

2E01

MPI/OpenMP ハイブリッド並列化 Hartree-Fock 計算アルゴリズムの開発

(豊田中研¹, 兵庫県大院工²) ○石村 和也¹, 倉本 圭², 生田 靖弘¹, 兵頭 志明¹

【序】化学反応の予測・制御、スペクトルの解析など化学の様々な面で、量子化学計算は重要な役割を果たしており、計算に対する要求は高まる一方である。大きな置換基による立体効果や、分散力など非共有結合を活用した新たな物質・反応の設計などにより、計算対象分子は年々大きくなっている。また、計算機に関しては、発熱や消費電力の問題で CPU 単体の性能向上はほぼ止まり、計算機台数の増加、及び 1 台当たりの CPU コア数の増加により計算能力を向上させるようになった。そのような計算機システムを使って大規模・高精度計算を行うためには、並列化効率の向上及びメモリの効率的な利用が重要になる。現在主流の MPI のみの並列化では十分対応できず、計算機ノード内のデータ共有ができ、さらにノード内の動的な負荷分散ができる OpenMP の導入は必須であると考えられる。そこで、量子化学の基礎理論である Hartree-Fock 法について、ノード間を MPI、ノード内を OpenMP で並列化した MPI/OpenMP ハイブリッド並列化アルゴリズムを開発・実装し、Cray XT5 2048CPU コアを用いたベンチマーク計算を行った。

【並列化アルゴリズム】Hartree-Fock 計算で最も時間を要する AO(原子軌道)2 電子積分計算は 4 重ループの中で行われる。図 1 のように、第 1 ループを OpenMP で、第 3 ループを MPI ランクにより計算を分散させるアルゴリズムを開発した。OpenMP での分散を最外ループで行うことにより、スレッド生成など OpenMP のオーバーヘッドを大幅に減らし、さらに動的に分散させることにより、ノード内の負荷をほぼ均等に分けることができる。

AO2 電子積分計算以外に、AO1 電子積分、初期軌道計算のハイブリッド並列化も行った。初期軌道の射影計算では、大半が行列積演算になる次式[1]を用いることにより、高速化も行った。

$$C_1 = S_{11}^{-1} S_{12} C_2 [C_2' S_{12}' S_{11}^{-1} S_{12} C_2]^{-1/2}$$

C_1 : 初期軌道係数

C_2 : 拡張 Huckel 計算による軌道係数

S_{11} : 実計算の基底の重なり積分

S_{12} : 拡張 Huckel と実計算との基底の重なり積分

```
$OMP parallel do schedule(dynamic)
```

```
do  $\mu = 1, nbasis$ 
```

```
do  $v = 1, \mu$ 
```

```
do  $\lambda = 1, \mu$ 
```

```
 $\mu\nu\lambda = \mu\nu\lambda + 1$ 
```

```
if(mod( $\mu\nu\lambda, nproc$ ).ne.mpi_rank) cycle
```

```
do  $\sigma = 1, \lambda$ 
```

```
AO2 電子積分( $\mu\nu | \lambda\sigma$ )計算
```

```
( $\mu\nu | \lambda\sigma$ )を Fock 行列に足し込み
```

```
enddo
```

```
enddo
```

```
enddo
```

```
enddo
```

```
call mpi_allreduce(Fock matrix)
```

図 1 MPI/OpenMP ハイブリッド並列化 Fock 行列計算アルゴリズム

【結果と考察】開発したアルゴリズムを GAMESS version Apr. 2008 に実装した。オリジナルの GAMESS は MPI (もしくは socket 通信) のみで並列化されている。TiO₂ クラスタ (Ti₃₅O₇₀, 6-31G, 1645 基底, 30 SCF サイクル) を用いて、Cray XT5 (Quad-core Opteron 2.4GHz, 8CPU コア/ノード) 2048CPU コアのテスト計算を行った。ハイブリッド並列計算は 8 スレッド/プロセスで行った。

初期軌道計算を含む TiO_2 クラスタ全計算の並列加速率を図 2 に示す。2048CPU コアの並列加速率は、オリジナルの GAMESS では 758 倍であったが、初期軌道計算変更により 1055 倍(改良版(MPI のみ))に向上し、さらにハイブリッド並列化により 1238 倍(改良版(MPI/OpenMP))に向上した。

