

Platypusによるhybrid-QM/MDと DFTによる超並列計算

大阪大学蛋白研 米澤 康滋
大阪大学理学部 山中 秀介
○日本電気株式会社 中田 一人
2011.03.05

Platypus-QM 量子化学計算コンポーネント

- 2種類の使い方
 - QM/MD連成計算プログラムの中で呼ばれるQM計算
エネルギー&力の計算：RHF, RDFT, CASSCF, CIS
 - QM単独計算
エネルギー計算：上記および CASCI, CIS(D), CIS-DFT, MP2, ...
- 開発状況など
 - FOTRAN77, Fortran90/95
 - 従来版：Flat MPI版, SIMD未対応, ~8192並列
 - 設計中：
 - ⇒ ハイブリッド並列版へ
 - ⇒ SIMD対応へ
 - ⇒ 1万コア以上の大規模クラスタ向けへ

要 求 事 項

高 度 化 手 段

	時間	手法的 精度	QM分子 規模	QM並列 規模	SIMD	OpenMP +MPI
QM/MD 連成計算	1 秒	低	小～中	～1千 ～1万	必須	必須
QM単独 計算	制限 なし	高	大～超大	1万～	必要	必須

課題

QM/MD連成計算：

計算時間1秒は、かなり厳しい要求。現状では、10秒が目標。

要求を満たすために、基底関数系と分子規模が制限される。

QM単独計算：

基底関数系と分子規模が大きい場合、使用メモリ量が問題に。高機能化も必須。

高度化の進め方

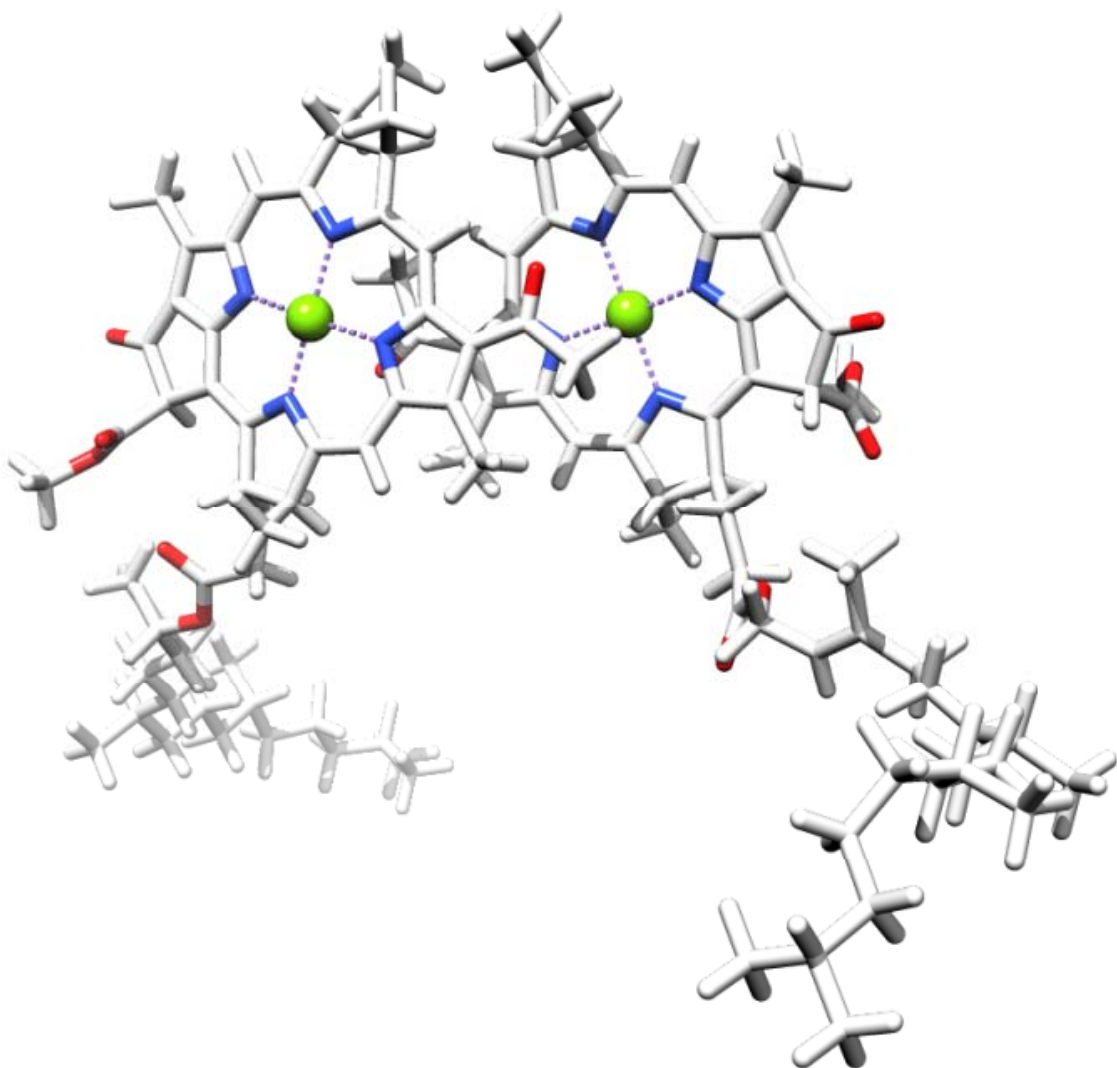
1. RICCにて

- 並列性能・演算性能・通信時間・メモリ使用量の測定分析。
測定は従来のFlat MPI版で実施。
QM/MD連成計算とQM単独計算を大規模分子で測定。
 - ハイブリッド並列化の設計。
試作コードにて分析。
 - SIMD化の設計。
Intel CPU向けの試作コードにて分析。
- 現在ここまで。

