

4E16

モデル空間量子モンテカルロ法 II hybrid 並列実装といくつかの応用例

(神戸大システム情報) ○大塚 勇起, 天能 精一郎

Model space quantum Monte Carlo method II Hybrid parallel implementation and some applications

(Kobe Univ.) Yuhki Ohtsuka and Seiichiro Ten-no

【序】モデル空間モンテカルロ法(MSQMC法)[1]は、前講演(4E15)で紹介された通り、スレーター行列式を使用した量子モンテカルロ法(PMC-SD法[2]やFCIQMC法[3])の結合解離領域における統計誤差の増加や、励起状態計算の困難さを解決するために提案された。テスト計算によって、結合解離や励起状態を精度良く安定に計算できることが確かめられているが、計算労力はモデル空間(P-space)に含まれる電子配置の数に比例して増加するため、並列実装が不可欠である。今回、MPI/OpenMP hybrid 並列実装を行い、MSQMC法の高速な計算を可能にした。

【アルゴリズム】今回行ったMSQMC法の並列実装の概要を図1に示す。P-spaceに含まれる電子配置は、MPIによって各ノードに分配される。モンテカルロ法によるP-spaceからの新しい電子配置の生成(P-space spawning)は、OpenMPを使用して並列化を行った。このステップでは、それぞれのウォーカー(サンプル)において独立に生成する確率を計算できるので、並列化は容易である。P-space以外(Q-space)の電子配置からの spawning(Q-space spawning)に関しても、同様にOpenMPを使用して並列化した。

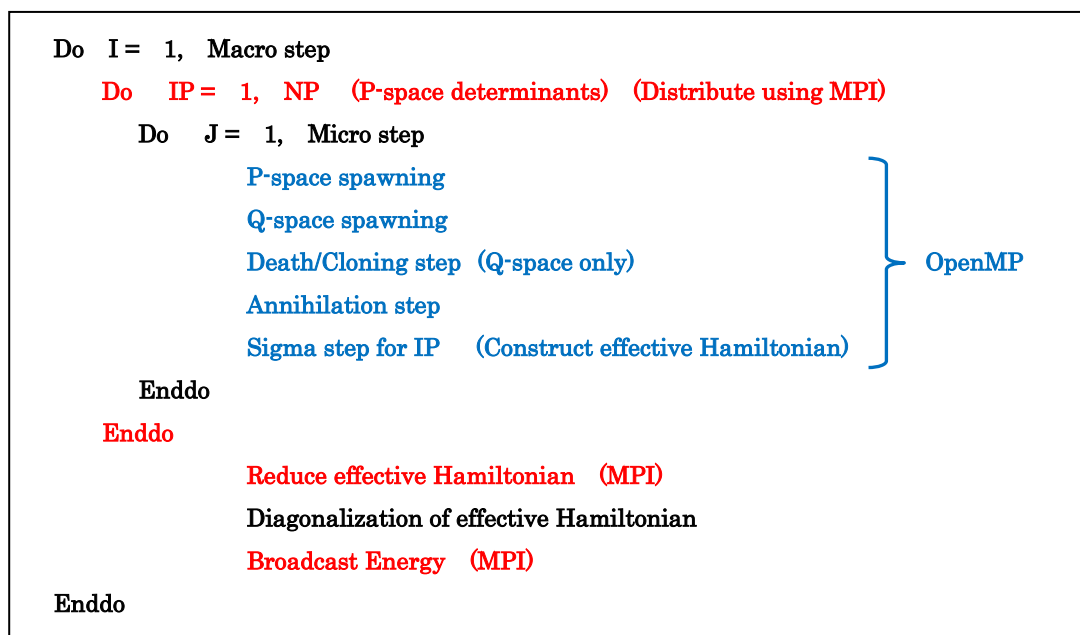


図 1. MSQMC 法の MPI/OpenMP hybrid 並列実装の概要

Death/Cloning step では、Q-space にあるウォーカーを、電子配置のエネルギーに従って、増加や消滅させるが、Q-space spawning と同時に行われるため、自動的に並列化されている。Annihilation step は、Transfer matrix を計算するために、それぞれの電子配置に存在するウォーカー数を数える過程であるが、電子配置のラベルをソートすることによって効率的に行うことができる。今回は、OpenMP を使用して並列ソートを実装することによって高速化した。effective Hamiltonian の行列要素は、各ノードで並列計算され(Sigma step)、Macro step 毎に MPI によってマスターノードに集められる。対角化によって計算された目的の状態のエネルギーは、全てのノードに Broadcast され、次のステップで使用される。MPI によってノード間で通信されるのは、effective Hamiltonian の行列要素とエネルギーのみである。

