

HPC-Phys 勉強会・*Bridge++* について報告

金森 逸作 (広島大学)

「京からポスト京に向けて」シンポジウム
筑波大学東京キャンパス, 2019年1月10日

はじめに

格子 QCD で使うプログラム

- 格子 QCD での計算: 配位生成 + 物理量測定
- (配位生成プログラム: 略)
- 物理量測定プログラム: 各人/グループ毎に様々
既存のコードセットに手を加えて使うことも多い
石川コード, Grid, Chroma, Bridge++,...

ポスト京で走らせるコード

- コデザインチーム謹製コード: 全てはカバーできない
- 手持ちのコードをチューニング: いつ、どこで、誰が
- どこでもそこそこ使えるコードを使う

個人でのコード開発: 大変

- コード開発に関する情報交換 ⇒ HPC-Phys 勉強会

QCD 共通コード Bridge++

プロジェクトメンバー: 青木慎也、青山龍美、金森逸作、金谷和至、松古栄夫、宮本貴也、滑川裕介、根村英克、谷口裕介 (ほか contributor 多数)



- 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」(2008–2012) 時にスタート
- C++ object oriented, MPI + OpenMP
- 方針: 読みやすく、拡張しやすく、どこでも動いて、そこそこのパフォーマンス 場の定義に構造 (color, spin etc.) がほとんどはっていない
⇒QCD 以外にも拡張が容易
- 現在 version 1.4.4 (近日中に version 1.5)

拡張版

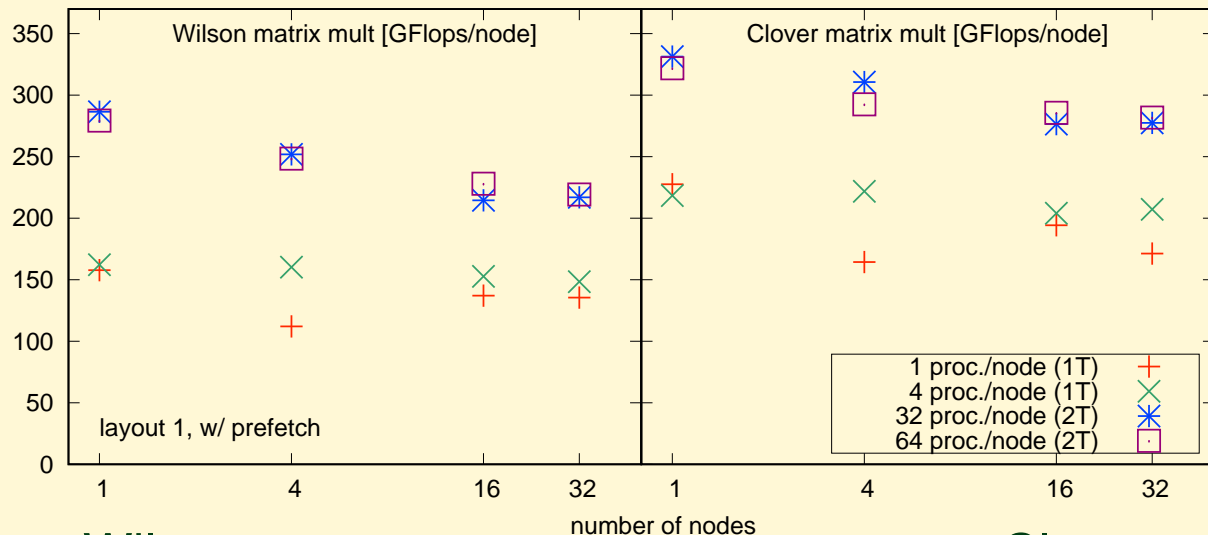
- データ構造を柔軟に: GPU 機, SIMD 機 計算機毎に最適化の余地あり
- 低レベル部分 (= 計算機依存最適化) は容易に差し替え可
- 期待: 今のうちに手元の環境でコードを用意しておけば、ポスト京ですぐにそれなりのパフォーマンスで実行可能になるはず

そこそこのパフォーマンス: Dirac 演算子と線形ソルバー

グラフ: I.K. and H.Matsufuru ICCSA2018 (doi:10.1007/978-3-319-95168-3_31) より

Oarkforest-PACS の場合: Intel Xeon Phi KNL

$32^3 \times 16$ latt./node, single prec.



