

# 情報基盤研究開発センターハンズオン：HΦ講習会-ITOを用いたハンズオン-

## 並列化性能の紹介

2019/3/18 Mon.

吉見一慶 (東大物性研)



- 01 ソフトウェア開発・高度化プロジェクト
- 02 HΦで実装されている並列化機能 1  
ベクトル分割による並列化
- 03 HΦで実装されている並列化機能 2  
全対角化計算部の並列化

# ソフトウェア開発・高度化プロジェクト

物性研究で重要なソフトウェアを整備し、  
ユーザビリティを高めることで、使いやすいスパコン環境を目指す！



以下の実施体制で、1年あたり2つ程度のソフトウェアを高度化 (5人月/ソフトウェア程度の作業量)

- ☆ コーディネータ 物性研スタッフ (1名/プロジェクト)
- ☆ プロジェクトマネージャ (デベロッパー兼) 吉見一慶
- ☆ デベロッパー 本山裕一

現在の物性研スパコンでは以下のような解析が可能！



# スパコン・プロジェクトを通じたコミュニティの形成

ex. 数理ライブラリK $\omega$ とH $\Phi$ との連携



K $\omega$ とは？



公開度：3 ★★★ ドキュメント充実度：2 ★★★

シフト型クリロフ部分空間解法を用いた大規模疎行列向け並列化数値計算ルーチン。ハミルトニアン行列と状態ベクトルを入力として動的相関関数を効率よく計算することが可能。汎用な数値ライブラリであり、多体量子模型ソルバーH $\Phi$ での動的グリーン関数の計算機能の実装などに利用されている。また、Heisenberg模型などの量子格子模型の動的相関関数を計算するミニアプリが付属している。

行列・ベクトルをH $\Phi$ から出力し、その性質を直接調べることが可能。

→ 大規模行列において新しく見える課題を数理研究者と協力し解決。

# HΦで実装されている並列化機能 1

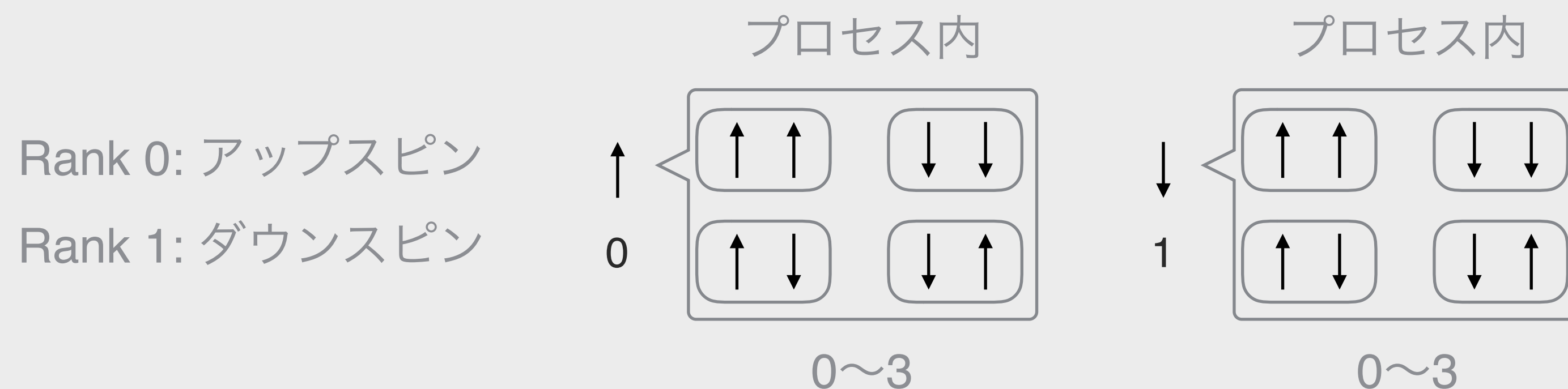
## ヒルベルト空間を表すベクトル分割による並列化 (MPI)



