

# A04 分野横断アルゴリズムと計算機シミュレーション

## 目標と2009年度の活動

<http://bridge.kek.jp/A04/>

松古栄夫 (Hideo Matsufuru)



高エネルギー加速器研究機構 計算科学センター

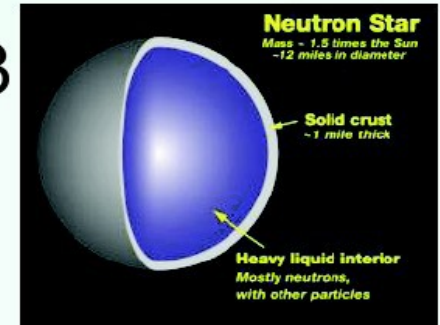
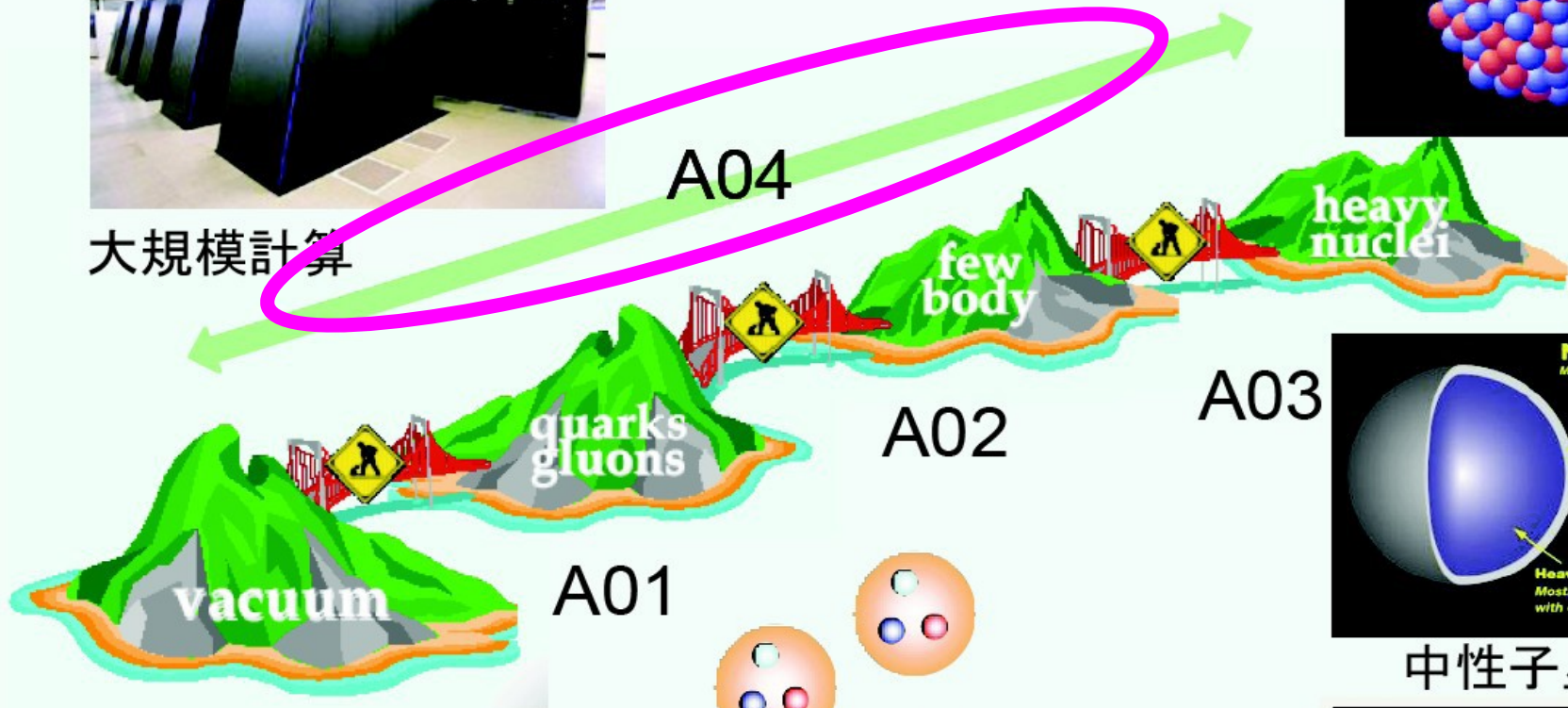
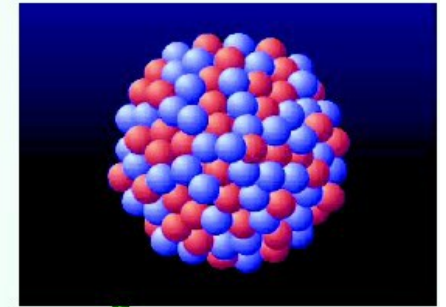
シンポジウム「次世代スーパーコンピュータでせまる物質と宇宙の起源と構造」

