

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、追加が簡単に出来ること。(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) 十分な計算スピード(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。この格子 QCD 共通コードは、2012 年 7 月に最初の公開版が発表された。最新版は、2019 年 3 月に公開されたバージョン 1.5.0 である。

本共通コード開発プロジェクトの活動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の開発を継続し、今後の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 のメニーコアを持つ大型計算機の性能を引き出すようなコードの開発を行うことにより、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 計算に関連する基礎はもとより、さらに実践的な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

2019 年 3 月に ver.1.5.0 を公開した。この最新版では、ユーザーからの意見を参考にしてディレクトリの構成を変更した。また、活動開始以来、国際会議等で講演発表を行い、会議報告書を発表している。2018 年度では、1 つの国際会議で講演発表を行い、その会議報告書を発表した。さらに、公開されている最新版にはまだ組み込まれていないが、AVX-512 命令、手動プリフェッチ、データレイアウト最適化を導入した。OFP で測定した具体的な実行性能は、単精度 Wilson 型フェルミオン演算子の乗算では 404 GFlops (OFP 1 node: 4 MPI procs/node、2x16 threads/core)、32 node までの weak scaling では 220 GFlops/node 程度の性能が出ている。より詳細な情報は、成果発表の学術論文に記載されている。

なお、共通コードを使用した研究論文が、今年度新たに 5 編追加された。通算 37 編の論文が共通コードを元に発表されている。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. 学際共同利用として実施した意義

他分野で盛んに行われているように、格子 QCD 計算においても、さまざまなアーキテクチャを備えた大規模並列計算機を活用する例が増えてきている。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、スーパーコンピュータからワークステーションまで、幅広い環境で利用されることを想定している。更にこれら様々な環境で、ある程度のパフォーマンスを提供することを目的として開発を行っている。様々なアーキテクチャによる超並列大型計算機である Oakforest-PACS, COMA それぞれの上で具体的な動作検証ができ、格子 QCD の本格計算に貢献できた。

メニーコア・アーキテクチャへの対応だけでなく、Oakforest-PACS のような SIMD 機構を持つプロセッサに対する最適化についても、できるだけ移植性を保ちながら実装する方法確立することができ、今後多くのコードに適用していくための基盤が得られた。

4. 今後の展望

今後のペタスケールからエクサスケールへと期待される計算機は、オーダー10,000を超えるメニーコアの環境になっていくと考えられる。本申請課題によるメニーコア計算機向けコード開発をさらに押し進め、エクサスケール時代でも十分適用可能なコードを目指す。GPU のようなメニーコアによる演算加速器を持つ、ヘテロジニアスなアーキテクチャへの対応も進める予定である。

5. 成果発表

(1) 学術論文

[1] I. Kanamori and H. Matsufuru, "Practical Implementation of Lattice QCD Simulation on SIMD Machines with Intel AVX-512", arXiv:1811.00893, LNCS 10962 (2018) 456-471.

(2) 学会発表

[1] I. Kanamori, "Practical Implementation of Lattice QCD Simulation on SIMD Machines with Intel AVX-512", the Workshop on Large Scale Computational Physics in "The 18th International Conference on Computational Science and its Applications", July 2-5, 2018 Melbourne.

[2] 金森逸作, "Intel KNL を使ってみて: 格子 QCD での例"、High Performance Computing Physics (HPC-Phys) 勉強会、2018 年 1 月 21 日 (土)、理化学研究所、和光市

[3] 石川健一、金森逸作、松古栄夫, "共通コード Bridge++ を用いた格子 QCD 用代数的なマルチグリッドソルバーの実装"、日本物理学会秋季大会、2018 年 9 月 14-17 日、信州大学

松本キャンパス、松本市

[4] 石川健一、金森逸作、松古栄夫、” 共通コード Bridge++を用いた格子 QCD 用領域分割型マルチグリッドソルバーの実装”、日本物理学会第74回年次大会、2019年3月14-17日、九州大学伊都キャンパス、福岡市

(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
COMA	○	1600	0
Oakforest-PACS	○	20000	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。			