

「素粒子・原子核・宇宙物理のためのアルゴリズム研究と共通コード開発」実施報告書

2012年12月2日

課題グループ名: scbridge

研究責任者: 野秋淳一 (noaki@post.kek.jp)

研究組織

以下の人員(氏名・所属・職名)と役割分担で研究を行った。

- 野秋 淳一 K E K素粒子原子核研究所 特任助教
格子 QCD 共通コードの開発および全体統括
- 松古 栄夫 高エネルギー加速器研究機構 計算科学センター 助教
研究全体を統括する
- 水田 晃 K E K素粒子原子核研究所 研究員
相対論的流体方程式への分野横断的アルゴリズムの応用
- 上田 悟 K E K素粒子原子核研究所 研究員
格子 QCD 共通コードの開発および保守
- 元木 伸治 K E K素粒子原子核研究所 研究員
格子 QCD 共通コードの開発および保守
- 青山 龍美 名古屋大学 素粒子宇宙起源研究機構 特任准教授
数値計算アルゴリズムの分野横断的応用
- 早川 雅司 名古屋大学大学院理学研究科 准教授
格子ゲージ理論への数値計算アルゴリズムの応用
- 住吉 光介 沼津工業高等専門学校 教養科 准教授
超新星爆発シミュレーションへの分野横断的なアルゴリズムの応用
- 今倉 暁 筑波大学計算科学研究センター 研究員
応用数学の立場からの線形アルゴリズムの応用
- 滑川 裕介 筑波大学計算科学研究センター 研究員
格子 QCD 共通コードの検証
- 浮田 尚哉 筑波大学計算科学研究センター 研究員
格子 QCD 共通コードの検証

格子 QCD 共通コード Bridge++ の開発

今回の研究期間における成果の中心は格子 QCD シミュレーション共通コードの開発にある。我々はオブジェクト指向に基いた C++ 言語による格子 QCD コード Bridge++ の開発を行った [1]。この開発プロジェクトは平成 20 年度科研費・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」(領域代表・青木慎也、筑波大学)において開始し、その後、HPCI 戦略プログラム 分野 5「物質と宇宙の起源と構造」のサポートも受けている。様々な格子作用やアルゴリズムを適用可能で、ノート PC から超並列計算機まで幅広いアーキテクチャに対応し、最先端の研究に必要なパフォーマンスを実現でき、なおかつ使い易いものを目指している。7月24日に version 1.0 を公開し、現在も精力的な開発が続いている。

本研究期間に KEKSC システムで行った主な活動は、

- SR 上での並列化の検証
- Blue Gene/Q への対応とチューニング
- HYP smearing の開発と検証
- domain-wall fermion の開発と検証

である。また以下の機能について、実装の並列化及びコンパイラ依存性の検証にも、本システムを利用した。

- Wilson loop, Polyakov loop の測定
- noise 法による非結合ダイアグラムの測定
- Domain-wall fermion とその最適化されたバージョンの実装
- clover fermion に対する有限アイソスピン化学ポテンシャルを含む動的シミュレーション法

GNU C++, Intel C++ と異なるコンパイラとハードウェアによる検証が可能であり、また実戦規模のシミュレーションを容易に実現できる環境として、KEKSC システムは Bridge++ の開発に不可欠な役割を果たしている。

検証の詳細

(1) HYP smeared clover fermion

Nf=2+1 HYP smearing によって改良した clover fermion を動的に含む配位を生成し、BMW collaboration による文献 [2] の値と比較することにより検証を行った [3]。HYP smearing と stout projection を組み合わせた、stout-HYP あるいは HEX と呼ばれる改良をフェルミオン作用に対して行い、ゲージ場の作用には Symanzik 改良された作用を用いた。1-フレイバーのアルゴリズムとしては Rational HMC を用い、分子動力学的發展については Omelyan による改良されたものを用いた。16³ × 32 格子上で 2 つのパラメーターセットでの配位生成を行い、擬スカラー中間子の質量を測定し、[2] と矛盾しない結果を得た。また、1-フレイバーにおいてフェルミオン演算子の近似が正しいための条件として、演算子の固有値分布が近似式の有効範囲に入っていることを、固有値ソルバーを用いて確認した。

現在の実効性能は、システム A (1 node) に対して約 5%、システム B について 3% (32 node), 2% (128 node) となっている。まだ改良の余地は大きく残っているので、今後もチューニングを継続する予定である。

(2) Domain-wall フェルミオンの動的シミュレーション

Domain-wall フェルミオンを動的に含むシミュレーションを行い、文献の結果と比較することにより検証を行った。

(2-a) Bridge++ (ver.0.9.284+) vs P.Chen et al. [4] (有限温度)

検証条件:

- $8^3 \times 4$ lattice
- plaq gauge action (beta=5.2)
- Nf = 2 DW/PV: Ns = 16, M_0 = 1.90, m_q = 0.10, bc = (1,1,1,-1)
- HMC with 2-level (multi-time step) Omelyan integrator

結果 (plaquette value):

Bridge++: plaq = 0.43452(47)

[4]: plaq = 0.435(2)

(2-b) Bridge++ (ver.0.9.284+) vs Y.Aoki et al. [5]

検証条件:

- $8^3 \times 16$ lattice (our test), $16^3 \times 32$ (in paper) lattice
- DBW2 gauge action: beta = 0.80 (c_plq = 12.2552, c_rct = -1.4069)
- Nf = 2 DW/PV: Ns = 16, M_0 = 1.90, m_q = 0.18, bc = (1,1,1,-1)
- HMC with 2-level (multi-time step) Omelyan integrator

結果 (plaquette value):

Bridge++: plaq = 0.64663(11)

[5]: plaq = 0.646561(48)

以上のように、2種類のパラメーターセットについて、文献の結果と矛盾しない plaquette 値を得た。

これらのシミュレーションに関する各機能要素は、Bridge++ の中で中核的な役割を持つものであり、大規模な検証によってそれらが問題なく動作し、文献値と矛盾しない結果を示したことは、本コードの信頼性確保に大きな意味があった。また生成した配位データについては、今後の開発でテスト用のデータとして利用可能である。

参考

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

[2] S.Durr et al., JHEP 1108(2011) 148.

[3] http://suchix.kek.jp/bridge/Lattice-code/120509/matsufuru_120509.pdf

[4] P.Chen et al, Phys. Rev. D 64 (2001) 014503

[5] Y.Aoki et al, Phys. Rev. D 72 (2005) 114505