2010年3月15、16日 東京ステーションコンファレンス／東京大学

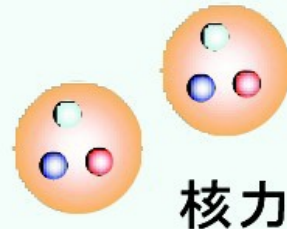


大規模計算

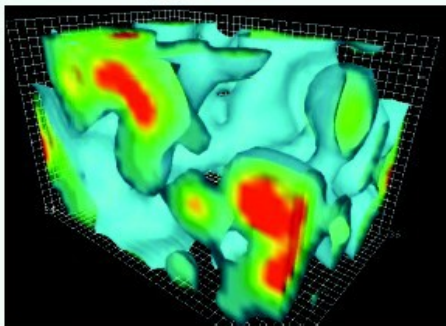
原子核



中性子星

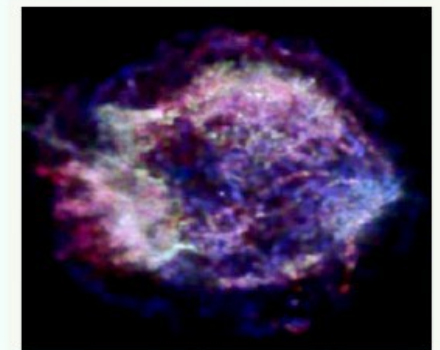


核力



真空

# 素核宇連携による 重層的物質構造の解明



超新星爆発

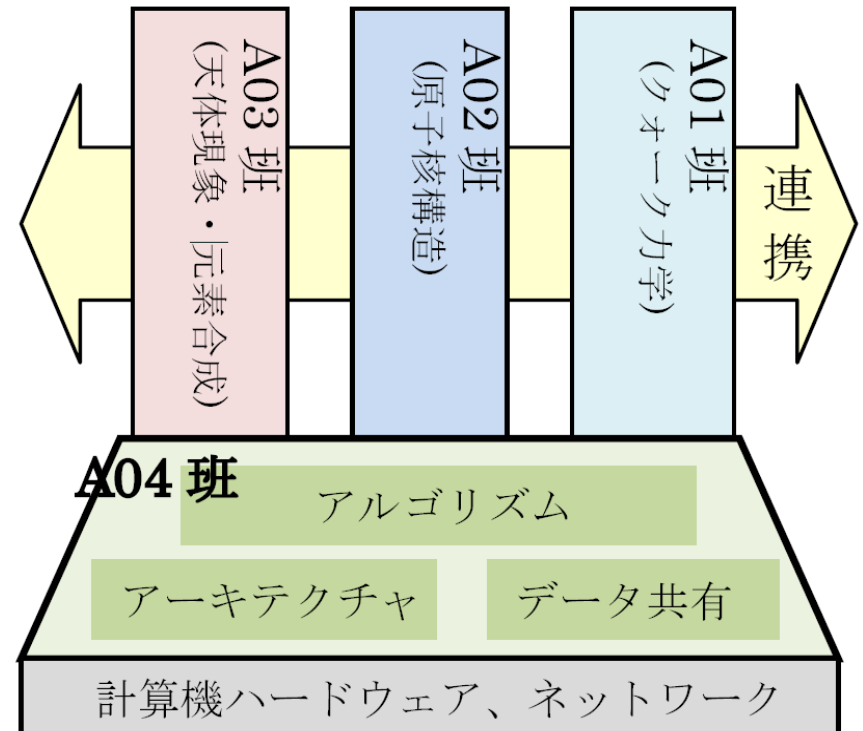


# A04班の目標

- アルゴリズムや数値計算手法の開発、環境整備を通して、領域の研究を推進する
- 数学的、アルゴリズム的視点から異なる階層の物理の共通性と違いを理解する

## 3 (+1)つの方向からのアプローチ：

- 分野横断アルゴリズム
- 計算機アーキテクチャ
- 計算環境の整備
- 共通コードの開発





# メンバー

- 松古栄夫 (KEK) - 研究代表者
- 吉江友照 (筑波大) - データ共有環境
- 金見隆志 (KEK) - 格子QCDアルゴリズムから他分野へ
- 櫻井鉄也 (筑波大) - 数値計算アルゴリズム
- 多田野寛人(筑波大) - 数値計算アルゴリズム
- 石川健一 (広島大) - 高速計算手法、共通コード、etc
- 橋本省二 (KEK) - 格子QCDアルゴリズム
- 矢花一浩 (筑波大) - 動的反応計算法
- 清水則孝 (東大) - 大規模各模型計算法
- 鈴木英之 (東京理科大) - 超新星シミュレーション
- 高橋大介 (筑波大) - 高速計算手法
- 野秋淳一 (KEK) - アルゴリズム、共通コード、etc
- 浮田尚哉 (筑波大) - データ共有環境の設計と構築
- 青山龍美 (名古屋大) - 高速計算手法、共通コード、etc
- 住吉光介 (沼津高専) - 超新星シミュレーション



