

— コレスキー分解型 MP2,MP3 計算の Xeon Phi での性能評価 —

山崎大¹、齊藤天菜¹、○望月祐志¹、梅田宏明²、重田育照²¹立教大学理学部化学科 (〒171-8501 東京都豊島区 西池袋 3 丁目 34-1)²筑波大学 計算科学研究センター (〒305-8577 つくば市天王台 1-1-1)

【背景】

サーバ用 CPU のメニーコア化が進み、OpenMP による共有メモリ型のスレッド並列が普及しつつあるが、GPGPU などの数値演算加速器として併設して更に加速を得ようというアプローチが計算化学の分野でも注目を集めている[1]。GPGPU による 2 電子積分生成は先導事例[2,3]であり、国内でも HF や相関法の加速例[4,5]が報告されている。また、Xeon Phi については SC14 で (T)摂動計算が良スケールすることが示された[6]。こうした流れの中、私たちも Phi の有効利用を試みることにした。

【コレスキー分解型の摂動計算コード】

今回は最初のステップとして、2 電子積分のコレスキー分解(CD)[7]によって積分変換と縮約計算が行列積型で処理出来る 2 次と 3 次の摂動計算(CD-MP2 と CD-MP3)をテストすることにした。CD-MP2 のコードは ABINIT-MP に内蔵されているモジュール[8]を抜き出し、外部ファイルにダンプした CD 中間積分を読み込ませて実行する形で準備した。CD-MP3 コードは、通常積分による MP3 エンジン[9]とは別に新規作成して用いた(カーネル部は DGEMM 化されている)。

【テスト環境】

単一ノードで、主 CPU は Intel Xeon E5-2640(2.50 GHz, 6 cores)を 2 つ、加速器として Intel Xeon Phi 5110P(1.053GHz, 60cores)を 1 つ持つ。コードの並列化は OpenMP 系の指示行を挿入し、オフロードとネイティブの各モードで実行した。オフロードは、積分をロードした後の多重ループ部が対象である。基底関数は 6-31G*で、凍結無しで全電子を相関させた。

【結果】

表 1 と表 2 に、3 種の分子の CD-MP2 計算のオフロードとネイティブ実行のタイミングを示す。

MP2/OFR	ホルムアルデヒド		ホルムアミド		アラニン	
軌道数	34 (8 O / 26 V)		51 (12 O / 39 V)		104 (24 O / 80 V)	
スレッド数	time(s)	e(%)	time(s)	e(%)	time(s)	e(%)
1	1.43	—	1.85	—	4.55	—
2	1.58	45%	1.79	52%	3.76	61%
4	1.40	25%	1.83	25%	3.55	32%
8	1.39	13%	1.70	14%	6.66	9%
16	1.39	6%	1.70	7%	4.41	6%
32	1.57	3%	2.05	3%	3.57	4%

表 1 : CD-MP2 のオフロード実行でのタイミング (e は比 1 スレッドの加速効率)。

MP2/NTV	ホルムアルデヒド		ホルムアミド		アラニン	
軌道数	34 (8 O / 26 V)		51 (12 O / 39 V)		104 (24 O / 80 V)	
スレッド数	time(s)	e(%)	time(s)	e(%)	time(s)	e(%)
1	0.10	—	0.35	—	3.83	—
2	0.11	45%	0.24	71%	2.81	68%
4	0.09	29%	0.27	32%	2.33	41%
16	0.11	6%	0.20	11%	6.51	4%
96	0.48	0%	0.57	1%	1.03	4%
236	0.33	0%	1.28	0%	3.27	0%

表 2 : CD-MP2 のネイティブ実行でのタイミング (e は比 1 スレッドの加速効率)。

CD 化された MP2 計算では演算量が少なく計算時間も短いため、残念ながらスレッド数を増やしても有効な加速は得にくい、これはある意味予想通りではある。次に CD-MP3 の結果を見る。