【計算結果と考察】 開発した並列プログラムを使用して、C₂ 分子の基底状態と励起状態ポテンシャルカーブを計算し、Full-CI 法による結果[5]との比較を行った。P-space に含まれる電子配置は、CASCI 計算を行い、目的の状態の波動関数の中で、係数が閾値(0.1)以上のものとした。必要な配置が P-space に選択されない場合も、モンテカルロシミュレーション中にその配置のウォーカー数が増加し、重要だとわかるので容易に P-space を改善することができる。また、サンプリングの効率を向上させるために、initiator 法[4]も利用した。図 2 に示すように、1~2.8Å にわたって X¹Σ_g⁺, B¹Δ_g, B¹Σ_g⁺ の 3 つの状態の計算を行ったが、誤差は最大でも 4mHartree 以下であった。誤差の主な原因は、initiator 法によるウォーカーのカットオフから来るものである。当日は、アルゴリズムの詳しい説明と他の系への応用例を紹介する予定である。

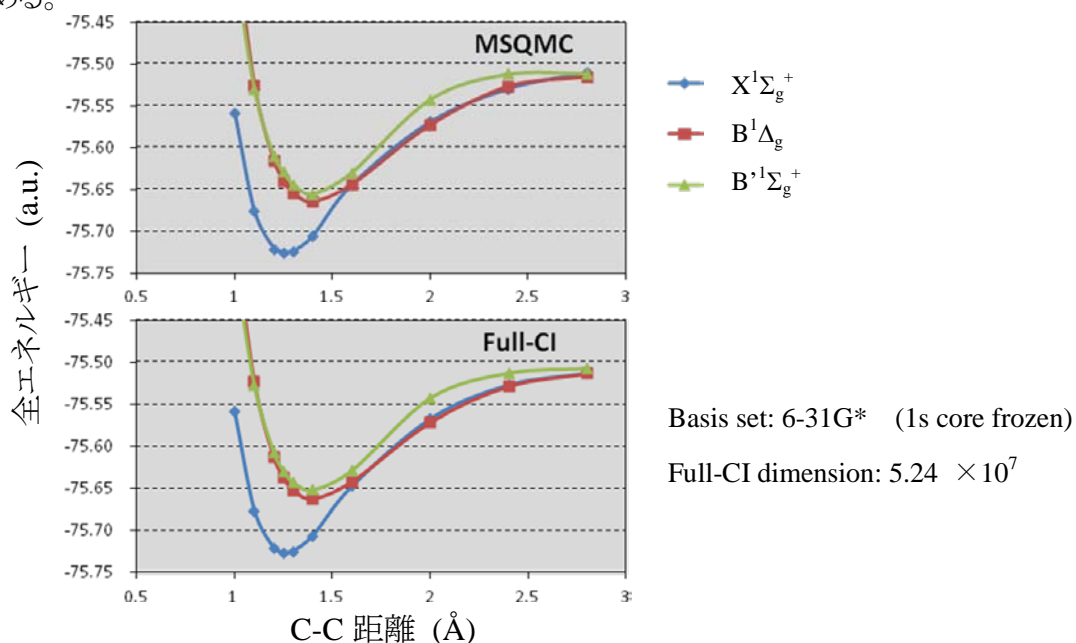


図 2. MSQMC 法と Full-CI 法による C₂ 分子のポテンシャルカーブの比較

- [1] S. Ten-no, *J. Chem. Phys.*, 138, 164126, (2013).
- [2] Y. Ohtsuka and S. Nagase, *Chem. Phys. Lett.*, 463, 431, (2008).
- [3] G.H. Booth, A.J.W. Thom and A. Alavi, *J. Chem. Phys.*, 131, 054106, (2009).
- [4] D. Cleland, G.H. Booth, and A. Alavi, *J. Chem. Phys.*, 132, 041103, (2010).
- [5] M. L. Abrams and D. Sherrill, *J. Chem. Phys.*, 121, 9211, (2004).