# 分野横断アルゴリズム

- それぞれの分野で用いられているアルゴリズムの知見の共有
- 応用数学の専門家を交えた、共同研究と開発
- 分野を越えた応用のための協力体制の確立

## ターゲットとなるアルゴリズムの例

- 線形方程式の解法、固有値問題
- 発展方程式
- モンテカルロ法
- 変分法
- 線形問題の研究者(櫻井、多田野)を中心として、問題の理解をすすめる
- まずは分担・連携研究者の分野から分野間の連携と応用を始め、領域全体に広げてゆく



# 計算機アーキテクチャ

計算機の性能を可能な限り引き出すための研究

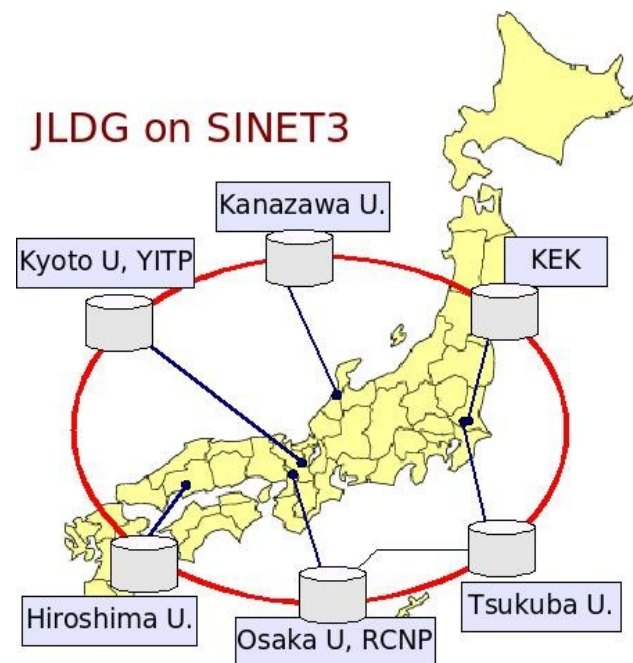
- 並列計算機
  - 次世代スパコン、Blue Gene, T2Kなどのため超並列化
- 演算アクセラレーター
  - 中規模計算(ピークで $O(1)$ TFlops程度)に便利
  - GPGPU (NVIDIA, AMD Radeon, etc.)
  - Grape DR
  - Cell Broadband Engine
- テスト環境の整備
- チューニング法など情報の共有
- 新規参入のハードルを下げる
  - CUDA? OpenCL?
  - コードジェネレーターの利用 (HMPP, PGI compiler)



# Data Grid

## 計算環境の効率化

- 大量データの発生 (特にA01,A02班の格子シミュレーション)
- 格子QCDのデータグリッド: JLDG (Japan Lattice Data Grid)
  - データの公開とデータのサイト間高速転送
  - 筑波大、KEK、京大基研、阪大RCNP、広島大、金沢大
  - CINET3上の仮想的専用ネットワーク
  - Gfarmによるグリッドファイルシステム
  - 2008年5月正式運用開始
- ストレージの整備
- より使いやすいものに改良
- 他分野への応用の可能性の検討





# 現状と2009年度の活動

- **環境整備**
  - 高速な線形問題アルゴリズム開発のための準備 (格子QCDのオーバーラップ演算子、超新星爆発)
    - 応用数学との連携に向けて
  - 大規模並列計算に向けての準備 (超新星爆発)
- **GPGPU, Cell の利用にむけて**
  - CUDA 講習会 + 研究会 (6月)
  - Accelerator boardスクール (12月、共催)
  - Cell BE 講習会 (1月)
  - テストに利用可能なサーバの整備
  - 格子QCDコードの作成
    - Staggered solver の場合で現在ピークの3-4% on Tesla (青山)
- **共通コード開発の開始**
  - C++、オブジェクト指向による設計を推進中

