

## 量子化学計算プログラムの並列高速化に関する研究

<sup>1</sup>北九大院工, <sup>2</sup>北九大工  
○高良泰夫<sup>1</sup>, 野上敦嗣<sup>2</sup>,

## Study on parallel speeding up of quantum chemistry calculation program

○Yasuo Takara<sup>1</sup>, Atsushi Nogami<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Graduate school of Environmental Engineering, The University of Kitakyusyu, Japan

<sup>2</sup> Faculty of Environmental Engineering, The University of Kitakyusyu, Japan

**【Abstract】** In the excitation state calculation, it is necessary to calculate eigenvalues of tens of thousands of dimensions or even small-scale molecules. Computation of matrix elements can be calculated in parallel, but it was difficult to parallelize eigenvalue problems. In recent years, numerical calculation libraries using a divide and conquer method excellent in parallelization have been developed.

In this presentation, Eigen\_exa was implemented as a semi-empirical excitation state calculation program SCI as an eigenvalue calculation solver and the parallel computation performance of matrix elements and eigenvalues in the excitation state calculation of tens of thousands of dimensions or more was investigated. The eigenvalue calculation by Eigen\_exa showed parallelization efficiency comparable to matrix element calculation. We report the details of the differences in parallel, the influence of LAN speed, the relationship between the number of cores and the parallelization rate.

**【序】** 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する必要がある。行列要素の計算は並列計算できるが、固有値問題は並列化が困難であった。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、本研究グループでは各種数値計算ライブラリ (Eigen\_exa, Eigen\_k, ScaLAPACK, LAPACK) の分割統治法の並列計算性能の評価を行ってきた。

本発表では、固有値計算ソルバーとして Eigen\_exa を半経験的励起状態計算プログラム SCI に実装し、数万次元以上の励起状態計算における行列要素および固有値の並列計算性能を調べた。Eigen\_exa による固有値計算は、行列要素計算にも匹敵する並列化効率を示した。並列方の相違、LAN 速度の影響、コア数と並列化率の関係について詳細を報告する。

**【方法 (実験・理論)】** 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> から開発の 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。

計算を実行した計算機は Xeon E 5-2687 W (16 cores, 3.10 GHz, 128 GB)、メニイコア

計算機として Xeon Phi 3120 A (57 cores, 1.1 GHz, 6 GB)と Xeon Phi 7250 (68 cores, 1.4 GHz, 16 GB)を用いて実行した。

**【結果・考察】** 図 1 に大規模な並列計算の性能を評価するため、Xeon E5-2687 W で OpenMPI と IMPI(IntelMPI)を用いて次元数を変更し計算を行った結果を示す。次元数が少ない場合は大きな差はないが、次元数が大きくなると OpenMPI と IMPI では差が大きくなり、次数が 71799 の時に最大で 1.74 倍 IMPI のほうが早くなった。

図 2 ではメニイコア計算機である XeonPhi(3120A)と XeonPhi(7250)を用いて計算速度の比較を行った。XeonPhi(3120A)と XeonPhi(7250)ともに MPI 並列数が 36,49 付近で最短となることが分かった。一方で MPI 並列数が 49 以降で計算時間が逆転することが分かった。このことから、メニイコア計算機ではより最適な並列数で計算を行う必要があることが分かった。

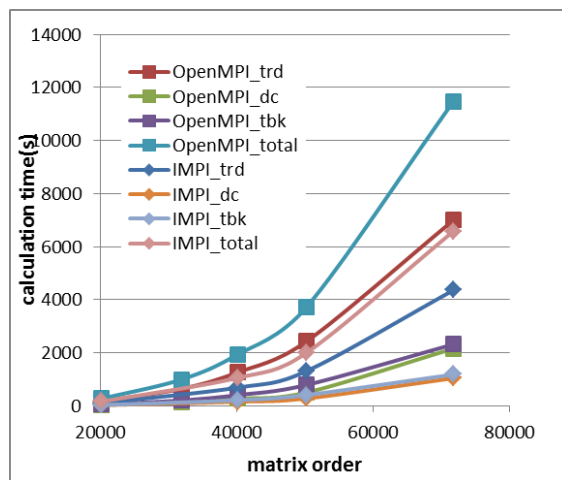


Fig1. Result of large-scale eigenvalue calculation by parallelization method

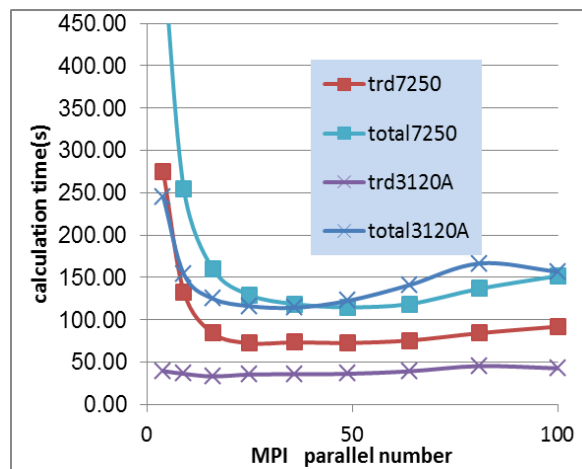


Fig2. Comparison by parallel number of XeonPhi (3120 A) and XeonPhi (7250)

eigen\_s を組込んだ SCI プログラムを mpi (OMPI) 並列計算した結果を表 1 に示す。行列の次数は 13943 である。並列化効率の良い行列要素の計算は mpi が僅かに遅いが、ともに飽和することなく 16 並列でも 13.5 倍前後高速であった。固有値計算では、dsyved の並列計算が飽和して 16 並列でも 5 倍以下の留まるのに対して、eigen\_s は飽和することなく 16 並列でも 12.4 倍と行列要素計算にも匹敵する並列化効率を示した。今後は、5 重対角化計算法 eigen\_sx に対する性能評価を行うとともに行列の次数とメモリ使用量についても調べる予定である。

**Table1.** Speed of mpi parallel computation of SCI using eigen\_s

parallel	dsyved (Openmp)				eigen_s (OMPI)			
	行列要素(amatrix)		対角化(adiag)		行列要素(amatrix)		対角化(adiag)	
	sec	ratio	sec	ratio	sec	ratio	sec	ratio
1	4786		1219					
4	1253	3.82	384	3.17	1261	3.80	232	5.25
8	648	7.39	284	4.29	660	7.25	129	9.45
12	447	10.71	248	4.92	461	10.38	106	11.50
16	351	13.64	249	4.90	355	13.48	98	12.44