

— 並列分子軌道法計算プログラム SMASH の Xeon Phi による加速性能評価 —

○齊藤天菜¹、望月祐志¹、石村和也²

¹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分子科学研究所 (〒444-8585 愛知県岡崎市明大寺町字西郷中 38 番地)

【背景】

計算化学の分野における計算リソースとして、CPU はマルチコア化が進み、それに合わせて OpenMP による共有メモリ型のスレッド並列も普及している。分子軌道計算の世界でも、SMASH[1]のように極めて高い並列性能を持つソフトが種々開発されている[2]。近年では NVIDIA の GPGPU 等の数値演算加速器を利用し、更に加速を得ようというアプローチも注目を集めており、国内でも先導事例も報告されている[3,4]。他方、Intel の Xeon Phi は次世代モデルの大幅なアップデート[5]やスパコンでの採用が予定されている[6]。こうした流れは今後の並列化分子軌道計算のあり方にも影響を与えると考えられるため、私たちは今回先ず、SMASH を Xeon Phi (Knights Corner)を用いて評価することにした。

【ベンチマーク手法】

Xeon Phi にはオフロードとネイティブの二通りの実行方法が用意されているが、オフロード実行ではメモリ間通信がボトルネックとなること示されている[7]ので、ベンチマークは前者で行った。付属のネイティブ実行用ツールを用いず、SMASH の実行バイナリを Phi 用に調製し、実行バイナリ及び関連ライブラリを Phi 上にコピーして実行環境を準備した。モデル分子として、スタッキング(ST)及び水素結合(HB)をしたアデニン-チミン(AT)、シトシン-グアニン(CG)の各塩基対、炭素から成る分子(アダマンタン、スーパーアダマンタン、C60)を用意し、B3LYP でエネルギーと勾配の計算を行った。基底関数は 6-31G*と cc-pVDZ とした。

【テスト環境】

単一ノードで、主CPUはXeon E5-2640(2.50 GHz, 6 cores)を2つ、Xeon Phi 5110P(1.053 GHz, 60 cores)を1つ持つ。ハイパースレッド(HT)領域での効率は60スレッドを基準として求めた。

【結果】

表1にアダマンタンの結果を示す。

Sample	Runttype	Basis	Thr.	Total(s)	加速率(:60)(%)	並列化(:60)(%)
アダマンタン	Energy	6-31G*	60	35.0	100.0	100.0
			120	24.4	143.4	71.7
			240	21.9	159.8	40.0
		cc-pVDZ	60	63.8	100.0	100.0
			120	44.4	143.7	71.8
			240	38.4	166.1	41.5
	Gradient	6-31G*	60	57.9	100.0	100.0
			120	39.8	145.5	72.7
			240	34.7	166.9	41.7
		cc-pVDZ	60	109.7	100.0	100.0
			120	75.5	145.3	72.6
			240	63.5	172.8	43.2

表1 : アダマンタンのエネルギー、勾配計算の結果

勾配計算での演算量はエネルギー計算のおおよそ二倍となり、cc-pVDZ では 6-31G*と比較して演算量が増えるため、計算の粒度が高くなり有効な加速が得られた結果となった。SMASH の基本性能は高く、相対的に軽い 6-31G*のエネルギー計算でも並列化効率の下がり幅は小さい。

表2にスーパーアダマンタン、C60の勾配計算の測定結果をまとめる。

Sample	Basis	Thr.	Total(s)	加速率(:60)(%)	並列化(:60)(%)
S-アダマンタン	6-31G*	60	1809.2	100.0	100.0
		120	1208.4	149.7	74.9
		240	977.0	185.2	46.3
	cc-pVDZ	60	3452.4	100.0	100.0
		120	2314.0	149.2	74.6
		240	1875.9	184.0	46.0
C60	6-31G*	60	3487.5	100.0	100.0
		120	2375.5	146.8	73.4
		240	2024.3	172.3	43.1
	cc-pVDZ	60	5209.1	100.0	100.0
		120	3522.3	147.9	73.9
		240	2995.6	173.9	43.5

表 2 : スーパーアダマンタンと C60 の勾配計算の結果

スーパーアダマンタンは 2 電子積分のカットオフが起こりづらい構造であり、計算粒度が高く良い並列化効率が得られた。これに対して、C60 ではカットオフが起こりやすいことから粒度は低い、こちらも 240 スレッド実行時に加速率では約 10%の低下とそれ程悪くない値が得られた。

表 3 に塩基対の勾配計算の結果を示す (ここでは AT のみ)。

Sample	Basis	Thr.	Total(s)	加速率(:60)(%)	並列化(:60)(%)
AT(ST)	6-31G*	60	200.1	100.0	100.0
		120	138.0	145.0	72.5
		240	116.4	171.9	43.0
	cc-pVDZ	60	307.2	100.0	100.0
		120	211.4	145.3	72.7
		240	175.6	174.9	43.7
AT(HB)	6-31G*	60	141.7	100.0	100.0
		120	97.4	145.5	72.7
		240	83.5	169.7	42.4
	cc-pVDZ	60	211.3	100.0	100.0
		120	145.2	145.5	72.8
		240	122.5	172.5	43.1

表 3 : 塩基対の勾配計算の結果 2

塩基対の計算結果では、6-31G*基底の場合にはスタッキングと水素結合による差異は小さいが、cc-pVDZ ではその差はやや拡大する。これは、前者の構造の方が積分カットオフが相対的に抑制される結果、粒度がより整うためと思われる。

メニーコアの演算加速器として、Xeon Phi のネイティブ実行ではソフトウェアの移植性が高いが、今回の SMASH は良好な結果を示した。今後は、ABINIT-MP などの他のプログラムの Phi 環境でのベンチマークも試みつつ、改良された新世代(Knights Landing)の登場を待ちたい。

【参考文献】

- [1] 石村和也, “SMASH” <<http://smash-qc.sourceforge.net/>>.
- [2] 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.
- [3] 梅田宏明, 埴敏博, 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.
- [4] 吉川武司, 中井浩巳, 分子科学討論会 2013, 4E01 (2013/9/27).
- [5] <<http://intel.ly/1QKcDtx>> (参照 2016/1/29)
- [6] <<http://bit.ly/20s8zBJ>> (参照 2016/1/16).
- [7] 山崎大, 齊藤天菜, 望月祐志, 梅田宏明, 重田育照, 本学会 2015 春期, 1P01 (2015/5/28).