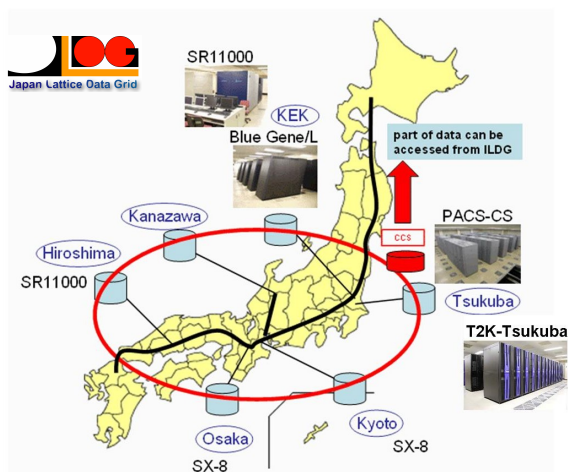




# Japan Lattice Data Grid

JLDGチーム

- システムの改良と高度化
  - ファイルシステムの高度化 (gfarm V1 から V2 へ, 2009/09)
    - user/group によるアクセス制御を実装
    - 公開配位共有に加えて、研究グループ利用を開始 (2009/10)
  - ILDG インターフェースの改良
    - MDC: 検索速度を大幅に改善 (2009/09)
    - アンサンブル検索システム (faceted navigation) を開発・公開 (2009/08)



JLDG 構成図

facet(地域グリッド、コラボレーション、物理パラメータなど)を任意の順番で指定して、アンサンブルを絞り込み検索

QCDml Faceted Navigation

```

rerid
srnm(22)
ip(2)
jldg(4)
sk(11)
vproj(2)
USQCD(21)
wwwroot(1)
collaboration
CP-PACS(12)
CP-PACS-UKQCD(20)
CSM(22)
CSM2(2)
sk(2)
strc(27)
rst(3)
LQCD(3)
MIG(13)
PACS-CS(6)
RBC-UKQCD(6)
rsasm(3)
beta(17)
t4(2)
USQCD(7)
projectName
s4i DMF(2)
s4i Dynamical Act14D(3)
s4i 2004/7/295 Jone(1)
Benon Reconos(1)
glover(2)
glover2(1)
Dynamical FUG Stoker(2)
Electromagnetic Form Factor(1)
  
```

Filter Condition(s):  
>>  
clear conditions

Ensemble(s) (25):

```

#1 [12/12/12/24] mc://JLDG/CP-PACS/RC/NF2/RC12x24
iwasa:RGluonAction {beta=1.800}
tpCloverQuarkAction {nf2/kappa=0.14090}
[Show XML] [Show LFNs]

#2 [12/12/12/24] mc://JLDG/CP-PACS/RC/NF2/RC12x24
iwasa:RGluonAction {beta=1.800}
tpCloverQuarkAction {nf2/kappa=0.14300}
[Show XML] [Show LFNs]

#3 [12/12/12/24] mc://JLDG/CP-PACS/RC/NF2/RC12x24
iwasa:RGluonAction {beta=1.800}
tpCloverQuarkAction {nf2/kappa=0.14450}
[Show XML] [Show LFNs]

#4 [12/12/12/24] mc://JLDG/CP-PACS/RC/NF2/RC12x24
iwasa:RGluonAction {beta=1.800}
tpCloverQuarkAction {nf2/kappa=0.14640}
[Show XML] [Show LFNs]
  
```

QCDml Faceted Navigation

```

rerid
jldg(1)
collaboration
PACS-CS(1)
projectName
RBC-UKQCD (beta=1.8) QCD with iwasa:RG gluons and
non-perturbatively O(a) improved Wilson (Glover) quark
action(1)
date
2009(2)
size
32/32/32/64(1)
numberOfFlavours
24(1)
show
iwasa:RGluonAction(1)
quark
tpCloverQuarkAction(2)
beta
1.800(1)
kappa
0186600(1)
0197500(1)
mass
ms
  
```

Filter Condition(s):  
>> rerid=JLDG >> collaboration=PACS-CS >> kappa=0.1361  
clear conditions

Ensemble(s) (1):

```

#1 [32/32/32/64] mc://JLDG/PACS-CS/RC/NF2+1/RC32
iwasa:RGluonAction {beta=1.900}
tpCloverQuarkAction {nf2/kappa=0.1375400}
[Show XML] [Show LFNs]
  
