

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

理研での所属研究室名 : 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置いて量子色力学 (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 BW-MPC において、格子 QCD アプリケーションの一つである「BQCD」のクォークソルバー区間の性能を評価する。

3. 結果

BW-MPC において、16 ノード、32MPI プロセス、ノード当たりの MPI プロセス数が 2、MPI プロセスあたりのスレッド数が 2 で、 $20 \times 20 \times 20 \times 12$ 格子サイズの有限温度 QCD のプロダクションランを走行させた。プロセスあたりの格子サイズは、 $20 \times 5 \times 5 \times 6$ である。その結果、全体の 92% の時間が、クォークソルバーの時間であった。したがって、クォークソルバーを十分最適化すれば、アプリケーション全体が十分最適化されることがわかった。クォークソルバーの経過時間では、75% がクォーク行列にベクトルの積のステンシル計算にかかる時間、12% が大域的縮約計算の時間、残りの 13% が線形代数計算の時間であることがわかった。また、ステンシル計算の時間の 2/3 が袖領域の通信時間であることがわかった。格子サイズが $24 \times 24 \times 24 \times 12$ の時もほぼ同じ時間の比率であった。格子サイズが $24 \times 24 \times 24 \times 12$ の時の実行効率は格子サイズが $20 \times 20 \times 20 \times 12$ の時よりも 20% 高いことがわかった。

4. まとめ

BW-MPC システムにおいて、格子 QCD のプロダクションの時間内訳を調べた。全体の計算時間に対して 9 割以上の時間がクォークソルバーの計算時間であること、クォークソルバーの計算では 7 割以上がクォーク行列ベクトル積の計算時間であること、袖領域の通信時間が非常に長いことがわかった。

5. 今後の計画・展望

クォーク行列ベクトル積の最適化、特に袖領域通信の最適化を行う。この区間は全体の実行時間に占める割合が大きいため、アプリケーションを効率化するうえでの効果が大きいと期待できる。