2. 次世代スパコンにて

- ハイブリッド並列・SIMD・通信などの特性を調査し、
高度化施策を検討・実施。

Flat MPIによる測定



光合成活性中心
クロロフィル2量体

原子数 280

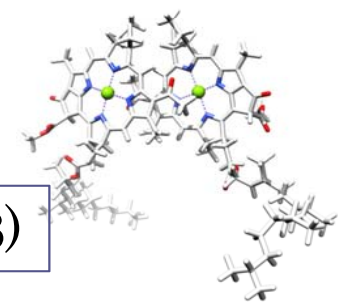
点電荷数 30904

次の3つの測定結果を示します

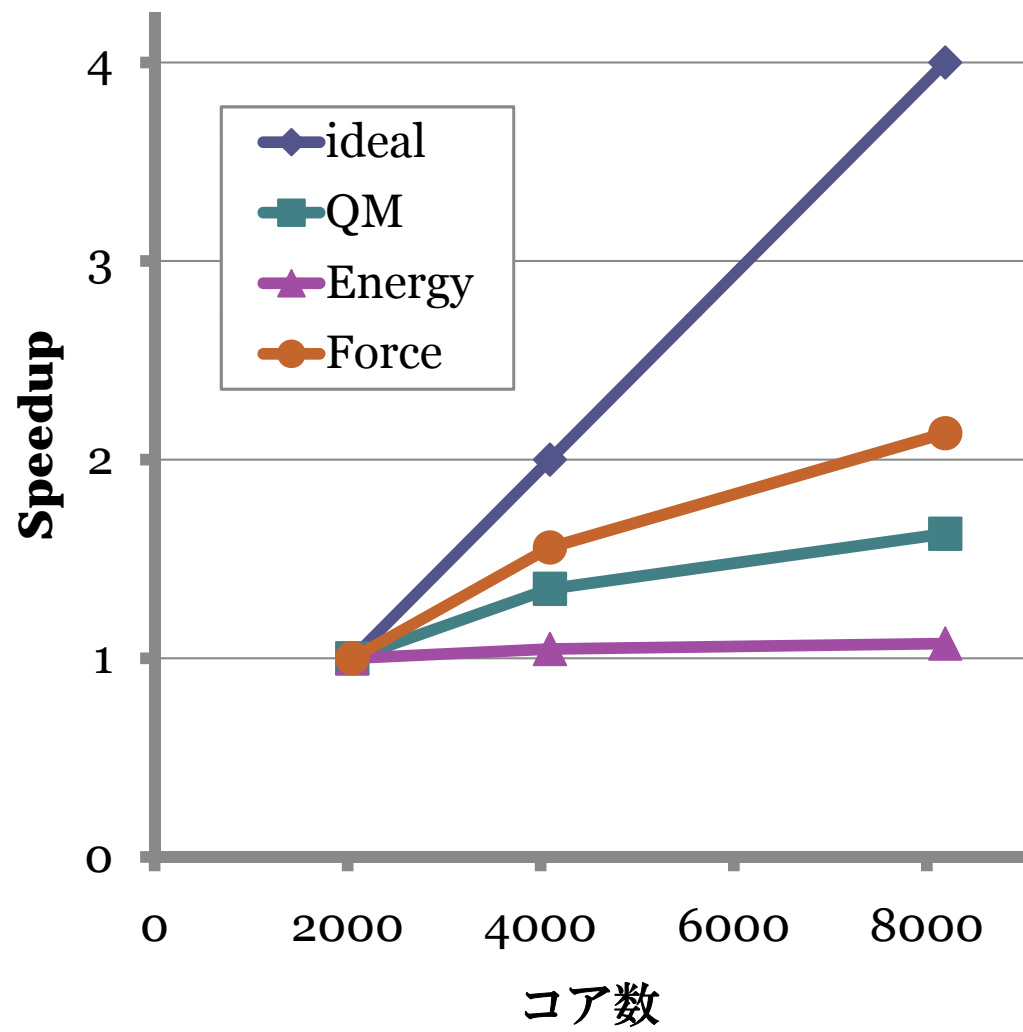
QM/MD連成	RDFT	# 1
	CASSCF	# 2
QM単独	CIS-DFT (*1)	# 3

(*1) S. Grimme, Chem. Phys. Lett. 259 (1996) 128-137.

測定結果 ～QM/MDのRDFT～



cc-pVDZ (AO数=2728)



	並列化率 (%)
QM	99.954
Energy	99.521
Force	99.980

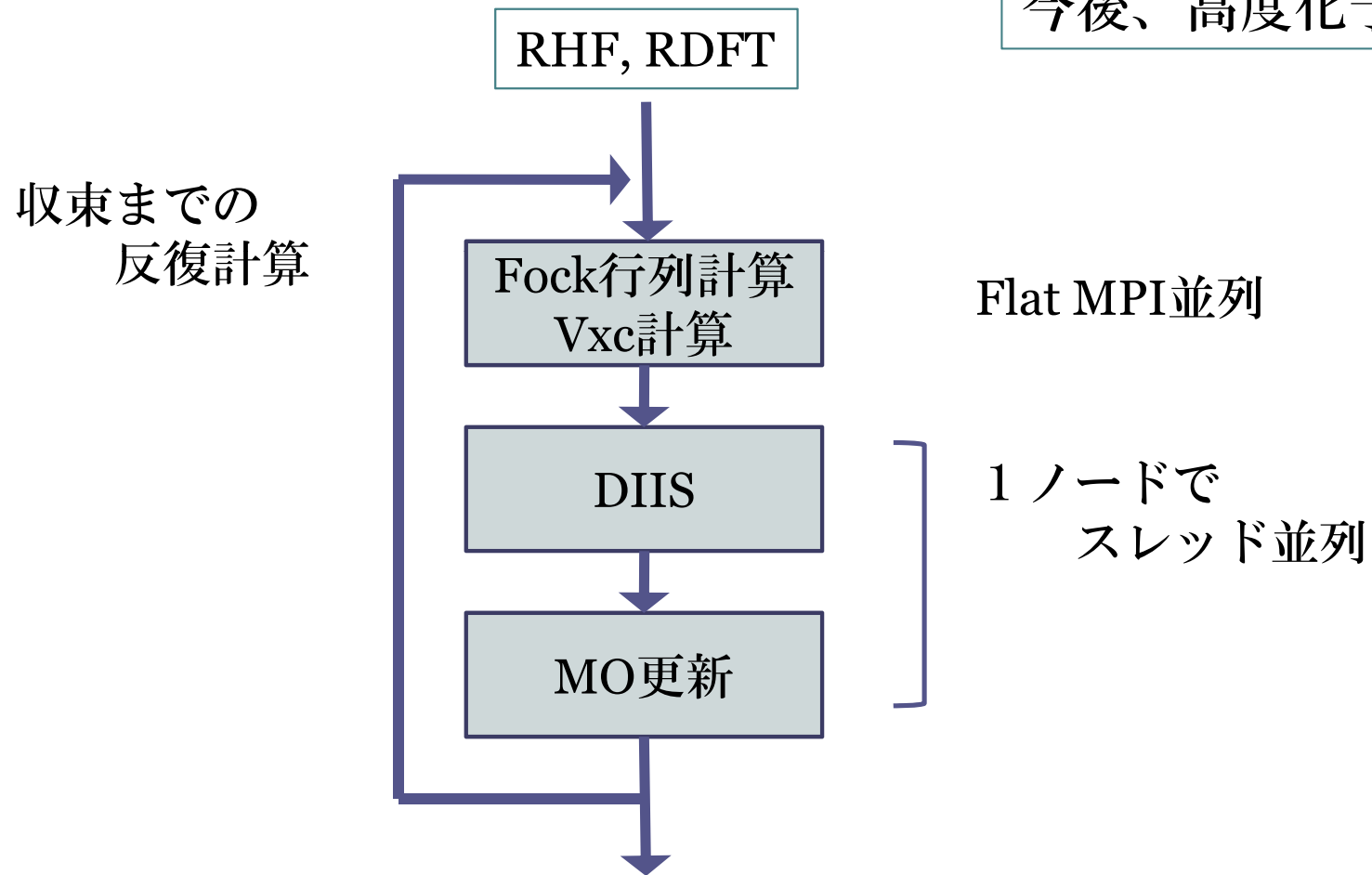
コア数	実効効率 (%)
2048	6.47
4096	4.48
8192	2.70