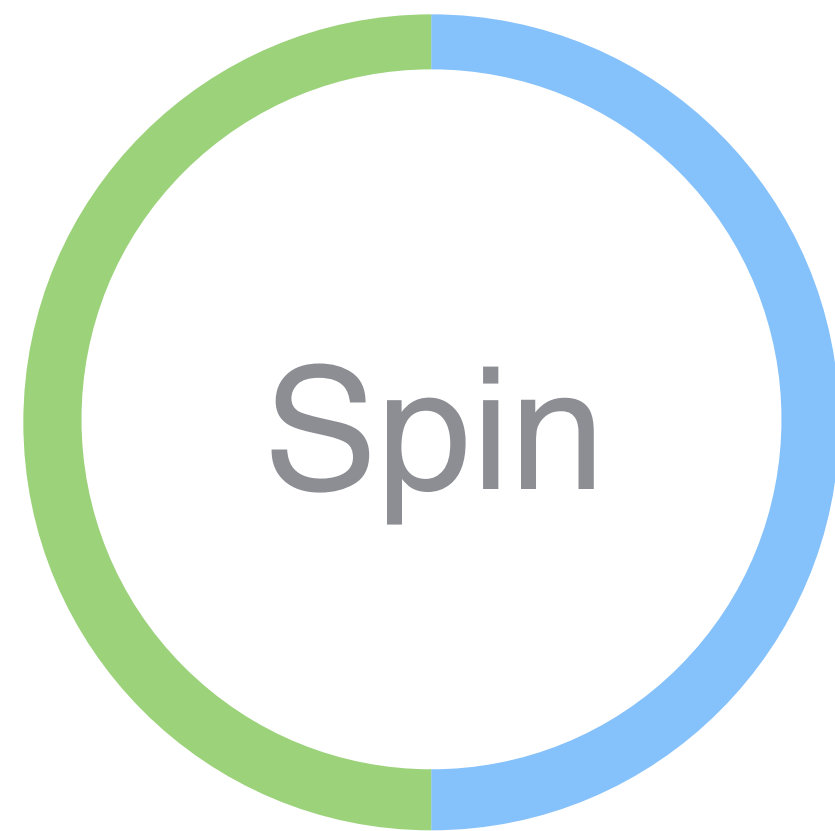
プロセス数をヒルベルト空間の部分空間にあててMPIによるプロセス並列。

ハミルトニアン・ベクトル積部分はOpenMPによるスレッド並列。

プロセス並列の例：スピン系の場合 (L=3、2プロセスで並列化)