Mult : GFlops/node

Wilson: $\gtrsim 220$ (3.7%)

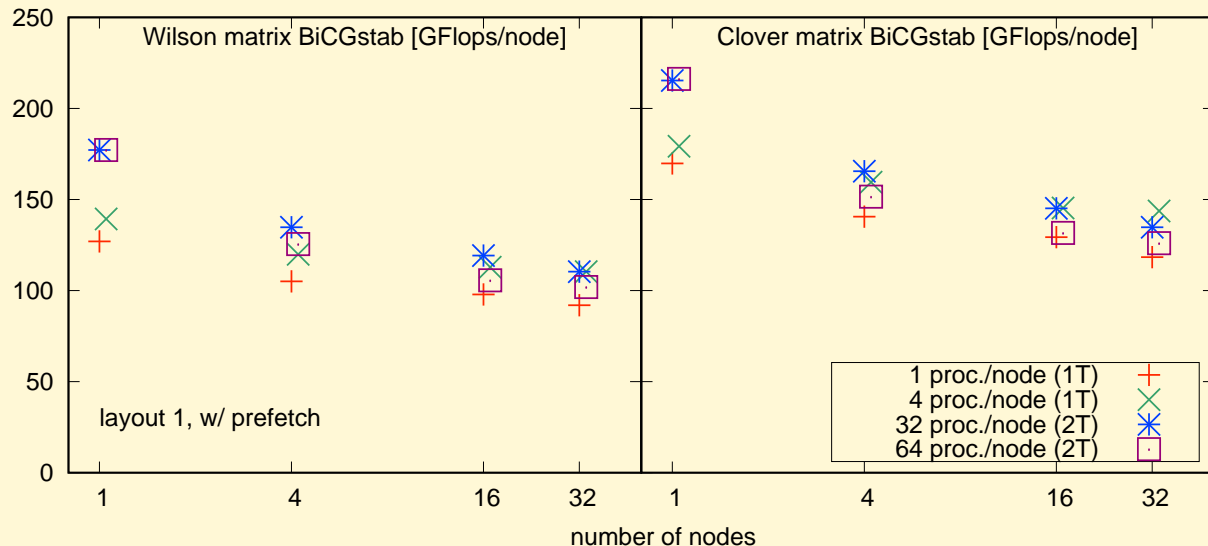
Clover: $\gtrsim 280$ (4.7%)

roofline from MCDRAM BW

Wilson:424, Clover:506

Wilson

Clover



Solver : GFlops/node

Wilson: $\gtrsim 110$ (1.8%)

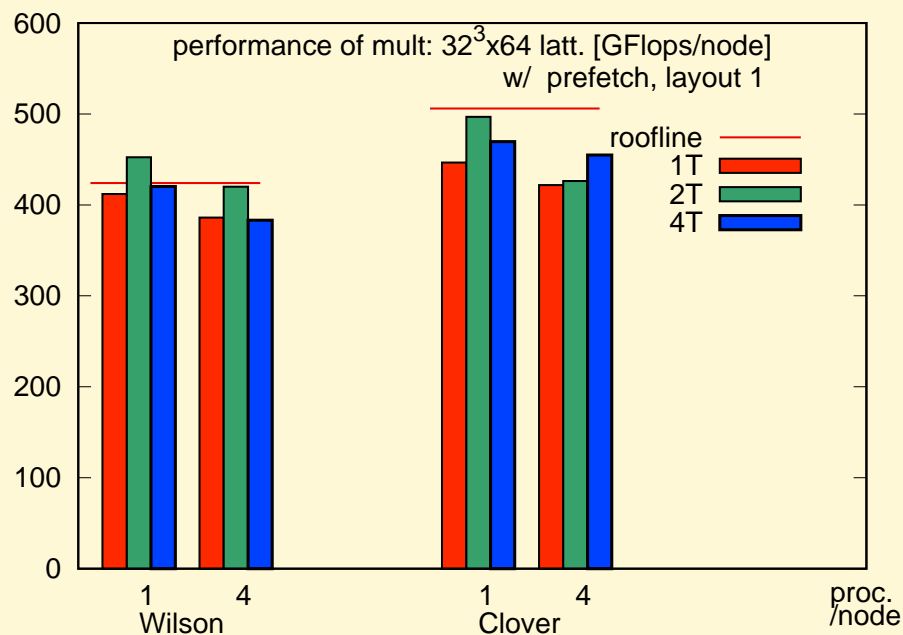
Clover: $\gtrsim 140$ (2.3%)

linear algebra requires
more BW

OFP 1 ノードだと、、、

通信は最小限、ローカル体積大（どこまで速くできるか）

※ ソルバー, mult 以外は目下取り組み中（=もっともっと遅い）です



Wilson mult ~ 450 GFlops (7.5%)