134.7秒

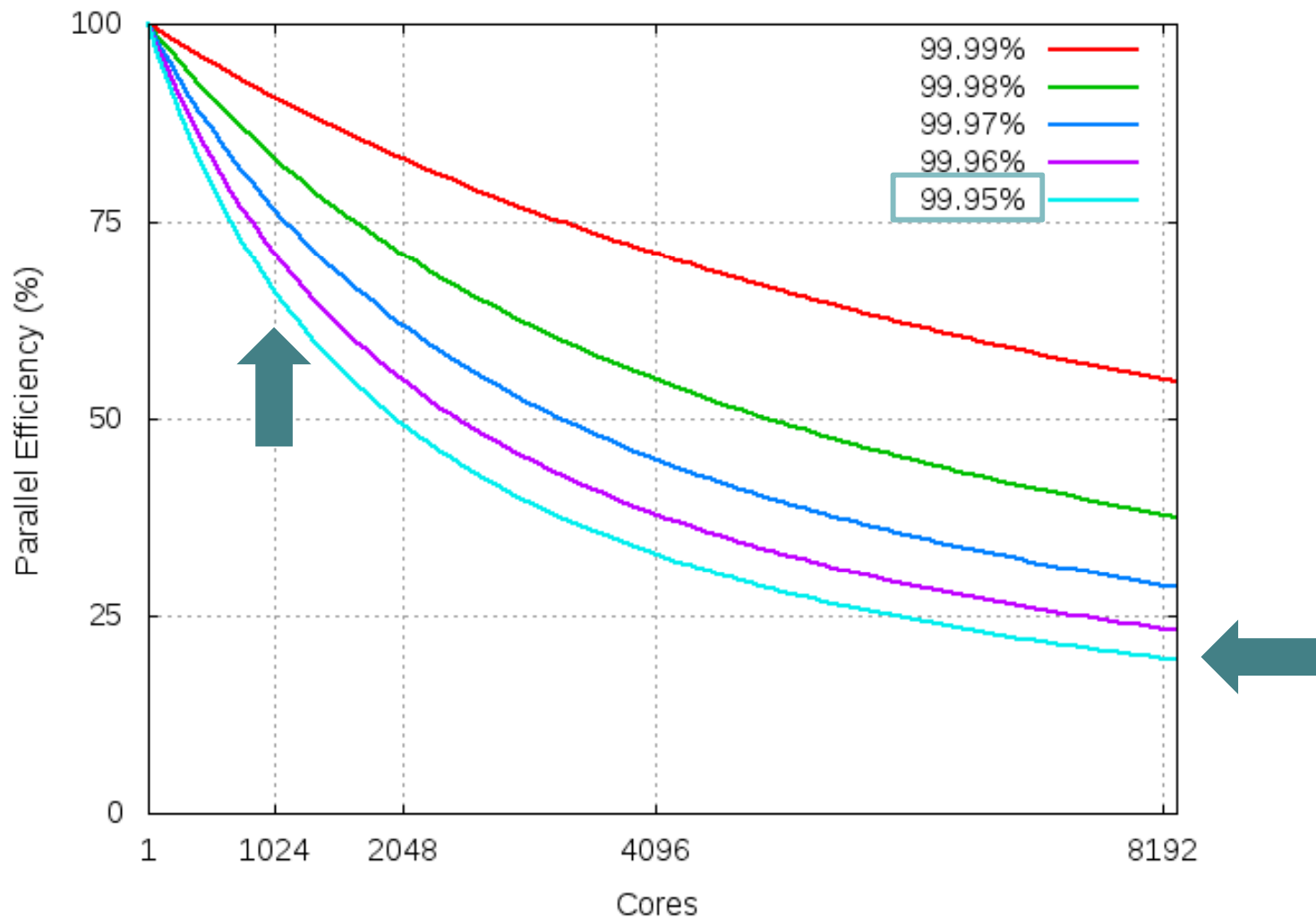
[参考値：C₂₄₀, RDFT/cc-pVDZ (AO数=3600)では、並列化率 99.972% (2048-4096コア)。8192コアはメモリ超過]