```

Center for Computational Science

faceted navigation のスクリーンショット

(注) NII e-Science研究分野を 支援するCSI委託事業「計算素粒子物理学のデータ共有基盤JLDGの高度化」と共同



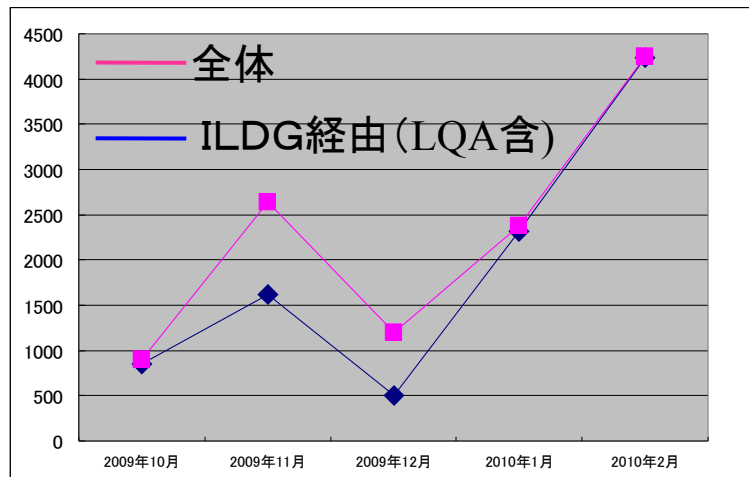
# Japan Lattice Data Grid

- 配位公開と広報

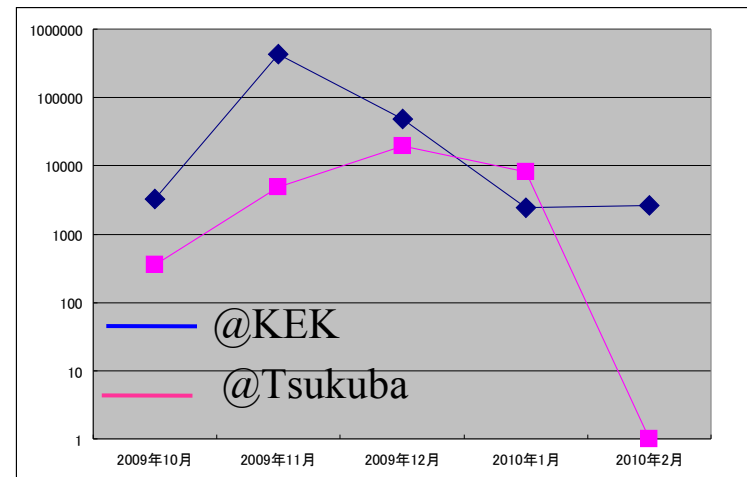
- PACS-CS  $N_f=2+1$  配位の公開 (6 ensemble, 2650 config, 2.8TB) (2009/10)
- JLQCD  $N_f=2$  配位、近日公開予定
- 利用講習会開催 (2010/01) 参加者: 19名、6機関

- 利用状況

- 公開配位の利用: 国内外のユーザーが毎月多数ダウンロード
- 研究グループ利用: 現在1グループ(5名)、KEK-Tsukuba 間
- ユーザー: 34名 (JLDG 内), 69名 (ILDG 経由の利用)
- ディスク: 96TB、内44% が既に利用されている。125TB 追加予定



公開配位ダウンロード数の推移



研究グループのファイルシステムアクセス数の推移



# 現状と2009年度の活動

- 関連する研究の成果
  - 公表論文3本、プロシーディング5本
- バジェット
  - P D x 2 (野秋@KEK, 浮田@筑波大)
  - GPUサーバ (計6Tesla)
  - Cell ボード + 講習会 (Fixstars GigaAccel180x1)
  - AMD Radeon GPUx2
  - Tesla クラスタ(H20年度導入)のバッチキューシステム
  - HMPP(コードジェネレータ), MATLAB
  - 保守

使ってみたい方は連絡下さい



# 共通コード

<http://suchix.kek.jp/bridge/Lattice-code/>

## 格子QCDの共通コードの開発

- 条件
  - 新しく始める人に優しいコード
  - チューニングもかなりの程度に可能
  - 新しい機能の追加が容易
- どのように設計するかについて議論中
  - 勉強会を開催（これまでに4回）
- 再利用性：オブジェクト指向（C++を選択）
- 開発過程は公開（mailing list, web）
  - コードを書く上で参考になる資料があるかも
- 2010年度に動くバージョンを作る

# 素粒子・原子核・宇宙分野のための 大規模線形計算手法の開発

- 研究代表者：櫻井鉄也（筑波大学）
- 連携研究者：多田野寛人（筑波大学）

### 目的：

素粒子・原子核・宇宙分野で現れる大規模な線形方程式や固有値問題を対象して、各分野で現れる解くべき問題の性質に応じてKrylov部分空間の特性を生かしたアルゴリズムの開発を行う。

