

ガウス型基底関数の s 型関数による再展開についての考察

(東工大*, 九大**, 筑波大***, 産総研****) ○渡邊寿雄*, 稲富雄一*,**,
梅田宏明***, 本田宏明**, 青柳睦**, 長嶋雲兵****

Reexpansion of the Gaussian basis by using s-type function

(Tokyo Tech*, Kyushu Univ.***, Univ. of TSUKUBA***, AIST****)

○Watanabe Toshio*, Inadomi Yuichi*,**, Umeda Hiroaki***,
Honda Hiroaki**, Aoyagi Mutsumi**, Nagashima Umpei****

【研究の背景】近年、分子軌道計算が扱える分子系のサイズが増大したことにより、タンパク質などの生体高分子などへ適用領域が広がっている。その要因は計算機速度の著しい向上と新しい理論/プログラムの開発/改良が挙げられる。以前はこの二つがそれぞれ独立に速度向上に貢献してきたが、昨今はそのような単純な図式ではない。その要因は、最近のスーパーコンピュータ（スパコン）が非常に多数の計算ノード（数千～数十万ノード）から構成され、またそれぞれの計算ノードが Intel x86 CPU のみではなく新しいアーキテクチャの CPU やアクセラレータを採用していることにある。そのため、計算速度向上にはプログラムの超並列化に加えて、各プロセッサアーキテクチャ向けにプログラムのポーティングと最適化を行う必要がある。GPU や Xeon Phi などのアクセラレータへの対応においては、同じ計算化学分野のプログラムである分子動力学法が素早く対応できたのとは対照的に、分子軌道法のプログラム群のアクセラレータ化は（一部の先駆的な研究 [1] を除き）その複雑なカーネルコードが原因で遅れを取った。そのカーネルコードの複雑さを解消することは、今後新たなアーキテクチャのスパコンが登場した際に他分野のアプリケーションに後れを取ることなく、プログラムのポーティング/最適化を可能にするためには必要不可欠である。またカーネルコードの複雑さの解消により、計算化学と計算機科学の研究者の間での共同研究がより容易/活発になり、新たなアーキテクチャへの迅速な対応が期待できる。

【目的】カーネルコードが複雑である原因は、HF 法や DFT 法におけるホットスポットである二電子反撥積分計算ルーチンがガウス型基底関数の 4 つ組のタイプ毎に必要な点である。それを解決する方法としては、最も単純な s 型基底関数による基底関数の再展開があり、このアイデア自体は古い[2]。この方法において検討すべき課題として、線形従属性による二電子反撥積分精度の低下、球面調和性の低下、そして二電子反撥積分ルーチンが (ss|ss)のみとなり SIMD 演算の効率的利用による速度向上がある。本発表では、線形従属性による二電子反撥積分精度の低下について検討を行った。

【結果】s 型基底関数で p_x 型基底関数を再展開する場合の式を以下に、またその時の振る舞いを図 1 に示した。

$$s(\alpha, \mathbf{r}) = N(\alpha) \exp(-\alpha r^2)$$

$$p(\alpha, \mathbf{r}) = N(\alpha) x \exp(-\alpha r^2)$$

$$p'(\alpha, \mathbf{r}, \mathbf{d}) = N'(\alpha) (s(\alpha, \mathbf{r} + \mathbf{d}) - s(\alpha, \mathbf{r} - \mathbf{d}))$$

α : 軌道指数

$N(\alpha)$: 規格化定数

$\mathbf{d}$: 軌道中心のずれ

図 1 に示した通り、 p_x 型基底関数は共通の軌道指数 α と中心位置のずれが d である 2 つの s 型基底関数の符号が異なる線形結合であらわされる。図 2 を見ると明らかとなおり、中心位置のずれ d が 0 になった極限では p_x 型基底関数に一致する一方で、 d が増えるに従い、元々の p_x 型基底関数からのずれが大きくなることがわかる。一方で d が減少することで p_x 型基底関数を構成する 2 つの s 型基底関数の重なりは大きくなり、結果として線形従属性による積分精度の低下が起きることがわかる。この積分精度の低下によって SCF 計算が収束しない現象は以前より報告されている[3]。そこで p_x 型基底関数を s 型基底関数で近似する際の一定の誤差を許容し、積分精度を確保する固定値 d を採用することで、SCF 計算が収束することを確認した。詳細結果については発表当日に報告する。

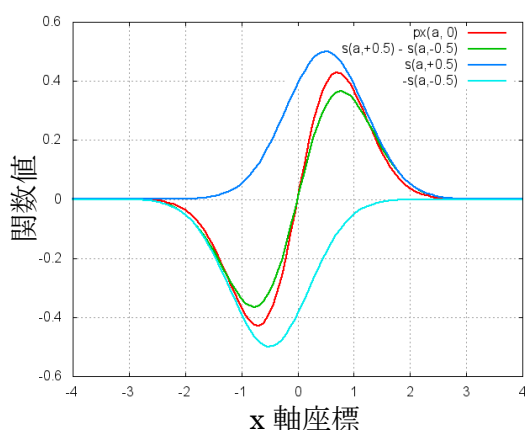


図 1 p_x 型関数の s 型関数による再展開

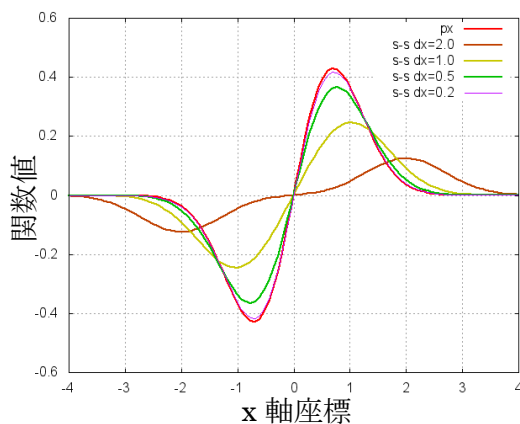


図 2 p_x 型関数の s 型関数による再展開における軌道中心位置と誤差

【今後の課題】 s 型基底関数での再展開により生じる球面調和性の低下への対策や、二電子反撥積分ルーチンの一元化による SIMD 演算の効率的利用による速度向上の検討、そして計算機科学の研究者との共同研究により GPU 化や Xeon Phi 化をした場合の速度向上率の検討を行う。

謝辞 本研究は、学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点の公募型共同研究「並列フラグメント分子軌道計算プログラム OpenFMO のマルチプラットフォーム化」の支援を受け実施している。

引用文献 [1] Koji Yasuda, *J. Comput. Chem.*, **29**, 334 (2007). Ivan S. Ufimtsev and Todd J. Martinez, *J. Chem. Theory Comput.*, **4**, 222-231 (2008). [2] H. Preuss, *Z. Naturforsch.*, **11**, 823 (1956). [3] Kotoku Sasagane, *J. Comput. Chem. Jpn.*, **9**, 9 (2010).