Energy計算は、Force計算より並列化率が低い。

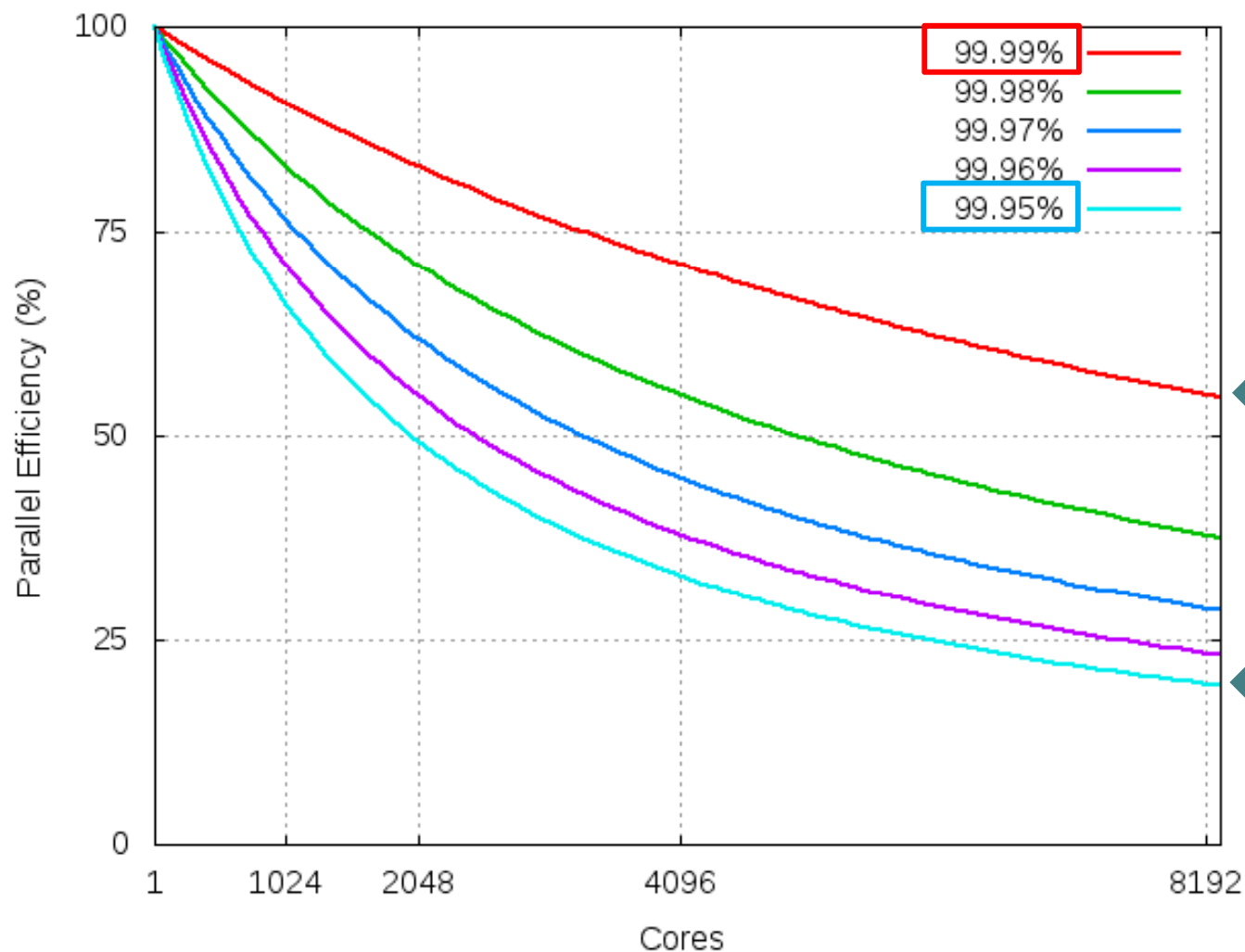
今後、高度化予定。



現在の並列化効率



目標となる並列化効率の値



QM/MD連成計算

QM並列規模：
~ 1千
~ 1万

目標値：
99.95% ~ 99.99%

目標となる効率の値

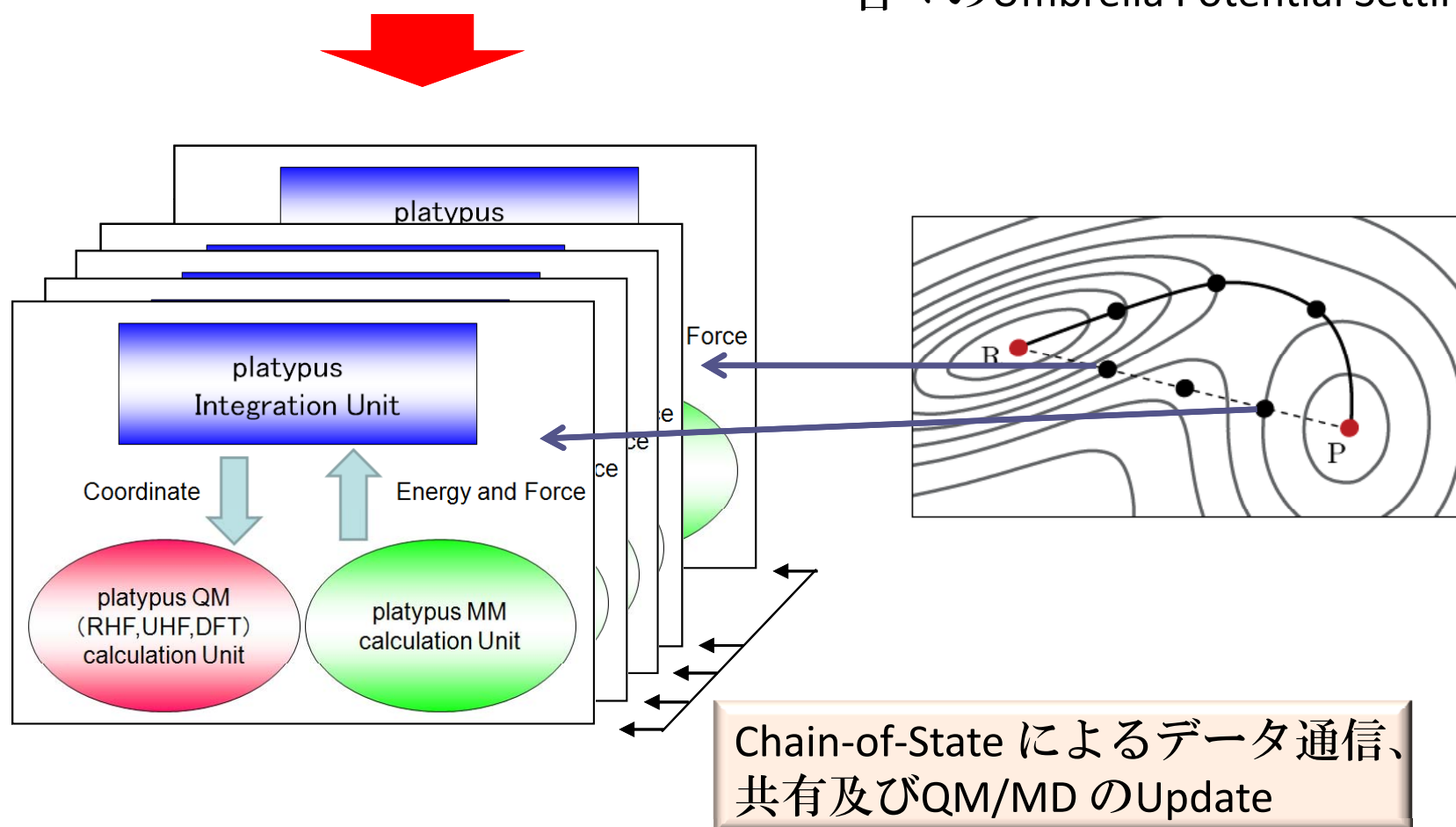
次世代スパコン

理論ピーク性能 10 PetaFLOPS に対して

5 % ? 10 % ? 15 % ? 20 % ?

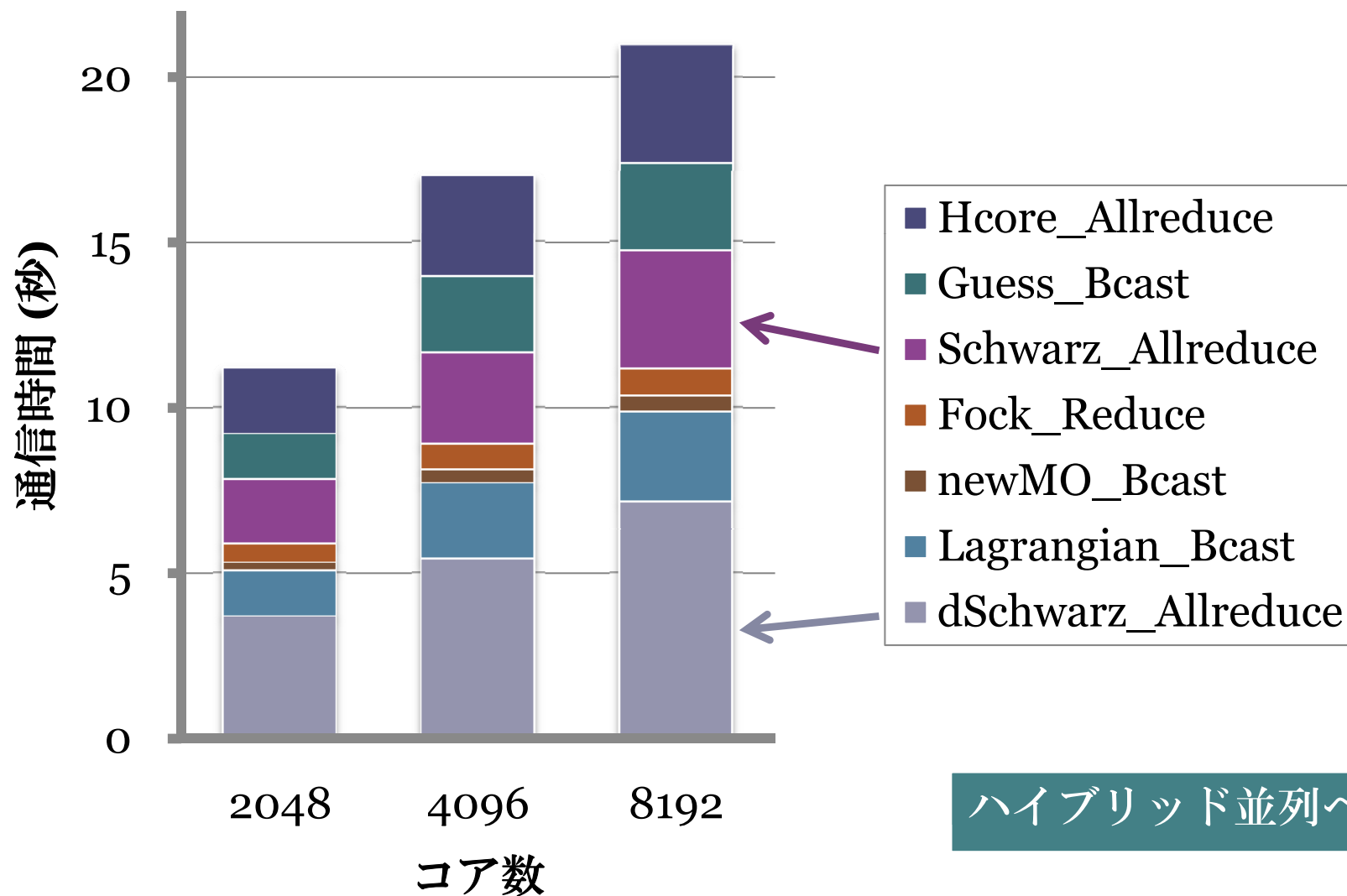
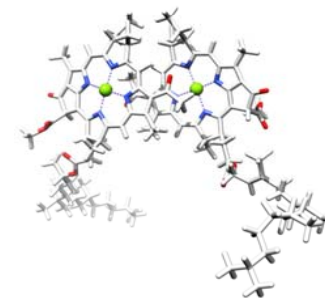
粗結合MPI通信による“超多重 - 並列” QM/MD の実現

MPI分割による、QM/MD複製（初期化、
各々のUmbrella Potential Setting）



測定結果

～QM/MDのRDFT～



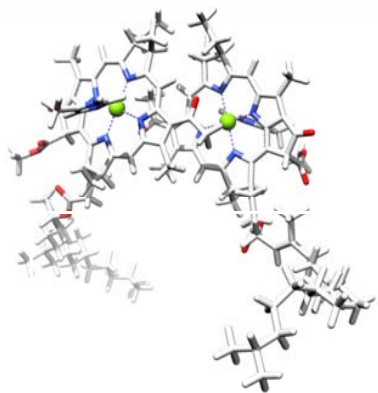
Schwarzの経過時間（秒）

		コア数		
		2048	4096	8192
Schwarz	計算	0.046	0.037	0.586
	Allreduce	1.920	2.763	3.574
dSchwarz (一次微分)	計算	0.251	0.180	0.132
	Allreduce	3.686	5.419	7.131