# HΦでの並列化の方法：並列化に必要なプロセス数



↑, ↓



1サイトあたりの状態数は2  
プロセス数は $2^N$ にする



0, ↑, ↓, ↑↓



1サイトあたりの状態数は4  
プロセス数は $4^N$ にする



0, ↑, ↓, ↑↓



1サイトあたりの状態数は4  
(スピンは0, ↑↓を禁止)  
プロセス数は $4^N$ にする

# ベンチマークの結果

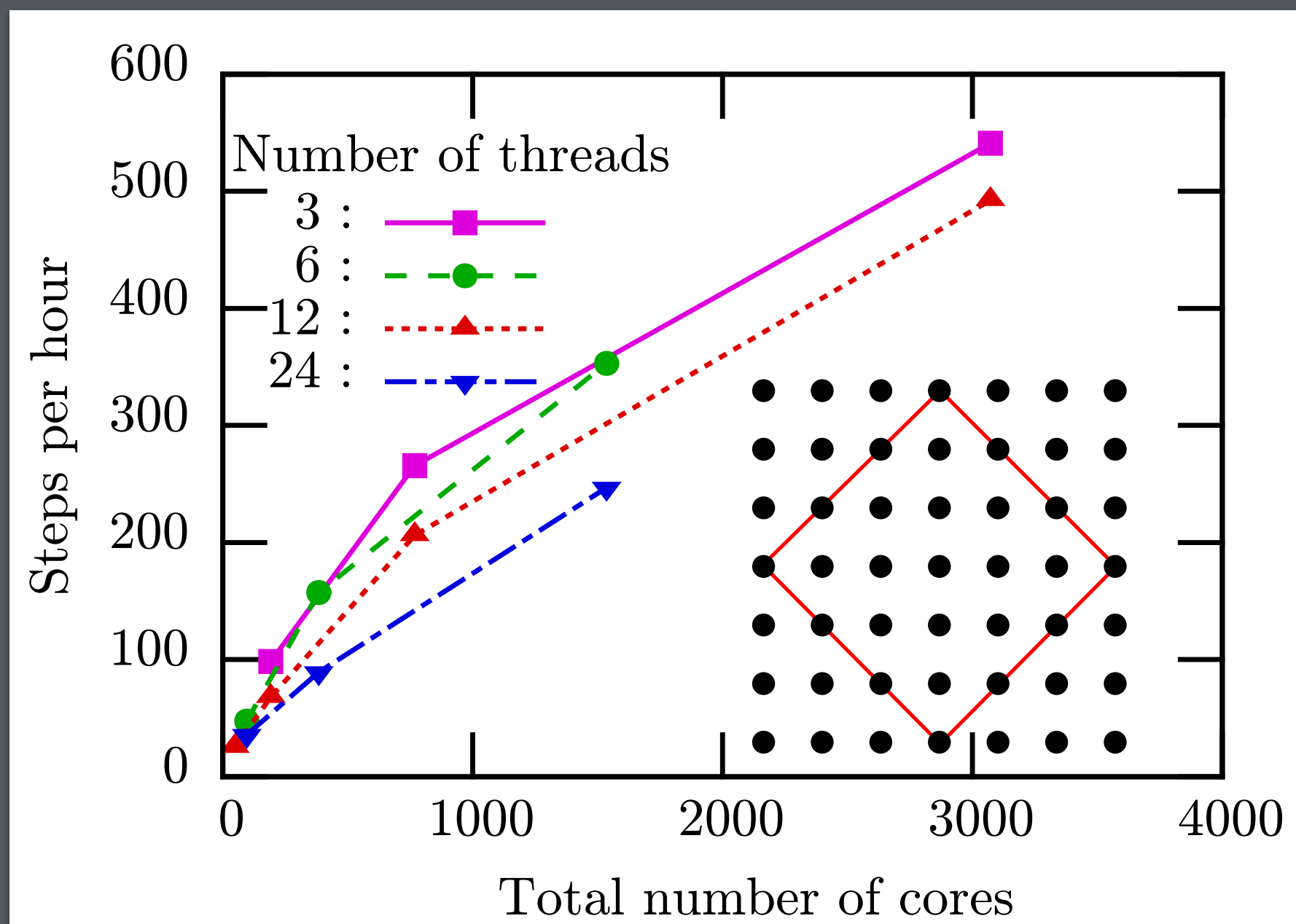
ヒルベルト空間を表すベクトル  
分割による並列化機能



18サイトHubbard模型 (half-filling,  $2S_z=0$ ,  $U/t = 8$ )