これらの分野の研究者との交流を通じて、応用分野でのニーズに応じた新たな解法の開発を進めるとともに、分野をまたがって共通性の高い数理的手法の構築を目指す。

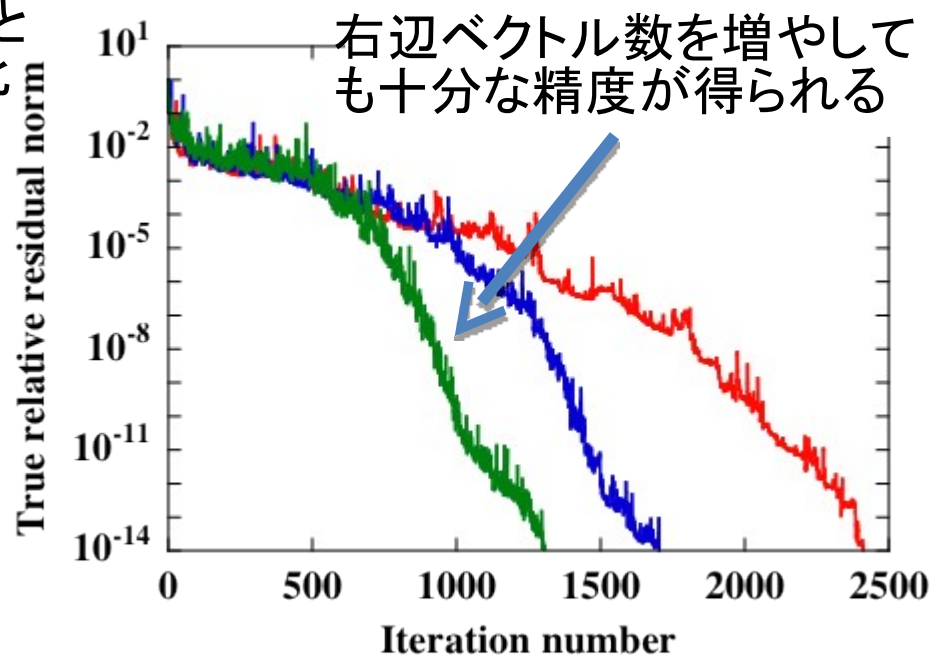
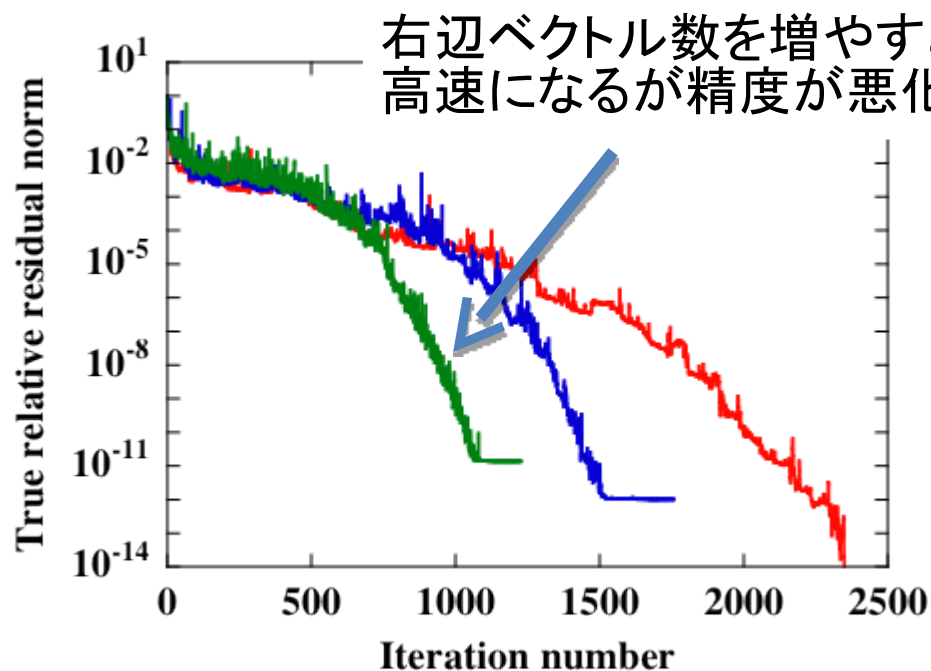
### 今年度の成果：

- 2) Wilson-Dirac方程式の解法の高速度化・高精度化
- 3) 配位生成計算における解の精度劣化回避
- 4) 大規模並列環境向けのAll-to-All伝搬関数計算手法の開発

# Wilson-Dirac方程式の解法的高速化・高精度化

## 新規Block Krylov部分空間法の提案

複数右辺ベクトルをもつWilson-Dirac方程式( $16^3 \times 32$ )の求解



右辺ベクトルの本数 ■:  $L = 1$ , ■:  $L = 2$ , ■:  $L = 4$ .