データ転送するよりも、冗長に計算した方がよい。
ハイブリッド並列へ。

測定結果

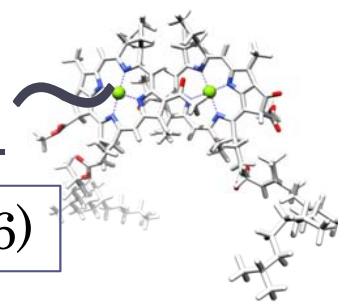
～BLAS/LAPACK～



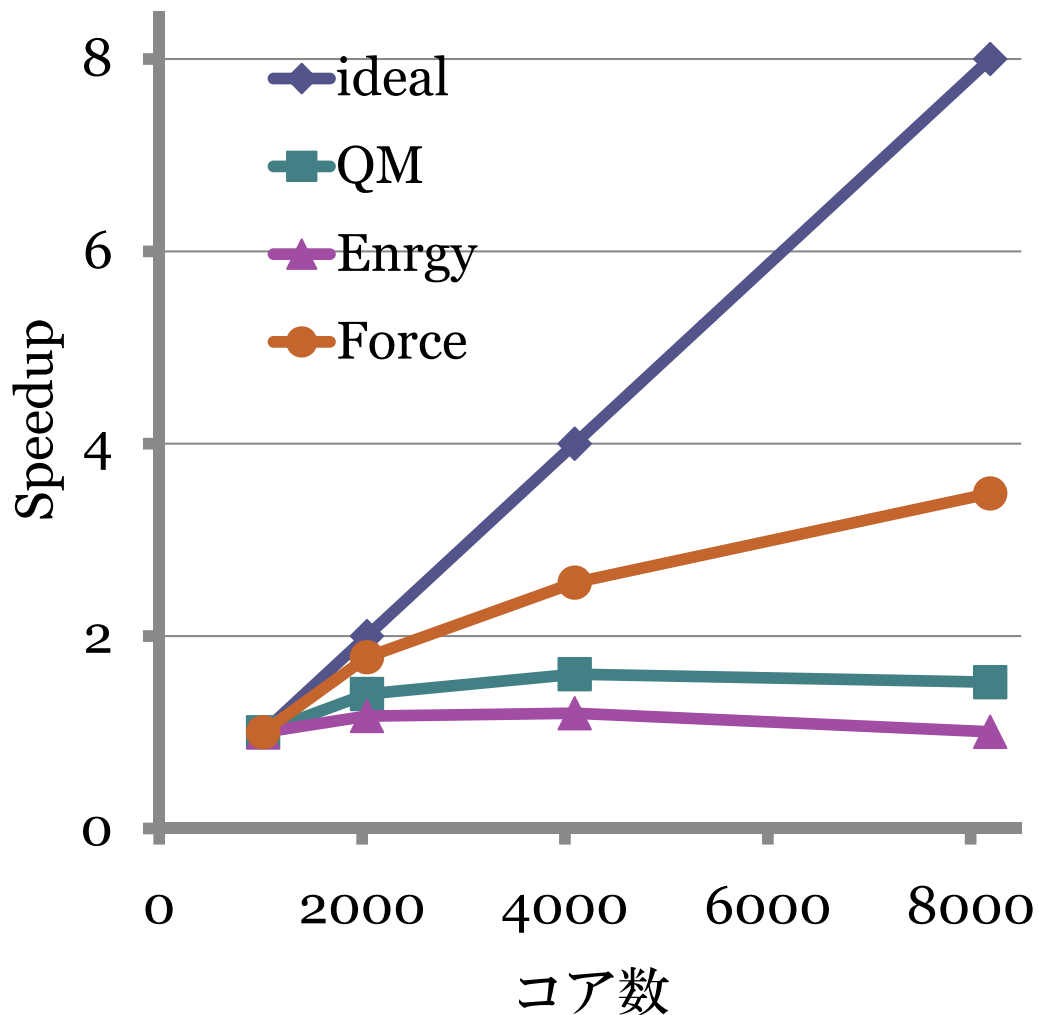
スペシャルペア+ヒスチジン側鎖 / 6-31G*
(AO数=2488)

	BLAS / LAPACK	1スレッド (秒)	8スレッド (秒)	Speedup
コレスキー分解	DPOTRF DTRTRI	1.260	0.495	2.55
DIIS	DSYMM DGEMM DGESV DAXPY	17.449	2.551	6.84
MO更新	DSYMM DGEMM DSYEVD	18.634	4.152	4.49
Lagrangian行列	DSYMM DGEMM	6.143	0.789	7.79

測定結果 ～QM/MDのCASSCF～



MINI-4 (AO数=816)



	並列化率 (%)
QM	99.849
Energy	86.444
Force	99.978

CAS(12,12)