Clover mult ~ 500 GFlops (8.3%)

さらに高速化するには、データ再利用の工夫が必要

cf. Grid v0.7.0: 1 node で Wilson mult が 340 GFlops

(multiple r.h.s. だと 960 GFlops 出るらしい)

HPC-Phys 勉強会

昨年の6月に企画を立ち上げました: ポスト京重点課題9とJICFuSで主

前回のシンポジウム(2017/12)の際に一部の方に相談したものです

世話人: 青山龍美、大川博督、加堂大輔、金森逸作、土井琢身

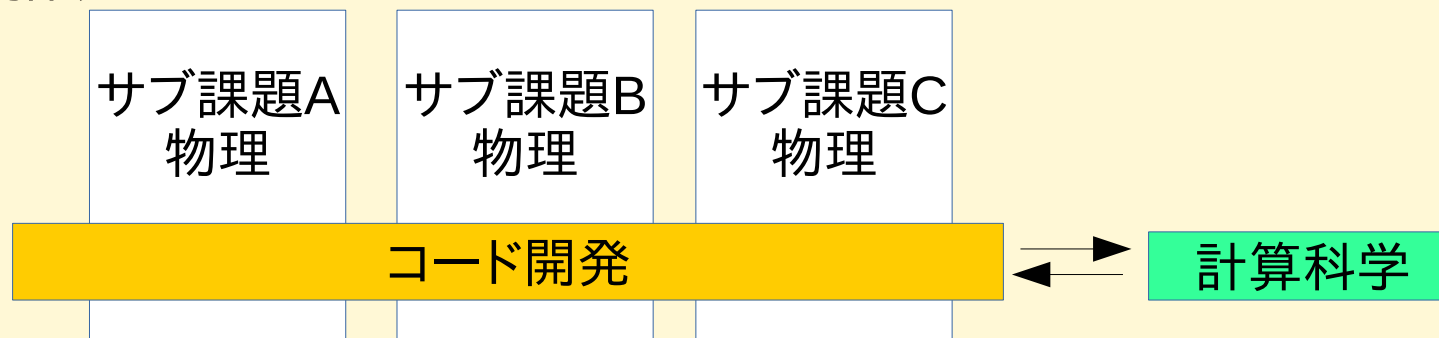
アドバイザー: 青木慎也、石川健一、住吉光介、永井智哉、松古栄夫

あいおうえお順、敬称略

website: <http://hpc-phys.kek.jp/>

メーリングリスト: 参加は金森まで

- コード開発を横軸とした分野横断型の交流
実際にプログラムを書く物理研究者同士 + 計算科学の専門家の情報交換を目指す



重点課題内・外での情報交換

勉強会プログラムから

可視化の話など単にコード開発以上の話題も取り込んでいます

第 1 回 8/22, 京大基研, 参加 27 名

- 金森逸作: 趣旨説明、現在/近い将来使えるリソースのまとめ、アンケートの結果
- 中尾昌広: XcalableMP 入門
- 住吉光介: ボルツマン方程式による超新星のシミュレーション計算
- 松古栄夫: OpenACC で簡単 GPU 並列化— 格子 QCD と球対称超新星シミュレーションを例として
- 坂井涼: テンソル繰り込み群

第 2 回 12/1, 理研和光, 参加 29 名

- GPU チュートリアル: OpenACC 篇 (松古栄夫), CUDA 篇 (青山龍美)
- 石川健一: CUDA を用いた Pure SU(3) gauge theory のための Twisted Gradient Flow 計算の加速
- 滝脇知也: 最近の粒子, 流体の可視化事情
- 金森逸作: Intel KNL を使ってみて: 格子 QCD での例
- 清水則孝: 大規模並列計算用原子核殻模型コードの開発

第 3 回 3/18 (物理学会@九大の直後), 広島大学で予定

まとめ

- コード開発も動いています
格子 QCD での Bridge++ の活動を報告... 使ってみませんか
- コードも書ってる研究者の情報交換
HPC-Phys 勉強会、はじめました



(勉強会の様子: http://www.jicfus.jp/jp/rep_hpc-phys01/,
http://www.jicfus.jp/jp/rep_hpc-phys02/ より)