従来法: Block BiCGSTAB法

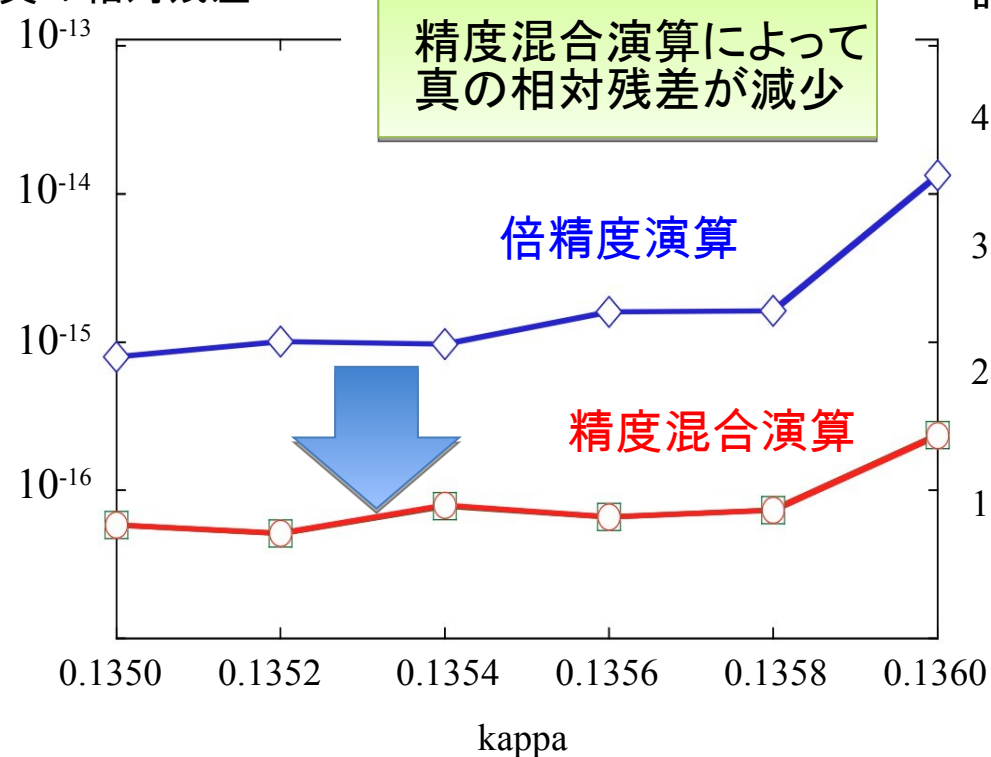
提案法: Block BiCGGR法

$\kappa = 0.1359$  における真の相対残差履歴.

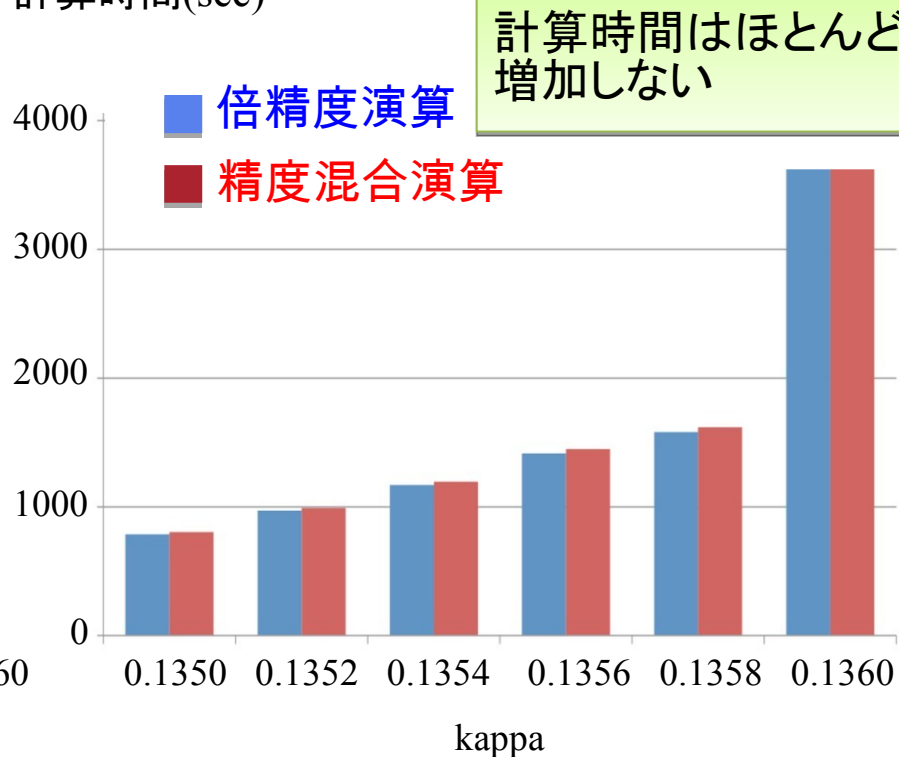
# 配位生成計算における解の精度劣化回避

倍倍精度の部分的な利用による解の精度改善手法の提案  
- 精度混合演算によって高精度近似解生成の高速化を実現

真の相対残差



計算時間(sec)