コア数	実効効率 (%)
1024	6.76
2048	4.64
4096	2.68
8192	1.32

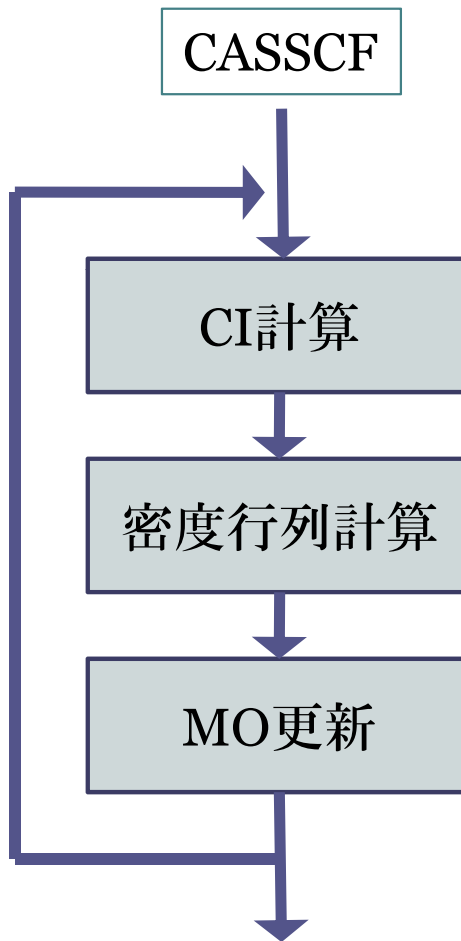
99.6秒

計算規模がコア数に比べて小さい。
Energy計算の方が先に低下。

Energy計算は、Force計算より並列化率が低い。

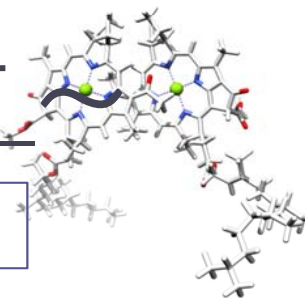
今後、高度化予定。

収束までの
反復計算

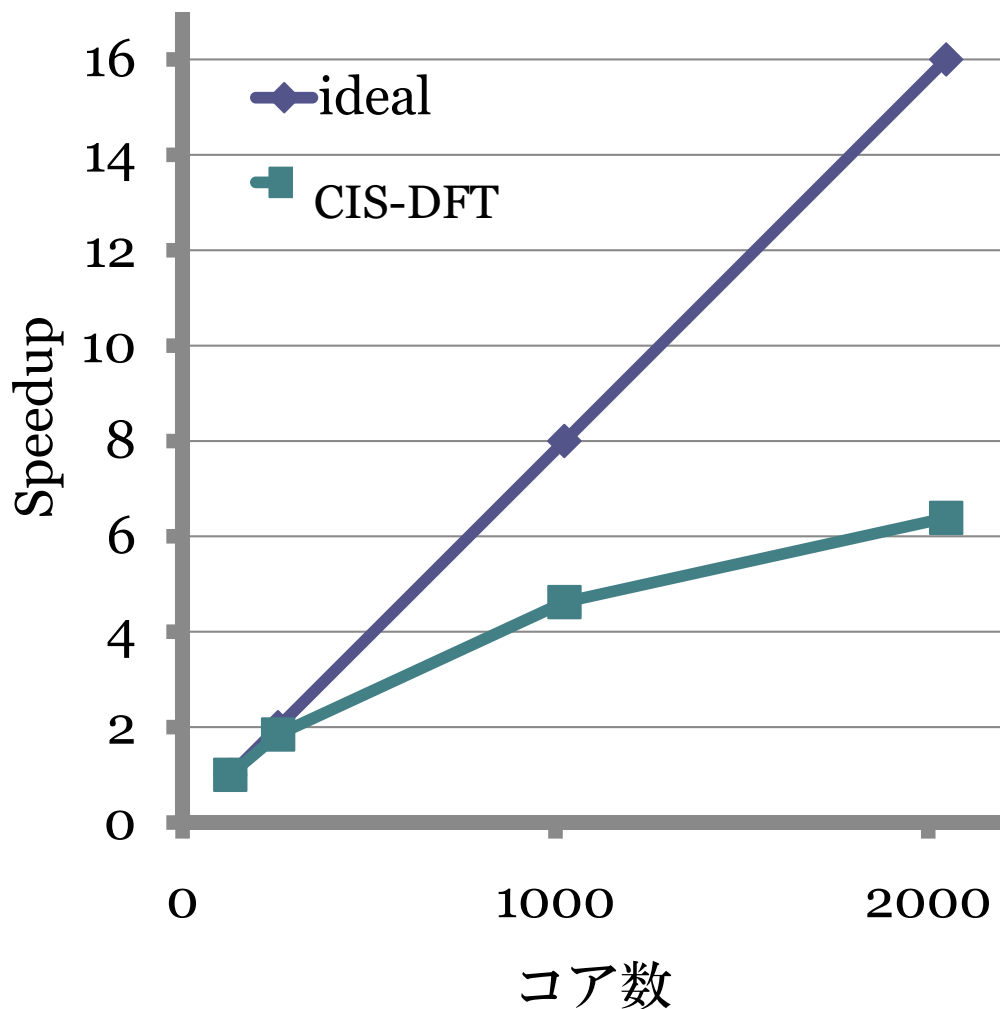


RHF, RDFTに比べて
かなり複雑。

測定結果 ～ エネルギー計算CIS-DFT



STO-3G (AO数=816)



	並列化率 (%)
QM	99.913

コア数	実効効率 (%)
128	50.08
256	46.21
1024	29.22
2048	19.78

高い

計算規模がコア数に比べて小さい
2048を超えると高速化されない

AO基底からMO基底への変換

$$(ij | kl) = \sum_{rstu}^{AO} C_{ri} C_{sj} C_{tk} C_{ul} (rs | tu)$$

難しさ：

1個のMO基底の積分 $(ij | kl)$ を求めるには、
全てのAO基底の積分 $(rs | tu)$ が必要

独自アルゴリズム (*1)：

- (tu) を分割し、各プロセスで $(rs | \tilde{t}\tilde{u})$ を担当

$$(ij | \tilde{k}\tilde{l}) = \sum_{rs}^{AO} \sum_{tu}^{AO'} C_{ri} C_{sj} C_{tk} C_{ul} (rs | \tilde{t}\tilde{u})$$

- 最後にMPI_Reduce

DGEMM使用

$$(ij | kl) = \sum^{nproc} (ij | \tilde{k}\tilde{l})$$

(*1) K.Nakata, et al. J.Comput.Appl.Math, **149**, 351 (2002). 特許3990130.

高コスト部分

- 2電子積分の計算

$$(rs | tu)$$

- Fock行列の計算

$$F_{rs} = h_{rs} + \sum_{tu}^{AO} D_{tu} [2(rs | tu) - (rt | su)]$$

- AO基底からMO基底への変換

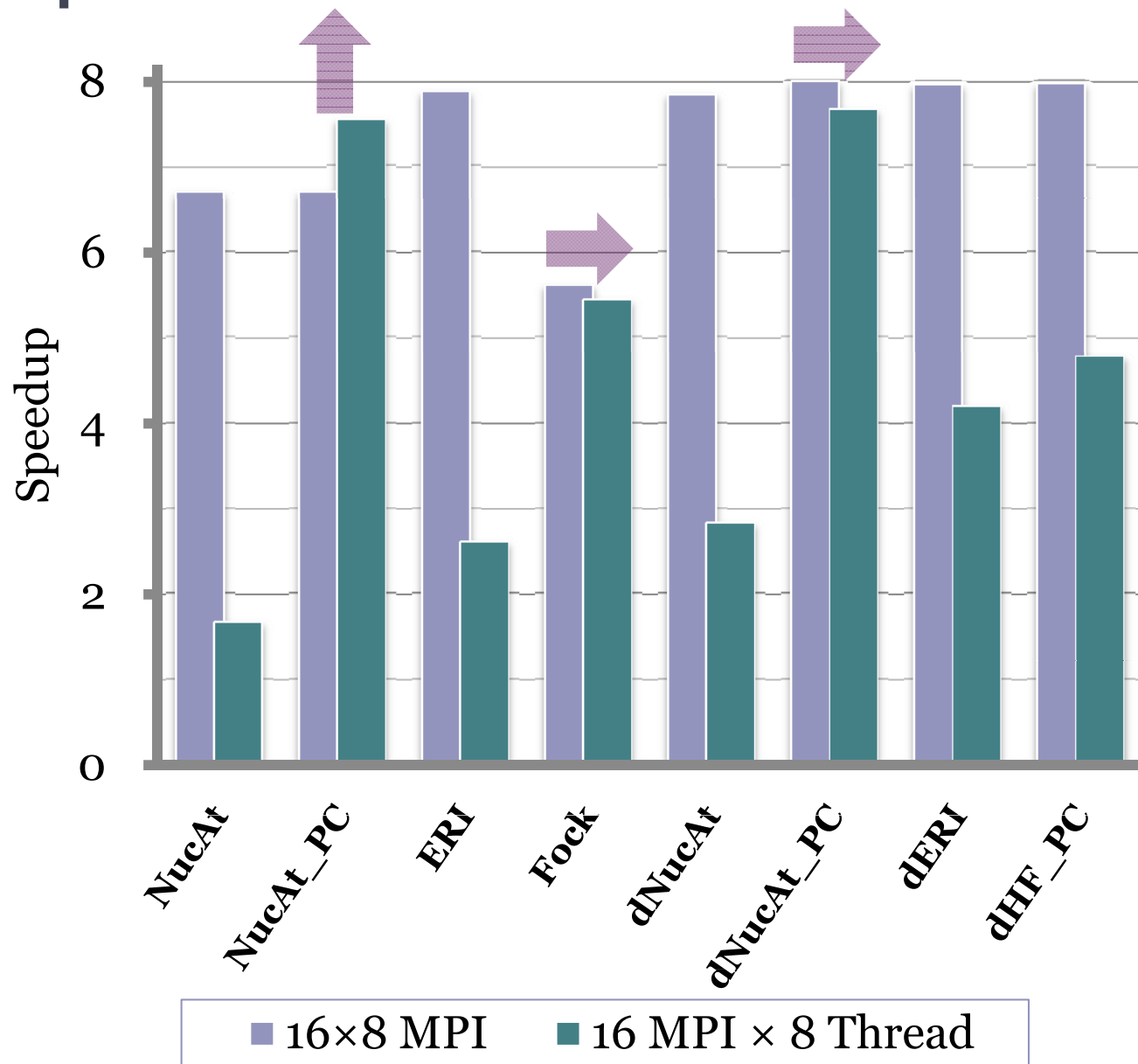
$$(ij | kl) = \sum_{rstu}^{AO} C_{ri} C_{sj} C_{tk} C_{ul} (rs | tu)$$

