

機関番号：15401

研究種目：若手研究 (B)

研究期間：2008～2010

課題番号：20740139

研究課題名 (和文) 汎用グラフィックカードを用いた格子 QCD 計算の加速法の研究

研究課題名 (英文) Accelerating lattice QCD computations using general purpose graphic cards

研究代表者

石川 健一 (ISHIKAWA KENICHI)

広島大学・大学院理学研究科・准教授

研究者番号：60334041

研究成果の概要 (和文)：

本研究では Nvidia 社のグラフィックカード (GPU) を用い、格子 QCD 計算のクォークソルバーを GPU で計算するプログラム開発した。1 CPU を用いるこれまでの方法に比べて 1 枚の GPU を使うことで 7~10 倍の高速化が得られた。ブロック化したソルバーに含まれる独立な線形問題を各 GPU に割り当てる算法を開発し、複数 GPU による並列計算を可能にした。これを用い 10 フレーバー SU(3) ゲージ理論の結合定数の計算を行った。複数の PC の GPU を用いる並列加法的シュワルツ法による前処理法を開発したが、通信が律速となり良い結果が得られなかった。

研究成果の概要 (英文)：

We employ commodity graphic cards produced by Nvidia to accelerate the quark solver for lattice QCD simulations. With a single GPU card we obtain factors of 7-10 speed up for the quark solver compared with a single CPU case. The sample GPU solver program is freely available from the Web page of this project. We have developed the blocked iterative solver in which the independent linear equations are assigned to individual GPUs in a PC box. With this algorithm we can achieve an ideal improvement through the embarrassingly parallel usage of the multiple GPUs. Using the blocked GPU solver, we could estimate the running coupling constant of the 10-flavor SU(3) gauge theory very efficiently. In order to achieve large scale lattice QCD simulations with multiple PCs and GPUs, we have developed the additive Schwarz preconditioner to solve the domain decomposed quark linear equations. We did not observe the efficient improvement with the additive Schwarz preconditioner.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2008年度	800,000	240,000	1,040,000
2009年度	1,800,000	540,000	2,340,000
2010年度	500,000	150,000	650,000
年度			
年度			
総計	3,100,000	930,000	4,030,000

研究分野：素粒子理論

科研費の分科・細目：物理学・素粒子・原子核・宇宙線・宇宙物理

キーワード：格子 QCD

## 1. 研究開始当初の背景

素粒子理論の研究において、標準模型を超える理論の探索が長年にわたり行われてきている。標準模型の理論計算においては、量子色力学 (QCD) に支配されるクォークセクターと呼ばれる部分に関する計算が、系統誤差が大きい。QCD はその結合定数の強さのため、摂動展開による解析的方法では低エネルギーの物理を計算することは困難である。そこで、これを数値計算で近似なしに行う方法として格子 QCD の方法が開発されてきた。近年 10 年の間に計算手法の発展と計算機の性能の発展により低エネルギーのハドロン の質量の計算がほぼ実験値と会うことが確認されたところである。しかしながら、これらの計算はいまだ、実験値の確認に過ぎず、実験で計測の難しい物理量を理論的に格子 QCD で計算できるようになるのが今後の課題となってきた。

これらの数値計算はこれまで、高価なスーパーコンピュータを用いることのできる限られた研究者のみが可能であった。特に格子 QCD 計算で最も計算時間のかかる部分はクォーク行列の大規模連立方程式 (クォークソルバー) を解くところであり、この部分がスーパーコンピュータを必要とする。

近年、汎用グラフィックカードの性能が大変良くなってきており、画像処理以外の一般的な計算もグラフィックカードを用いることで高速に処理できる可能性が出てきた。この部分を汎用グラフィックカードで高速に処理できれば安価に理論計算ができる可能性がある。標準模型のパラメータ決定には様々な物理量についての理論計算が必要になっているが、安価に理論計算ができれば、試行錯誤的に探索的計算を行うことができ、素粒子理論の発展が加速できると期待されている。

本研究では汎用グラフィックカードを用いてクォークソルバーの高速化を目指し、スーパーコンピュータを必要としない計算ができないか研究した。

## 2. 研究の目的

安価な汎用グラフィックカードを用いて格子 QCD 計算を簡単に実行できるようにする。そのためアルゴリズムとプログラム開発を行い、実証計算を行う。

## 3. 研究の方法

Nvidia 社の汎用グラフィックカードを普通の 4 台のパソコンサーバーに導入し、Nvidia 社による CUDA 言語でプログラム開発を行う。グラフィックカードでは単精度計算が非常に高速であるが、数値計算においては倍精度計算が必要なため、単精度計算を繰り返すことで倍精度の計算結果が得られるアルゴリズムを開発する。また複数のグラフィックカードを同時並行に使えるような以下のアルゴリズムを開発する。(a) 1 台の PC にある複数の GPU を並列に利用するアルゴリズム (b) 複数の PC にある GPU を並列に利用するアルゴリズム。

