

3P091

量子モンテカルロ法の超並列計算機への実装

(兵庫県立大院・工) ○内藤佑太郎, 倉本圭, 小橋昌司, 畑豊

【序】現在注目されている電子状態計算手法のひとつに量子モンテカルロ法(QMC: Quantum Monte Carlo)がある。QMCは乱数を用いた統計的手法である。他の手法では計算量が $O(n^3)$ であるのに対し、QMCは $O(n)$ と格段に小さい。QMCは並列化効率が非常に高いことが知られており、並列化による高速化が効率的に行うことができる。

また、近年の計算機性能の向上により大型計算機の性能も飛躍的に向上している。現在、大型計算機は分散メモリ型並列計算機で構成されており、特に大型のものを超並列計算機と呼んでいる。超並列計算機は地球など特に大規模なシミュレーションや、より現実を則したパラメータを用いたシミュレーションなど計算量の大きな計算を行っている。

本研究では、超並列計算機としてCray XT5を用いてQMCの一つである変分モンテカルロ法を実装し、その性能評価を行った。

【並列化手法】分散メモリ型並列計算機による計算では、コア間の通信時間のオーバーヘッドによって実行時間が理論値より減少し、並列化効率の低下が発生する。そのため、粗粒度で並列化を行い通信の回数を減らすことで並列化効率の向上が見込める場合がある。

本研究では、通信回数を減らすために各コア上でウォーカーを生成しエネルギーを計算する。出力されるエネルギーが平衡状態になると、各コアで求めたエネルギーの平均を求め、それを解とする。この方法では変分パラメータを変化させない場合、エネルギーを計算するために必要な通信回数は1回である。また、変分パラメータを変化させる場合、すべてのコアへ変分パラメータを送信する必要がある。そのため1つの変分パラメータによるエネルギーの計算に必要な通信回数は2回となり、通信回数の削減が期待できる。



図 1 Cray XT5 ノード構成[1]

【計算環境】本研究ではCray XT5を用いて計算を行う。計算ノードの構成を図1に示す[1]。図1から、Cray XT5は1ノード2ソケット構成である。プロセッサはAMD Opteron(Istanbul)プロセッサ2.4GHzが64node、AMD Opteron(Shanghai)プロセッサ2.7GHzが4nodeあり、メモリは1node当たり32GBである。また、Lustreファイルシステムを用いており、その総容量は8.4TB、MDTを1式、OSTを8式そなえている。コンパイラとしてCrayコンパイラを用い、性能解析にはCray Patを用いた。

【計算結果】ヘリウム原子に対して本手法を適用した結果について述べる。試行関数として式(1)を用いた。

$$\psi_{\alpha}(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) = \frac{\alpha^3}{\pi} e^{-\alpha(R_1+R_2)} \quad (1)$$

試行回数 10000, ウォーカー数 12800 としたときのプロセッサエレメント (PE) 数に対する並列化効率を図 2 に示す. 図 2 から, ノード数の増加により並列化効率が大きく減少していることがわかる. この要因のひとつとしてロードバランスが挙げられる.

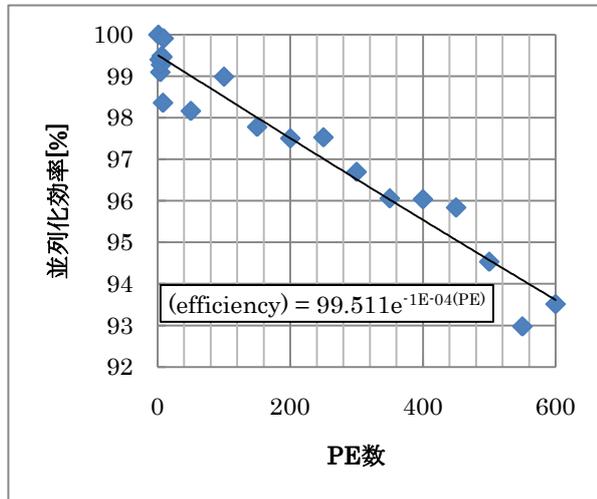


図 2 並列化効率

プロセス全体のロードバランスを図 3 に示す. 図 3 の USER はユーザ定義関数の実行時間, MPI_SYNC は MPI 関数の待機時間, MPI は MPI 関数の実行時間である. 図 3 から, USER が大きい PE では MPI_SYNC が小さくなっていることがわかる. これはユーザ定義関数の後にバリア同期を行っているために発生した差である. ユーザ定義関数内において, 条件分岐を用いている. そのため, 各 PE で分岐先での計算量の違いが発生し, ロードバランスが悪くなっていると考えられる. 以上から, 条件分岐を用いないアルゴリズムを用いることによってロードバランスは改善され, 並列化効率の向上が実現できると考えられる.

会場では改良を行ったアルゴリズムの効率と精度について発表を行う予定である.

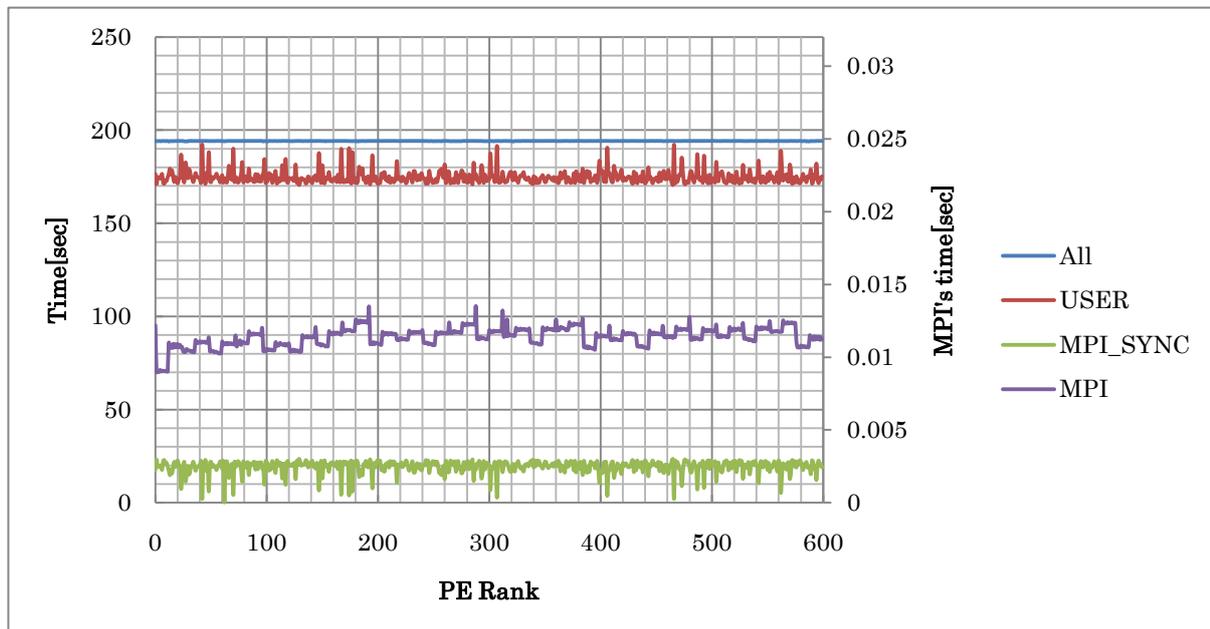


図 3 全プロセスのロードバランス

【謝辞】本研究の遂行にあたり, クレイ・ジャパン・インクに実験協力を頂いたことを深く感謝いたします.

【参考文献】

- [1] Cray XT5™ Compute Blade, <http://www.jp.cray.com/downloads/CrayXT5Blade.pdf>