

















图 11 16MPI + 16OpenMP 各向量化优化测试结果及加速比

结果显示, 几种向量化算法均优于 Fortran 内置的 matmul 函数的效果, 而且都取得了 3 倍左右的加速效果. 其中基于 Intel Intrinsic 的手动向量化算法效果最好, 达到了 3.17 倍的加速.

#### 4.4 输出组态文件优化测试

针对 3.4 节提出的组态输出优化方案, 我们测试了未改变数据顺序的 MPI 并行输出以及修改数据顺序后的 MPI 并行输出算法, 以单个 MPI 进程输出组态文件的结果为基准, 具体实验数据如下:

表 4 MPI 并行写组态文件测试结果

格子大小	串行写 (秒)	并行写 (秒)	加速比 (串行/并行)
32 <sup>3</sup> ×32	85.11	1.03	82.63
32 <sup>3</sup> ×64	143.19	0.93	153.97
32 <sup>3</sup> ×128	319.44	2.23	143.25

表 4 中“串行写”的数据为测试的基准, 并行写”为修改了数据顺序后的并行写算法测试结果, “加速比”为其对应的加速比. 通过表 4 我们可以看出, 优化了数据顺序的并行写算法取得了上百倍的加速, 最高达到了 153 倍.

## 5 总结与未来工作

格点量子色动力学一直是高性能计算领域的热门应用方向, 多年来一直伴随着超级计算机的发展, 对高性能计算的发展有强有力的驱动力. 本文基于典型的格点 QCD 胶球模拟计算程序, 采用了多项优化技术, 对程序进行了性能分析和并行优化, 并实现了大规模的并行测试, 并行规模超过 4 万核. 性能方面, 加入 OpenMP 多线程并行部分, 最高取得了 3.32 倍的加速

比, 在向量化优化矩阵计算部分, 最高取得了 3.17 倍的加速比, 在并行输出组态文件部分取得了 153 倍的加速比.

优化后的程序可更有效地产生大量组态, 有利于得到更精确的胶球谱. 优化后的程序可较容易推广到夸克与胶子组成的混杂态的研究, 及普通介子和胶球的混合问题的研究, 为高能物理的相关研究提供更加便利的软件工具.

## 致谢

感谢中国科学院高能物理研究所理论物理室陈莹老师参与讨论和提供帮助, 感谢广州“天河 2 号”超算工作人员提供的测试支持.

## 参考文献

- Wilson KG. Confinement of quarks. *Physical Review D*, 1974, 10: 2445–2459. [doi: 10.1103/PhysRevD.10.2445]
- Five Gordon bell finalists credit summit for vanguard computational science. <https://www.olcf.ornl.gov/2018/09/17/uncharted-territory/>, 2018-09-17.
- Brower R, Christ N, DeTar C, *et al.* Lattice QCD application development within the US DOE exascale computing project. *Proceedings of the 35th International Symposium on Lattice Field Theory*. Granada, Spain. 2018. 09010.
- 433.milc (su3imp), SPEC CPU2006 benchmark description. <https://www.spec.org/cpu2006/Docs/433.milc.html>.
- QUDA: A library for QCD on GPUs. <http://lattice.github.io/quda/>.
- Smelyanskiy M, Vaidyanathan K, Choi J, *et al.* High-performance lattice QCD for multi-core based parallel systems using a cache-friendly hybrid threaded-MPI approach. *Proceedings of 2011 International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis*. Seattle, WA, USA. 2011. 1–10.
- Kanamori I, Matsufuru H. Practical implementation of lattice QCD simulation on Intel Xeon Phi knights landing. arXiv: 1712.01505, 2017.
- Lattice QCD code bridge ++. <http://bridge.kek.jp/Lattice-code/>.
- Chen Y, Alexandru A, Dong SJ, *et al.* Glueball spectrum and matrix elements on anisotropic lattices. *Physical Review D*, 2006, 73(1): 014516. [doi: 10.1103/PhysRevD.73.014516]
- Gui LC, Chen Y, Li G, *et al.* Scalar glueball in radiative  $J/\psi$  decay on the lattice. *Physical Review Letters*, 2013, 110(2): 021601. [doi: 10.1103/PhysRevLett.110.021601]
- Yang YB, Gui LC, Chen Y, *et al.* Lattice study of radiative  $J/\psi$  decay to a tensor glueball. *Physical Review Letters*, 2013, 111(9): 091601. [doi: 10.1103/PhysRevLett.111.091601]