

大規模並列 MP2 エネルギー微分計算アルゴリズムの

開発と実装

○石村 和也

分子研

ishimura@ims.ac.jp

【序】京コンピュータを始めとするスーパーコンピュータはノード数、コア数ともに膨大で、効率よく利用するためには並列性能・実効性能の高いアルゴリズム及びプログラムが必要となる。そのような計算機を使いこなせれば、これまでは不可能であった巨大分子もしくは高精度計算が可能になる。本研究では、非共有結合などいわゆる弱い相互作用や大きな置換基による立体障害の多用による新規分子構造・機能の設計のため、2次の摂動(MP2)エネルギー1次微分計算の MPI/OpenMP ハイブリッド並列アルゴリズムの開発を行い、大規模並列量子化学計算プログラム SMASH[1]に実装した。

【方法】これまでに開発したハードディスクを利用した MP2 エネルギー1次微分 MPI 並列計算アルゴリズム[2]を基に、ノード間を MPI、ノード内を OpenMP で並列化し、さらにすべての中間データ(基底の2乗から4乗に比例して増加)をメモリ上に分散保存するアルゴリズムを開発した(図1)。利用できる総メモリ量に応じて、一度に積分変換を行う占有軌道数を変えること(図1の do i-block)で、分散保存するデータ量を調整している。一方、原子軌道2電子積分とその微分計算は、分割回数分重複して計算を行うため、総計算量はノード数に依存する。データ送受信はすべて OpenMP 領域外で行い、シンプルな MPI 通信にしている。

【結果】Xeon マシン(12 コア、2.90GHz、64GB メモリ)3 ノードを用いて、taxol 分子(C₄₇H₅₁NO₁₄)、6-31G(660 基底)のベンチマーク計算を行った(表1)。ノード数によって、一度に変換を行う占有軌道数が変わるため、使ったノード数以上の並列加速率が得られている。演算時間、通信時間などの詳細なデータは当日発表する。

```
do i-block(1 度に変換する占有軌道ブロック)
do vσ (MPI 並列)
AO2 電子積分(μν|λσ)計算
第 1,2 変換(iv|jσ)
enddo
do ij(MPI 並列)
sendrecv((iv|jσ)
第 3,4 変換(ia|jb), (ik|jb)
Wab[I], Pab, tijab, Wai[I], Lai3,
MP2 エネルギー計算
sendrecv((ia|jb), tijab)
Pij, tijvσ計算
sendrecv(tijvσ)
Wij[I]計算
enddo
Wab[II], Wij[II], tμλvσ, Lai1,2,4, (μν|λσ)x 計算
enddo
CPHF 計算
Wai[II], Wij[III], Hμλx, Sμλx, (μν|λσ)x 計算
```

図1 MP2エネルギー1次微分並列計算アルゴリズム (各項は[2]を参照,OpenMP 並列と allreduce は省略)

表1 MP2 エネルギー1次微分計算実行時間と並列加速率

ノード数	1	2	3
計算時間(秒)	7505.7	3737.4	2172.0
並列加速率	1.00	2.01	3.46

[1] SMASH program, <http://smash-qc.sourceforge.net/>

[2] K. Ishimura, P. Pulay, S. Nagase, J. Comput. Chem. 2007, 28, 2034-2042.