

課題名(タイトル):

ポスト「京」時代に向けた格子 QCD アプリケーションの最適化と性能評価

利用者氏名:○中村宜文

理研における所属研究室名:計算科学研究センター フラッグシップ2020プロジェクト アプリケーション開発チーム

1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

本研究は、ポスト「京」時代に利用可能な汎用スーパーコンピュータ上で格子 QCD アプリケーションが高効率に動作するため必要な要素技術と、最適化手法を明らかにすることを目的とする。格子 QCD アプリケーションは、ポスト「京」の重点アプリケーションに選ばれており、ポスト「京」時代においても、基礎物理学分野におけるその重要度は極めて高い。ポスト「京」時代に、現在の格子 QCD アプリケーションが高効率動作することは困難であると考えられており、これを克服するための要素技術と最適化手法の開発が求められている。また、高性能計算技術は日々進歩しており、最新のスーパーコンピュータなくして本研究を遂行することは不可能である。

2. 具体的な利用内容、計算方法

格子 QCD は 4 次元時空を規則格子に分割し、格子点と格子点を繋ぐ辺上に物理自由度をおいて量子色力学 (QCD) の基礎方程式を評価する。格子 QCD で最も時間が費やされる部分はクォーク伝搬関数を解くところで、これはグルーオン背景場に依存するディラック方程式を 4 次元格子上で離散化した大規模連立方程式を解くことに相当する。これを QCD クォークソルバーと呼ぶ。離散化手法は幾つか存在するが最もよく使われるウィルソン型の離散化では大規模連立方程式の係数行列は規則格子に基づく大規模ステンシル疎行列となる。クォーク伝搬関数を解くための大規模連立方程式は反復法で解かれる。格子点上には未知数としてクォーク場に相当する 24 実数、格子辺上にはグルーオン場に相当する 18 実数が配置されており、係数行列は 1 階差分型のステンシルの構造を持ちメモリバンド幅律速となっている。メモリ容量としては比較的少ないものとなっている。

ポスト「京」時代には、512Bit の SIMD 幅が主流になり、メモリバンド幅は現在より狭くなると予想される。したがって、ポスト「京」時代のスーパーコンピュー

タに置いて格子 QCD アプリケーションは高効率に実行するためには、512bit の SIMD 幅を有効に使い、メモリアクセスを減らす工夫が必要であると考えられる。BW-MPC の CPU は skylake であり、AVX512 と呼ばれる 512bit 幅のベクター演算命令セットがある。このため、ポスト「京」時代のスーパーコンピュータ向けのアプリケーション開発に最適と言える。

本研究課題では、主に BW-MPC において、ポスト「京」向け格子 QCD アプリケーション用ライブラリ QWS の最適化と性能評価を行う。QWS はフラッグシップ 2020 プロジェクトの重点課題 9 アプリワーキンググループで開発されているものである。本年度は特に半精度浮動小数点の利用可能性について調べた。

3. 結果

QWS に半精度浮動小数点の Schwarz Alternating Procedure を、単精度の BiCGStab の前処理として実装した。さらに、この単精度の BiCGStab は倍精度 BiCGStab の前処理である。半精度浮動小数点の IEEE-754-based half-precision floating point library (half-1.12.0)を用いて疑似的に行った。この実装は、広島大学の石川氏によって行われた。

テスト配位として 32^4 格子の 2000 トラジェクトリ生成し、これを用いて、異なるクォーク質量 5 点で、クォークソルバーのテストを行った。対応するパイ中間子の質量は、約 1.1 GeV、0.9 GeV、0.65 GeV、0.30 GeV、0.10 GeV である。5 点すべてにおいて半精度の SAP 前処理をもちいても収束した。また、半精度 SAP 前処理を用いると反復回数は 2 割程度増加した。

4. まとめ

半精度 SAP 前処理を用いると反復回数が増加するがクォーク質量が小さくてもクォークソルバーが収束することが分かった。

5. 今後の計画・展望

引き続き、クォークソルバーの最適化を進める予定である。半精度 SAP 前処理については、ポスト「京」実機を用いてその効果を調べる。