MP3/OFR	ホルムアルデヒド		ホルムアミド		アラニン	
軌道数	34 (8 O / 26 V)		51 (12 O / 39 V)		104 (24 O / 80 V)	
スレッド数	time(s)	e(%)	time(s)	e(%)	time(s)	e(%)
1	1.73	—	13.05	—	422.69	—
2	0.92	94%	7.24	90%	226.51	93%
4	0.58	74%	4.45	73%	115.29	92%
8	0.46	48%	2.98	55%	55.03	96%
16	0.51	21%	2.30	35%	39.26	67%
32	0.54	10%	2.06	20%	27.88	47%
64	0.68	4%	2.78	7%	24.81	27%

表 3 : CD-MP3 のオフロード実行でのタイミング (e は比 1 スレッドの加速効率)。

MP3/NTV	ホルムアルデヒド		ホルムアミド		アラニン	
軌道数	34 (8 O / 26 V)		51 (12 O / 39 V)		104 (24 O / 80 V)	
スレッド数	time(s)	e(%)	time(s)	e(%)	time(s)	e(%)
1	1.59	—	13.10	—	450.11	—
2	0.89	89%	7.29	90%	239.95	94%
4	0.56	71%	4.53	72%	131.32	86%
8	0.43	47%	3.09	53%	78.01	72%
16	0.38	26%	2.73	30%	49.72	57%
32	0.47	10%	2.44	17%	36.52	39%
64	0.60	4%	2.71	8%	31.28	22%

表 4 : CD-MP3 のネイティブ実行でのタイミング (e は比 1 スレッドの加速効率)。

短縮計算のオーダーが MP2 に比して 2 つ上がる MP3 では、ホルムアルデヒドでも 4 スレッドまで、アラニンでは 16 スレッドまでは有意な時間短縮が見られる。効率で見るとオフロードとネイティブの差は小さく、コードの汎用性や使い勝手の上では前者の方が好ましいと思われる。当日のポスターでは、より大型の分子についてもタイミングを紹介する予定である。

次のステップとしては、CD 中間積分の生成そのものを Phi によって加速可能かどうか調べることが考えられるが、そのためには ABINIT-MP 本体の修正を行う必要がある(それなりの工数が必要)。将来的には、先行事例[4]のように FMO 計算のホットスポットを Phi の上で処理することを試みたい。

【参考文献】

- [1] W. A. de Jong, E. Bylaska, N. Govind, C. L. Janssen, K. Kowalski, T. Müller, I. M. B. Nielsen, H. J. J. van Dam, V. Veryazov, R. Lindh, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **12** (2010) 6896.
- [2] K. Yasuda, *J. Comp. Chem.* **29** (2008) 334.
- [3] I. S. Ufimtsev, T. J. Martinez, *J. Chem. Theory Comp.* **4** (2008) 222.
- [4] 梅田宏明, 埜敏博, 庄司光男, 朴泰祐, 稲富雄一, *情報処理学会論文誌コンピューティングシステム (ACS)*, **6** (2013) 26.
- [5] 吉川武司, 中井浩巳, 分子科学討論会 2013, 4E01 (2013/9/27).
- [6] E. Apra, M. Klemm, K. Kowalski, *SC14 presentation*, <<http://bit.ly/1GVWwV3>>.
- [7] T. B. Pedersen, F. Aquilante, R. Lindh, *Theor. Chem. Acc.* **124** (2009) 1.
- [8] Y. Okiyama, T. Nakano, K. Yamashita, Y. Mochizuki, N. Taguchi, S. Tanaka, *Chem. Phys. Lett.* **490** (2010) 84.
- [9] Y. Mochizuki, K. Yamashita, K. Fukuzawa, K. Takematsu, H. Watanabe, N. Taguchi, Y. Okiyama, M. Tsuboi, T. Nakano S. Tanaka, *Chem. Phys. Lett.* **493** (2010) 346.