ISSPスパコンのシステムBで検証

- コア数を増やすにつれてステップ数大→高速化。
- 基本的にはフラットMPIの方が高速になる傾向。



1時間あたりのTPQステップの  
コア数依存性

# HΦで実装されている並列化機能 2

## 全対角化計算部の並列化



Hamiltonianを行列で与えた後(ここまではシングルプロセス)、  
対角化ソルバー部分を

1. MPI並列を用いたScaLAPACK
  2. GPUを使用したMAGMA
- でそれぞれ並列化。

# ベンチマークの結果

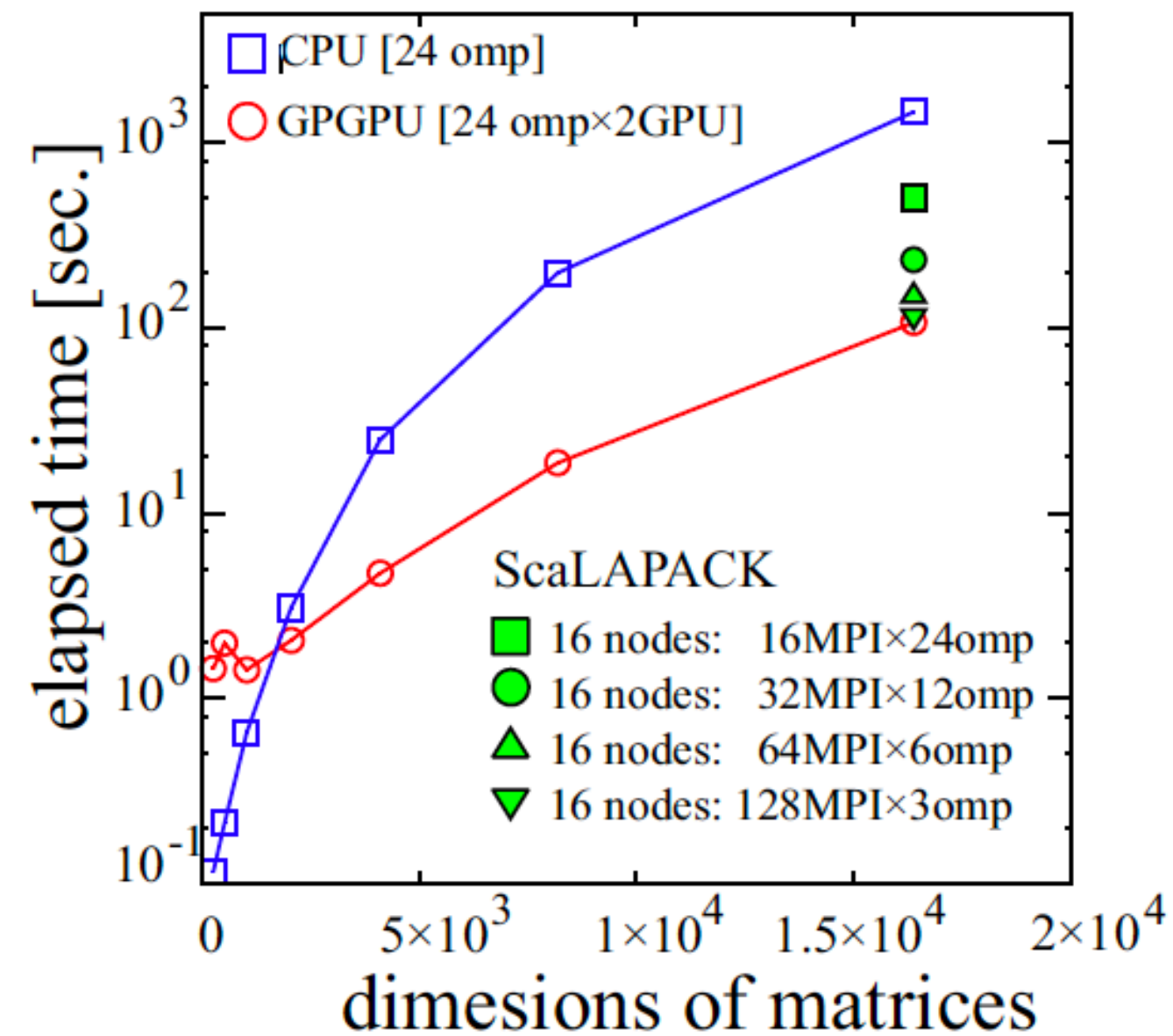
## 全対角化部分の速度測定



- ISSPスパコンのシステムBで検証

ACCノード：1ノードあたりの性能

- CPU: Intel Xeon 2.5 GHz (12cores) ×2
- GPU: Nvidia Tesla K40 × 2
- ScaLAPACKはフラットMPIでより高速化
- MAGMAは $10^4$ 程度の行列ではかなり高速に稼働。  
(ScaLAPACK16ノード使用する場合と同等の速度)



行列次元数と行列を  
対角化するのにかかる時間

ref.) "Implementation of GPGPU computing in full diagonalization for  $H\Phi$ ", T. Misawa and K. Yoshimi,  
Activity report 2017/Supercomputer Center, Institute for Solid State Physics, The University of Tokyo, 305-307 (2017).