

## 量子科学計算における固有値問題並列計算法の性能評価

(北九州市立大<sup>1</sup>、北九州市立大院・環境工学研究科<sup>2</sup>) ○高良泰夫<sup>1,2</sup>、野上敦嗣<sup>1</sup>

A performance study of eigenvalue problem parallel computing method in quantum chemical calculations

(Kitakyusyu Univ.<sup>1</sup>、Graduate School of Environmental Eng.<sup>2</sup>) ○Takara Yasuo<sup>1,2</sup>、Nogami Atsushi<sup>1</sup>

## 【目的】

量子化学計算における計算の負荷は、行列要素の計算と固有値問題の解法が主であり、励起状態計算では、小規模分子でも数万次元以上の固有値計算を行う必要がある。しかし、行列要素の計算は並列計算での高速化が見込めるが、固有値問題では並列計算が困難であった。近年、並列化に優れた分割統治法を用いた数値計算ライブラリが開発されたが、計算性能は用いる行列によっても異なる。

本研究では、実際の励起状態計算の行列を用いて、分割統治法ライブラリ(Eigen\_exa,Eigen\_k,ScaLAPACK,LAPACK)の並列計算性能の評価を行った。また並列方式(MPI、OpenMP)の相違、LANによる通信速度の影響、コア数(Xeon,XeonPhi)と並列化率の関係についても評価を行った。

## 【計算方法】

使用した固有値計算ライブラリを表1に示す。標準数値計算ライブラリLAPACKの分割統治法計算ルーチンであるDSYEVDを基準にこれの並列版であるScaLAPACKのPDSYEVD、山田進<sup>1</sup>ら開発のEigen\_kを用いて計算を行い、並列計算性能の比較を行った。Eigen\_kのEigen\_sルーチンではScaLAPACK同様、三重対角化(trd)、分割統治法(dc)、逆変換(tbk)の3フェイズによる計算方法を採用している。そのほかスーパーコンピュータ「京」用にチューニングされたEigenライブラリのEigen\_exaでも計算を実行した。用いた並列化方法としては、OpenMPI(OMPI)、IntelMPI(IMPI)、OpenMP(OMP:インテルコンパイラ)、の3種類で計算時間を比較した。

その他、次数の変更、行列要素を変更し計算時間への寄与を調べた。行列の要素は、Eigen\_sのテスト用配列と高分子ポルフィリン亜鉛錯体の励起状態ファイルを用いる方法で計算を実行した。計算機はXeonE5-2687W(16コア,3.10GHz,128GB)とXeon Phi 3120A(57コア,1.1GHz,6GB)を用いた。ネットワーク並列計算はXeon E5-2687Wを2台、1GBイーサネットおよび10GBイーサネットで直結し比較した。

表1 使用した固有値計算ライブラリ

ライブラリ名	ルーチン名	並列化	備考
LAPACK(1992)	DSYEVD	OpenMP	・計算機の性能評価によく用いられる ・OpenMPで並列化可能
ScaLAPACK(1995)	PDSYEVD	MPI	・LAPACK並列計算版 ・MPIで並列化可能
Eigen_k(2009)	Eigen_s Eigen_sx	OpenMP MPI	・三重対角化、分割統治法、逆変換の3フェイズからなる ・eigen_kは五重対角化で計算
Eigen_Exa(2015)	Eigen_s Eigen_sx	OpenMP MPI	・スーパーコンピュータ「京」用にチューニングされたライブラリ ・分割統治法の高速化

(1 山田進(原子力機構) ほか

【結果・考察】

図1に固有値計算ライブラリによる計算速度の違いを示す。OMPのLAPACKは並列数が4以上で計算速度の向上は見られなくなり、OMPIのScaLAPACKは並列数9まではLAPACKよりも遅いが並列数16ではScaLAPACKのほうが早い。Eigen\_kではOMPI並列計算を用いることでLAPACKで並列数2でも1.36倍Eigen\_kが速く、並列数16だと6.44倍、ScaLAPACKでは5.05倍から5.14倍計算速度の向上が確認できた。

図2はEigen\_kとEigen\_Exaの性能を並列化別に比較した結果である。MPIでは0.5%の計算速度の向上しか確認できないが、OMPではEigen\_kではほとんど計算速度の向上が見られなかったdcにおいて並列化でき、合計時間として計算速度が1.32倍早くなった。