(a) に対してはブロック化反復ソルバーの中に含まれる独立な連立方程式を各 GPU に割り当てて並列に GPU を利用するアルゴリズムを考える。

(b) に対しては GPU 間での通信を削減するため、GPU を反復法の前処理に使い、並列度の高い加法的シュワルツ法を開発する。

## 4. 研究成果

CUDA 言語を用い、1 枚の GPU 用のクォークソルバーを開発した。GPU は単精度の計算を非常に高速に実行できるが、科学技術計算では倍精度の計算結果が必要となる。クォークソルバーにおいても計算結果には倍精度が要求される。一般にクォークソルバーでは反復解法を用いるが、格子 QCD のクォークソルバーでは BiCGStab 法が用いられる。このソルバーの中に、係数行列の近似的な逆行列を掛け、元の係数行列の条件数を減らす前処理と呼ばれる部分がある。この部分は近似的に元の方程式を解くことと同じであるので高い計算精度は要求されない。実際この前処理部分を単精度で計算を行っても、反復法が倍精度の精度を持って収束するようにアルゴリズムを記述することができる。この前処理部分を GPU に計算させることで、全体の計算時間を短縮することを期待する。具体的には CUDA 言語で解きたい連立方程式を単精度の BiCGStab 法で解くようにした。CPU のホストコードの倍精度の BiCGStab 法の前処理部分にこの GPU による単精度 BiCGStab 法を入れることでプログラムを開発した。

このコードの性能を計算実験で調べた。実験により倍精度の計算結果を得る

ために、CPU の倍精度 BiCGstab 法は 3 反復から 4 反復必要であった。すなわち GPU にて 3 回から 4 回単精度で連立方程式を解くと倍精度の答えが得られるということである。このコードはほとんどの計算を GPU 側で行ない、初期の我々の予想通りの振る舞いを示した。我々の開発したコードの性能は CPU のみを用いた計算に比べて 7~10 倍の高速化を果たしていた。(学会発表 6) このコードは次の Web page で公開している。

[<http://theo.phys.sci.hiroshima-u.ac.jp/~ishikawa/cudaqcd.html>]

この GPU による加速をもってしても、大きめの格子サイズや複雑な物理量の計算に対しては依然として計算時間がかかりすぎる。

このこともあり並列に複数の GPU を用いるアルゴリズムも本研究の目的としており、目的にある (a) ブロック化ソルバー、(b) 加法的シュワルツ法の前処理、を開発した。

(a) 格子 QCD での物理量の計算では複数のクォークの伝搬関数を組み合わせるものが少なくない。ほとんどの場合組み合わせの数が数十になり、伝搬関数を一つずつ計算すると組み合わせの数に比例して計算時間が延びる。ブロック化ソルバーではメモリの許す限り、伝搬関数を計算する連立方程式をまとめて解くことができる。ここに現れる連立方程式は独立なので、並列に解くことができる。このことに注目しブロック化した BiCGstab 法の中の前処理を複数の GPU に分担させるアルゴリズムを開発した。特に、1 台の PC に複数の GPU を導入できるようにした。

実験計算によりこの場合 GPU 間通信のボトルネックほとんどなく GPU の枚数にほぼ反比例して計算時間が小さくなるのが確かめられた。このブロック化ソルバーを用いた現実的な格子サイズの計算として、素粒子理論の一つの模型である 10 フレーバー SU(3) ゲージ理論の結合定数の計算を行った。10 フレーバーの計算では 5 つの擬クォーク場が計算アルゴリズムに独立に現れる。GPU 1 枚で計算する場合、逐次的に 5 回の連立方程式の計算を行う必要があったが、今回開発したブロック化 GPU BiCGstab 法により、GPU 2 枚用いることで計算時間をほぼ 5 分の 3 に短縮することができた。これは、格子サイズが 1 台のパソコンサーバーに収まる場合は非常に安価に格子 QCD 計算が実行できることの実証とな

った。(発表論文 1,3, 学会発表 2, 3, 4)