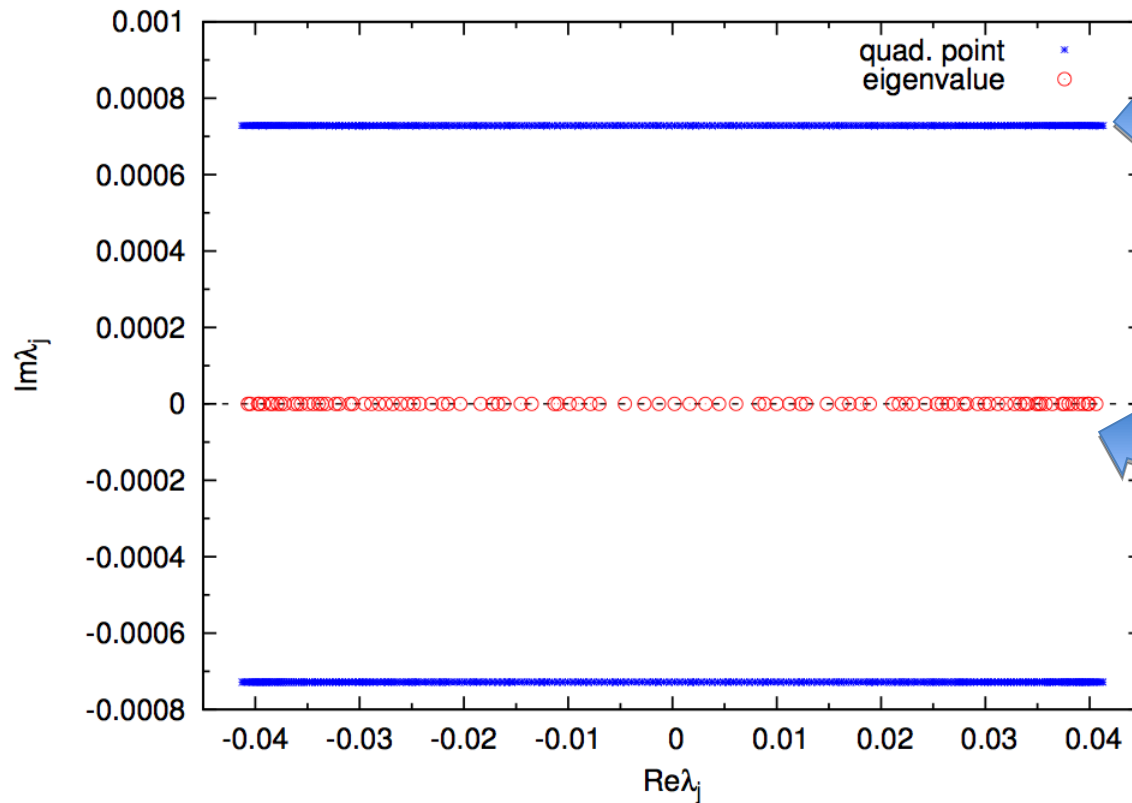


Wilson-Dirac方程式( $16^3 \times 32$ )の求解

# 大規模並列環境向けのAll-to-All伝搬関数計算手法の開発

## シフト方程式を利用した並列固有値解法の提案

エルミート化したフェルミオン行列( $16^3 \times 32$ )の固有対計算



シフト点

$$z_i, i = 1, 2, \dots, N$$

シフト方程式

$$(z_i I - H)x = b, \\ i = 1, 2, \dots, N$$

固有値

T2K-Tsukuba 4ノードでの結果  
従来法 (PARPACK): 10,205秒  
提案法: 9,471秒

来年度の課題:

- (1) 前年度に開発した解法の実用化の推進
- (2) 幅広い分野の研究者との交流を通じた新規手法の開発





# 来年度の予定

- 分野横断的な勉強会
  - 各分野の計算手法の情報交換と理解 — 連携に向けて
  - アルゴリズムの開発をめざす
- 格子QCD、超新星シミュレーションでの連携推進
- GPU, Cellなどは応用段階
  - 向いている計算には大きな効果
  - どのようにコード開発を簡略化するか？
  - Fermiはどのくらい使えるか？
  - 使ってみたい方、検討したい方は連絡ください
- JLDGの普及活動
  - 研究グループ内でのデータ転送
  - 配位公開と公開データを使った研究の促進
- 共通コードの開発：動くバージョンをつくる
- 他班へのお願い：研究会の時には声をかけてください