

プロジェクト名(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 運用技術部門 ソフトウェア開発技術ユニット

## 1. 本プロジェクトの研究の背景、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、格子边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。

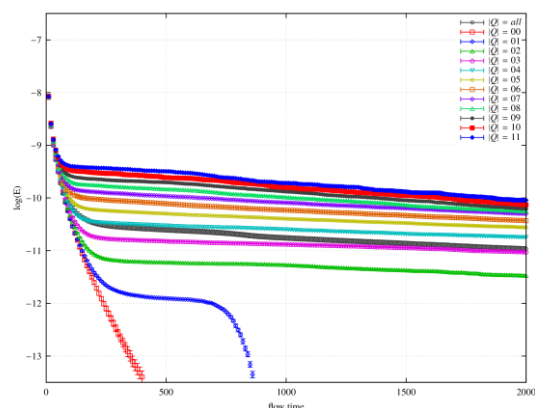
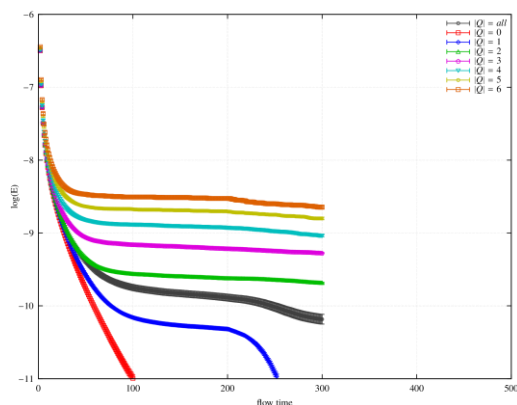
ポスト「京」時代には、512Bit の SIMD 幅が主流になり、メモリバンド幅は現在より狭くなると予想される。

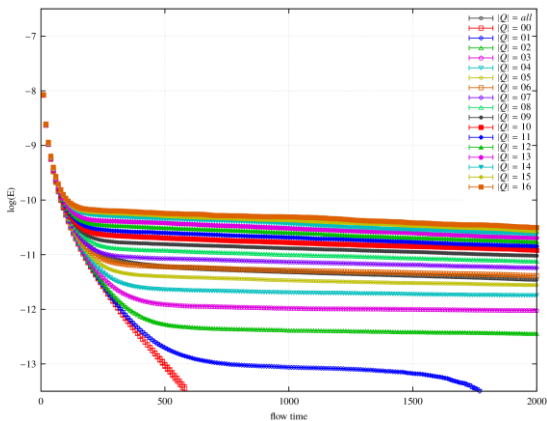
したがって、ポスト「京」時代のスーパーコンピュータに置いて格子 QCD アプリケーションは高効率に実行するためには、512bit の SIMD 幅を有効に使い、メモリアccessを減らす工夫が必要であると考えられる。BW-MPC の CPU は skylake であり、AVX512 と呼ばれる 512bit 幅のベクター演算命令セットがある。このため、ポスト「京」時代のスーパーコンピュータ向けのアプリケーション開発に最適と言える。

本年度は、グラディエントフローと呼ばれる一種の拡散方程式によってゲージ場を変形していく手法を用いて、トポロジカルチャージと呼ばれる位相不変量を計算し、トポロジカルチャージごとに結合定数を算出する手法をテストした。格子サイズ  $16^4$ ,  $24^4$ ,  $32^4$  で、逆結合定数  $\beta=6.0$  である。

## 3. 結果

下図は、エネルギーをグラディエントフローのフロー時間に対して、トポロジカルチャージ毎にプロットした図である。上から格子サイズ  $16^4$ ,  $24^4$ ,  $32^4$  での結果である。





トポロジカルチャージ毎に、エネルギーレベルが分離していることがわかる。格子サイズが大きくなると、トポロジカルチャージ毎にエネルギーレベルが分離して一定になるまでの時間が長くなることが分かった。エネルギーが一定になるフロー時間は、一般的なグラディエントフローを用いて物理諸量を計算するときのフロー時間より、5倍から10倍程度大きい。

#### 4. まとめ

今日、広く使われるようになった格子 QCD のグラディエントフロー計算について、ポスト京と同じ SIMD 長をもつ BW-MPC つかって調べた。

グラディエントフロー計算を用いて、ポロジカルチャージ毎にエネルギーレベルが分離して一定になるまでのフロー時間はながく、大きな計算コストがかかることが分かった。格子 QCD の配位生成の計算では、クォーク行列の逆行列計算が大きな計算時間を占めるため、クォーク行列に係る計算アルゴリズムの最適化に力をいれるため、ゲージ場の微分に係る箇所の最適化は実施されないことが多い。しかし、グラディエントフロー計算は、このゲージ場の微分計算が計算時間の大部分を占めるため、ゲージ場の微分計算の最適化は重要である。

#### 5. 今後の計画・展望

前年度まで、グラディエントフロー計算ないのゲージ場の更新計算の最適化方法はわかっており、その方法を用いて従来の 6 倍の性能が得られることが分かっているが、グラディエントフローのゲージ場の更新計算以外の区間の最適化、演算と通信のオーバーラップによる通信オーバーヘッドを減らす最適化は残された

2021 年度 利用研究成果リスト

【その他(著書、プレスリリースなど)】

“The strong CP problem solved by itself due to long-distance vacuum effects”, Y. Nakamura, G. Schierholz,  
arXiv:2106.11369