(b) もう少し大規模な格子 QCD 計算ではメモリサイズや計算量の見積もりから、複数のサーバーと複数の GPU を使用する必要がある。そのための複数の GPU カードを用いた並列計算コードとして加法的シュワルツ法を前処理として用いる反復法ソルバーを開発した。加法的シュワルツ法では問題の領域を独立な部分に分けて各部分ごとに独立に連立方程式を解く。この解は全体の真の連立方程式の解の近似と考えられるので、この解の近似を用いて逐次的に解の近似精度を上げていく方法である。GPU を各領域に独立に割り当てることで GPU 間の通信を削減できると考え、BiCGstab 法の前処理部分に GPU による加法的シュワルツ法を用いた。GPU を 2 枚搭載する PC を 4 台用意し、各 PC を安価な Gigabit Ethernet 4 本で接続した環境を作成し、開発したアルゴリズムの性能を測定した。

前処理なしに比べた確かに GPU による前処理により計算時間は短縮し加速を認めたが、1 台の PC の時のように 7-10 倍のような加速は見られなかった。具体的にはやはり、PC 間の通信時間が律速となっていた。加法的シュワルツ法前処理通信時間の削減は行われていたが、GPU 間通信が一度 CPU を経由して行わなければならないため、無駄なデータコピーが発生し、大きな遅延があることと、安価な Gigabit Ethernet のネットワーク性能の不足が原因であった。今後安価な PC 用のネットワークカードやスイッチの高速化が望まれる。また、異なるホストにある GPU 間の CPU を介さない直接的なデータ通信の機能が必要である。(雑誌論文 2, 学会発表 1, 3, 5, 6)

以上のように 1 台の PC に複数枚の GPU を導入することで格子サイズとして時空の一辺が 16~24 あたりまでの格子ゲージ理論の計算が可能となることが分かった。ゲージ配位は国際的な格子 QCD ネットワーク (ILDG) により配布されているデータを用いれば個人の PC 上で安価に物理量の計算ができるようになったと考えられる。

## 5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 3 件)

1. M. Hayakawa, K. -I. Ishikawa, Y. Osaki,

- S. Takeda, S. Uno, and N. Yamada, “Running coupling constant of ten-flavor QCD with the Schrödinger functional method”, Physical Review D (2011) 掲載決定, 査読あり.
2. Yusuke Osaki and Ken-Ichi Ishikawa, “Domain decomposition method on GPU cluster”, PoS LATTICE2010:036 (2010), 査読あり.
  3. M. Hayakawa, K.-I. Ishikawa, Y. Osaki, S. Takeda, S. Uno, and N. Yamada, “Improving many flavor QCD simulations using multiple GPUs”, PoS LATTICE2010:325 (2010), 査読あり.

[学会発表] (計6件)

1. Yusuke Osaki and Ken-Ichi Ishikawa, “Domain decomposition method on GPU cluster for Lattice”, The XXVIII International Symposium on Lattice Field Theory, 2010/06/18, Villasimius, Cagliari, Italy.
2. M. Hayakawa, K.-I. Ishikawa, Y. Osaki, S. Takeda, S. Uno, and N. Yamada, “Improving many flavor QCD simulations using multiple GPU’s”, The XXVIII International Symposium on Lattice Field Theory, 2010/06/15, Villasimius, Cagliari, Italy.
3. Ken-Ichi Ishikawa, “Accelerating lattice QCD simulations using multiple GPUs”, Multi-core and GPU computing workshop, 2010/05/27, KIAS, Korea.
4. 石川健一ほか5名, 「多フレーバー格子ゲージ理論計算におけるシュレーディンガー汎関数法のGPUを用いた加速について」, 日本物理学会第65回年次大会, 2010/03/20, 岡山大学.
5. 尾崎裕介, 石川健一, 「GPU クラスタによる格子QCD計算」, 日本物理学会第65回年次大会, 2010/03/20, 岡山大学.
6. 尾崎裕介, 「GPUを用いたlattice計算」, 日本物理学会第64回年次大会, 2009/03/28, 立教大学.

[その他]

ホームページ等

<http://theo.phys.sci.hiroshima-u.ac.jp/~ishikawa/cudaqcd.html>

5. 研究組織

(1) 研究代表者

石川 健一 (ISHIKAWA KENICHI)

広島大学・大学院理学研究科・准教授

研究者番号：60334041

(2) 研究分担者 ( )

研究者番号：

(3) 連携研究者 ( )

研究者番号：