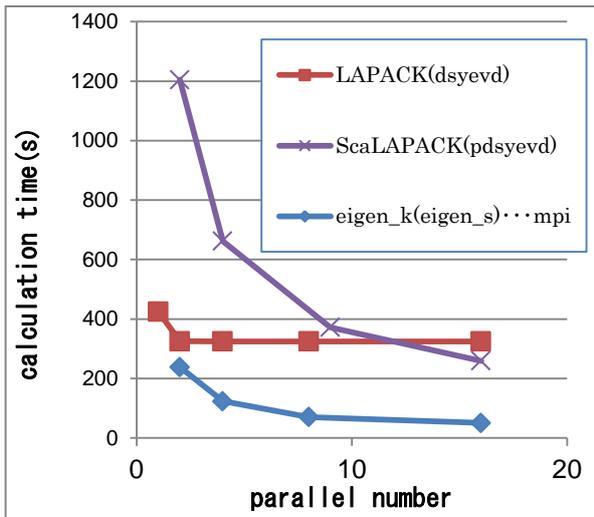


図1 固有値計算ライブラリの並列計算速度

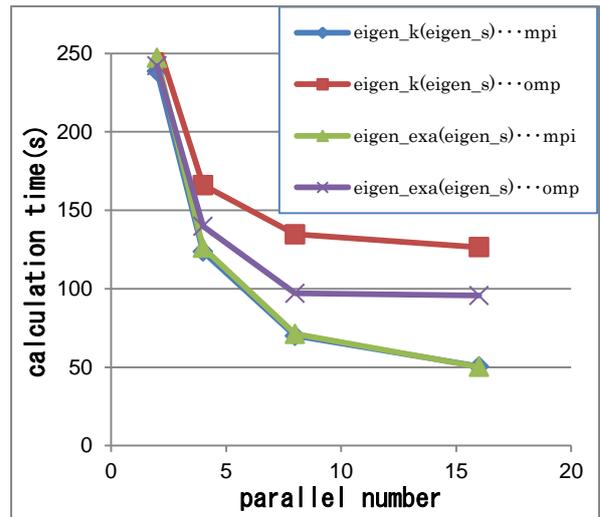


図2 Eigen\_sの並列化方式と計算時間

図3はネットワーク並列計算の結果である。OMPIは1GBイーサと10GBイーサの計算速度の相違はなく、いずれも1台のみの結果が早かった。IMPI,1GBイーサはOMPIよりも遅かったが10GBイーサは1GBイーサに比べ2.19倍、OMPI比較して1.82倍速度が向上し、ネットワーク並列なし並列数16と比較して1.50倍速度向上があった。

表2はXeonPhiでの計算結果である。XeonPhiの結果からは、36コア、6スレッド並列化がもっとも計算時間が短くなることがわかった。この詳細は当日に発表する。

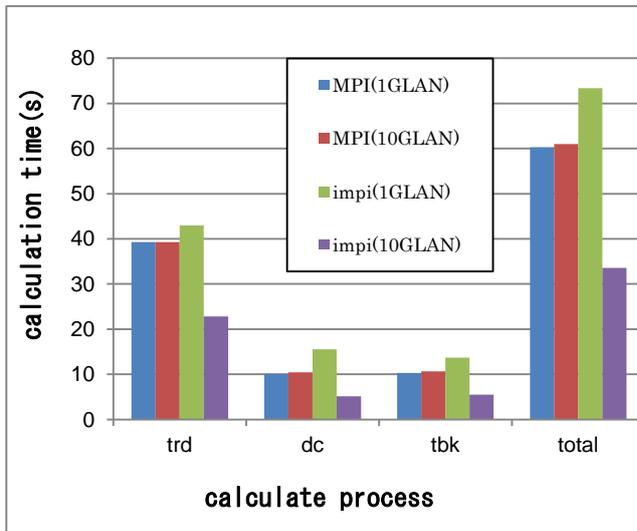


図3 ネットワーク並列計算結果

表2 XeonPhiでの計算結果(MPI+OMP)

np	TRD	D&C	TRDBAK	total (sec)	thread
1	150.52	292.73	27.37	470.64	228
2	117.7	482.75	23.97	624.46	114
4	79.67	253.86	20.78	354.32	57
9	67.02	168.67	22.92	258.63	25
16	61.29	110.84	18.84	190.97	14
25	62.06	55.73	18.18	136.05	9
36	62.2	36.08	18.59	116.88	6
42	67.97	32.35	18.53	118.94	5
48	68.73	42.11	26.43	137.28	4
49	65.51	36.08	18.61	120.29	4
64	74.02	45.44	20.96	140.42	3
81	84.08	85.98	74.08	244.27	2
100	79.79	120.69	115.97	316.68	2
225	210.04	912.83	1036.28	2159.21	1