MPI/OpenMP ハイブリッド並列により、Fock 行列計算の並列加速率はオリジナルに比べ向上しており、CPU コア数が多くなるほど、その差は大きくなっている(表 2)。

オリジナル版の初期軌道計算の割合は、16CPU コアでは 0.9% であるのに対し、2048CPU コアでは 37.5% になっている(表 3)。これが、図 2 におけるオリジナル(MPI のみ)と改良版(MPI のみ)の差の主な原因である。改良版では、2048CPU コアでも 5.9–7.0% と割合は小さく、計算全体の並列加速率への影響は小さい。シリアル計算ではわずかな割合(1%以下)の計算でも、1000CPU コア規模の計算では無視することはできない。これからの大規模計算では、主要な計算部分のみの並列化だけではなく、計算全体の高速化・並列化が重要である。本研究を基にして、大規模高精度計算への展開が可能になった。

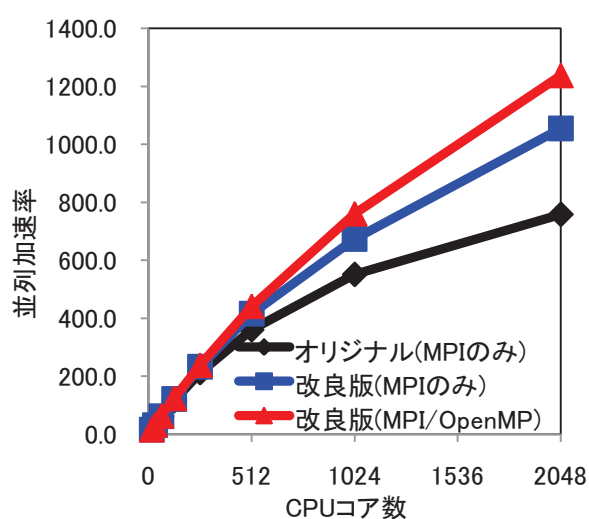


図 2 TiO_2 クラスタ全計算の並列加速率

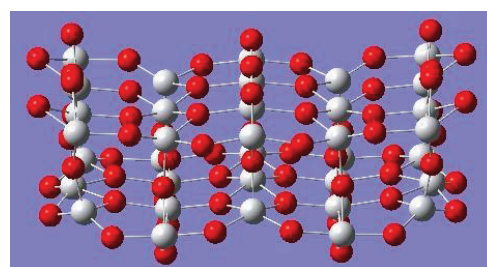


図 3 TiO_2 クラスタ

表 1 TiO_2 クラスタ全計算時間(秒)及び並列加速率(カッコ内)

CPU コア数	16	256	1024	2048
オリジナル	18176.4	1368.6	527.6	383.5
MPI のみ	(16.0)	(212.5)	(551.2)	(758.3)
改良版	18045.6	1241.2	428.7	273.7
MPI のみ	(16.0)	(232.6)	(673.5)	(1054.9)
改良版	18121.6	1214.6	381.1	234.2
MPI/OpenMP	(16.0)	(238.7)	(760.8)	(1238.0)

表 2 TiO_2 クラスタの Fock 行列計算時間(秒)及び並列加速率(カッコ内)

CPU コア数	16	256	1024	2048
オリジナル	17881.8	1175.2	334.0	188.6
MPI のみ	(16.0)	(243.5)	(856.6)	(1517.0)
改良版	17953.5	1175.2	360.0	203.1
MPI のみ	(16.0)	(244.4)	(797.9)	(1414.4)
改良版	17777.6	1150.4	316.4	174.8
MPI/OpenMP	(16.0)	(247.3)	(899.0)	(1627.2)

表 3 TiO_2 クラスタの初期軌道計算時間(秒)及び全計算に占める割合(カッコ内)

CPU コア数	16	256	1024	2048
オリジナル	166.2	143.6	143.6	143.8
MPI のみ	(0.9%)	(10.5%)	(27.2%)	(37.5%)
改良版	20.2	18.6	18.9	19.2
MPI のみ	(0.1%)	(1.5%)	(4.4%)	(7.0%)
改良版	18.6	13.2	13.6	13.8
MPI/OpenMP	(0.1%)	(1.1%)	(3.6%)	(5.9%)