2024), University of Liverpool, UK, July 28 – August 3, 2024 (poster presentation).
[4] Issaku Kanamori, Tatsumi Aoyama, Kazuyuki Kanaya, Hideo Matsufuru, Yusuke Namekawa, Hidekatsu Nemura, Keigo Nitadori, “GPU Implementation of Lattice QCD code with OpenACC” , The 7th R-CCS International Symposium, Kobe, Japan, January 23 - 24, 2025 (poster presentation).

使用計算機	使用計算機に○	配分リソース※		
		当初配分	移行*	追加配分
Cygnus	○	720		
Pegasus	○	900		
Wisteria/BDEC-01	○	17920		
	※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。 ＊バジェット移行を行った場合、「+2000」「-1000」のように記入			