- 一次微分積分の計算

$$(rs | tu)'$$

など

OpenMP実験 ~16MPIプロセス並列からのspeedup~

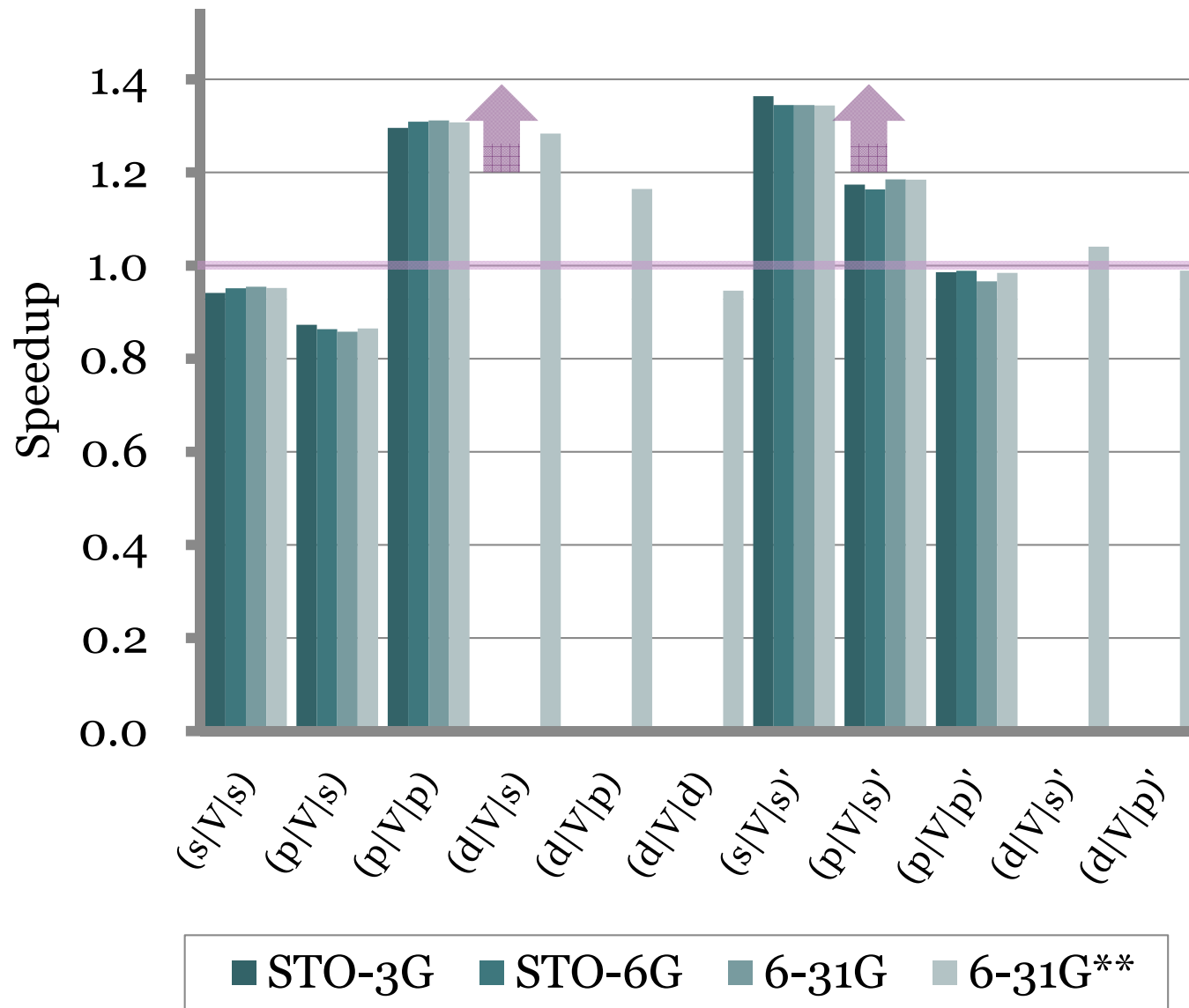


Flat MPI版を使用し、
単純なOpenMPによる
実装で実験。
ファーストタッチは
未考慮。

ハイブリッド並列版の
設計中。

次世代スパコンの
スレッド並列における
オーバーヘッド低減に
期待。

SIMD実験 ~オリジナルからのspeedup~

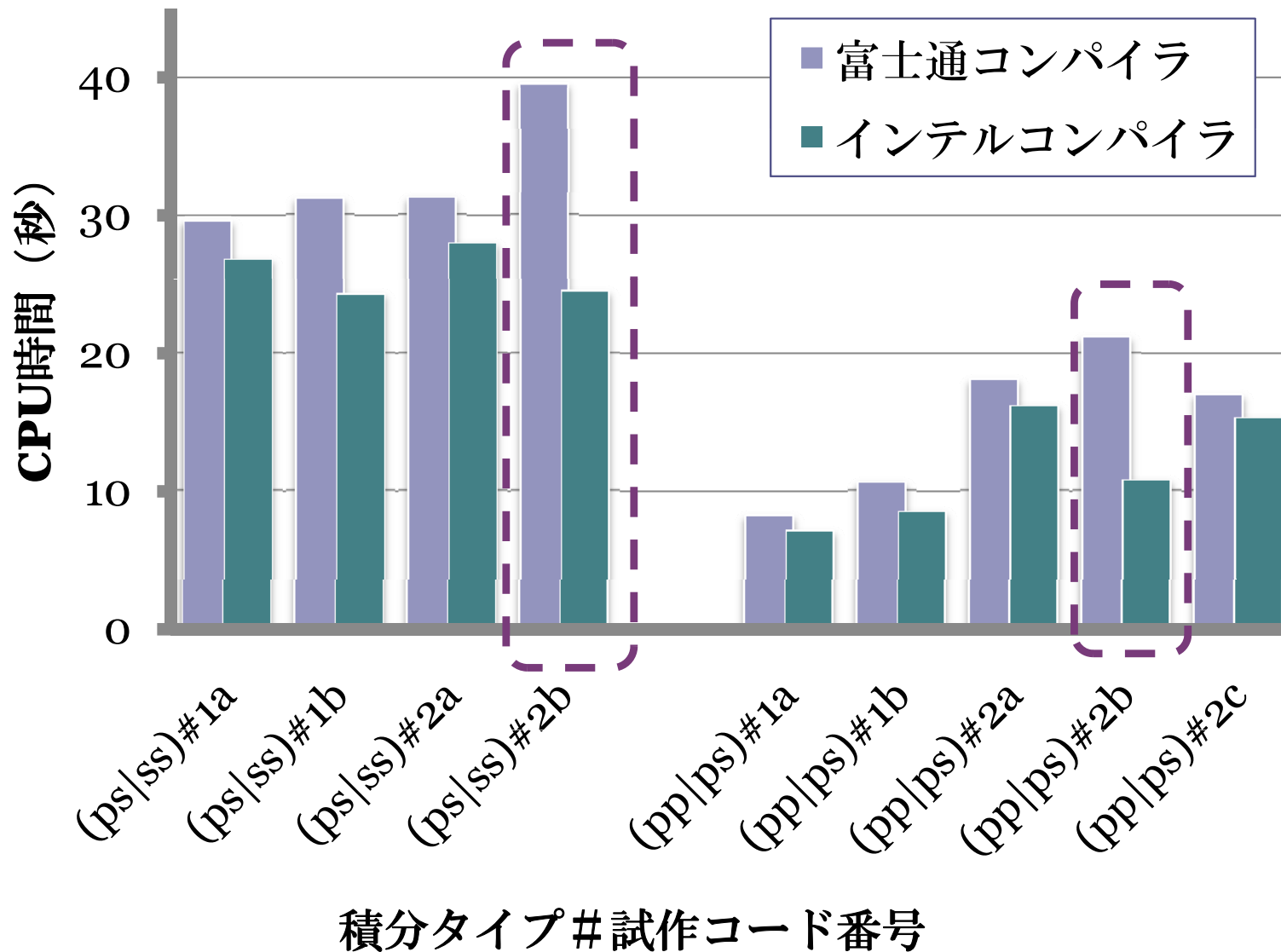


Intel CPU向けに、
 ループ内のif文をなくす
 単純なループ分割の
 実装で実験。

SIMD対応版の設計中。

次世代スパコンの
 マスク付きSIMD化に
 期待。

SIMD実験 ～試作中のコード～

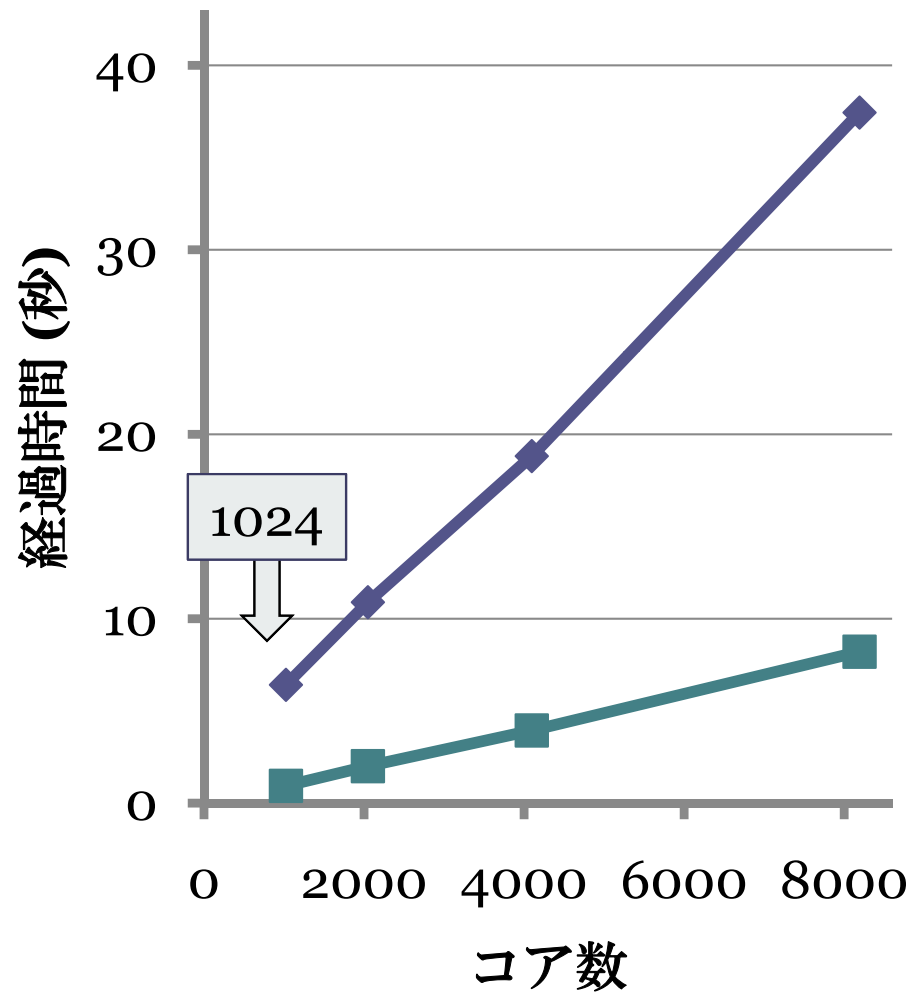


点線で囲ったものは、富士通コンパイラでは、SIMDベクトル化してくれず、インテルコンパイラではしてくれた。

RICCは、インテルCPUのため、富士通コンパイラは、不利かもしれない。

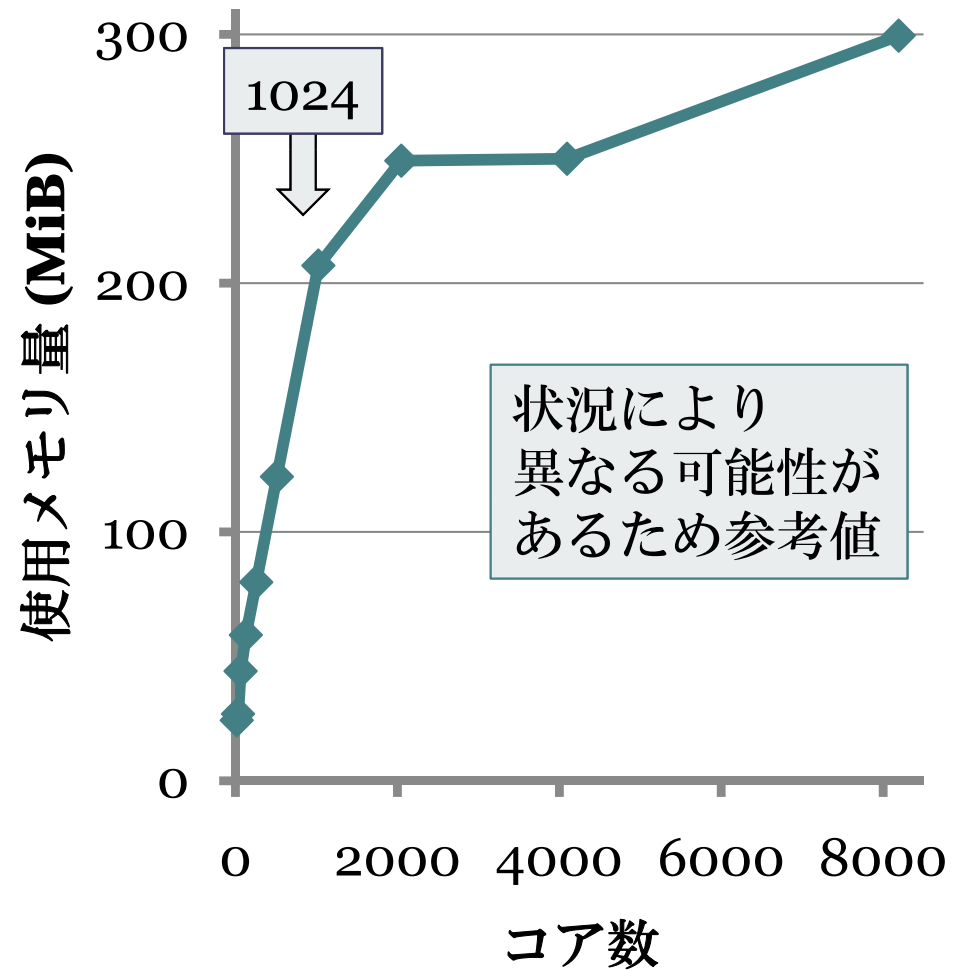
次世代スパコンでは、期待しています。

MPIライブラリ特性 ~ハイブリッド並列で対応~



◆ MPI_Init ■ MPI_Finalize

計測区間は、この内側



MPI_InitとMPI_Finalizeのみ使用してプロセス単位の使用量を計測した結果 (RICC SE様から情報をいただきました)

次世代スパコンの特性を教えてください

- OpenMP
- SIMD
- 通信
MPI_Bcast, MPI_Reduce, MPI_Allreduce

高コスト部分のループ構造の検討で必要

最後に

- ハイブリッド並列、SIMDなどの高度化を進めています。
- 先行されている方々のノウハウを教えていただけたら幸いです。

以上です。