

超並列量子化学計算プログラム SMASH

(分子研) ○石村 和也

SMASH: Massively parallel program for quantum chemistry calculations

(IMS) ○Kazuya Ishimura

【序】スーパーコンピュータだけではなく研究室レベルの計算機クラスターでも並列計算は日常的行われるようになった。1 ノード当たりの CPU コア数は増え続けハードウェアがより複雑になる中で、並列性能及び実行性能の高いプログラムの必要性は高まっている。そこで、2012 年よりオープンソースライセンスの大規模並列量子化学計算プログラム SMASH の開発を始め、2014 年 9 月にバージョン 1.0 を公開した[1]。現時点では、PC から京コンピュータまでのスカラ型 CPU を搭載した計算機を対象としている。

【方法】これまでに開発した 2 電子積分計算[2]、MPI/OpenMP ハイブリッド並列化 Hartree-Fock エネルギー計算[3]アルゴリズムなどを基に、Hartree-Fock、DFT エネルギー及び構造最適化プログラムを実装した。

例として、Hartree-Fock 計算における 2 電子積分計算の分散アルゴリズムを図 1 に示す。4 重ループの最外ループを OpenMP でノード内並列し、第 3 ループを MPI でノード間並列している。OpenMP の動的な負荷分散の導入と、IF 文を使わない MPI の負荷分散により、均等な計算負荷分散を図りつつ、分散のためのコストを大幅に削減した。4 重ループ終了後に、ノード内は reduction により、ノード間は mpi_allreduce により Fock 行列要素を集めている。行列対角化は LAPACK ライブラリを利用しているため、ノード内のみ並列化されている。2 電子積分ルーチンは、表 1 に示すように基底関数などデータのやり取りを引数のみで行い、ライブラリ化している。そのため、どの計算方法でも 2 電子積分計算の呼び出しが容易であり、このルーチンのみ抜き出し他のプログラムに組み込むことも可能である。

エネルギー微分計算においても、最もコストの高い 2 電子積分の微分計算はエネルギー計算と同様の MPI/OpenMP ハイブリッド並列アルゴリズムを採用している。構造最適化計算では、結合、角度、二面角の情報を使う redundant 座標を導入し、その力場パラメータから初期 Hessian を作成している。

【結果】京コンピュータで性能を測定したところ、 $(C_{150}H_{30})_2$ (cc-pVDZ, 4500 基底) の B3LYP エネルギー計算は 98304 CPU コアで 154 秒、並列加速率は 5 万倍以上であった(図 2)。コア数が増加したときの並列化効率低下の主な原因はノード内のみ並列化されている行列対角化計算で、どのコア数でも 35 秒かかっている。今後ノード間も並列化されているライブラリの導入で、計算全体の並列化効率向上を図る予定である。

図 3 の $(C_{150}H_{30})$ (cc-pVDZ, 2250 基底) の B3LYP エネルギー微分計算については、行列対角化計算を含まないことから、並列化効率はほぼ 100% であった。構造最適化計算では、最適化サイクル数

は Cartesian 座標に比べて 1/5 から 1/6 程度と大幅に削減できた(表 2)。京コンピュータなどのスーパーコンピュータでナノサイズ分子・クラスターの構造最適化計算が容易に行えるようになった。

```
!$OMP parallel do schedule(dynamic,1) &
!$OMP reduction(+:Fock)
do μ=nbasis, 1, -1
  do v=1, μ
    μv=μ(μ+1)/2+v
    λstart=mod(μv+mpi_rank,nproc)+1
    do λ=λstart, μ, nproc
      do σ=1, λ
        AO2 電子積分(μv|λσ)計算
        +Fock 行列に足し込み
      enddo
    enddo
  enddo
enddo
!$OMP end parallel do
call mpi_allreduce(Fock)
```

図 1 MPI/OpenMP ハイブリッド並列化 Fock 行列計算アルゴリズム

表 2 B3LYP/cc-pVDZ 構造最適化回数(初期構造 HF/STO-3G)

	Cartesian	Redundant
Luciferin(C ₁₁ H ₈ N ₂ O ₃ S ₂)	63	11
Taxol (C ₄₇ H ₅₁ NO ₁₄)	203	40

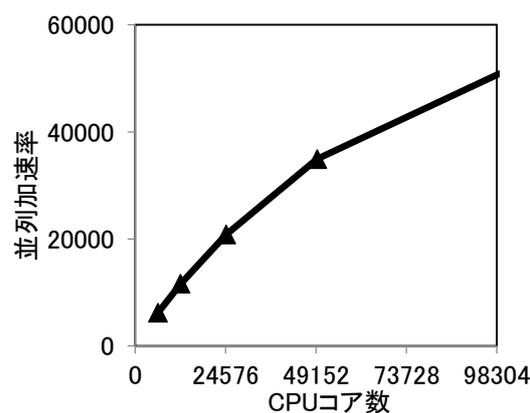


図 2 B3LYP エネルギー計算の並列性能

表 1 2 電子積分ルーチン

subroutine int2elec(twoeri, exijkl, coijkl, xyzijkl, nprimijkl, nangijkl, nbfijkl, maxdim, mxprsh, threshex)	
twoeri	2 電子積分値 (Output)
exijkl	primitive 基底関数の指数 (Input)
coijkl	primitive 基底関数の係数
xyzijkl	xyz 座標
nprimijkl	primitive 基底関数の数
nangijkl	軌道角運動量(s=0, p=1, d=2,...)
nbfijkl	基底関数の数(s=1, p=3, d=5or6,...)
maxdim	最大 twoeri の次元数
mxprsh	最大 primitive 基底関数の数
threshex	exp(-x)計算の x の閾値

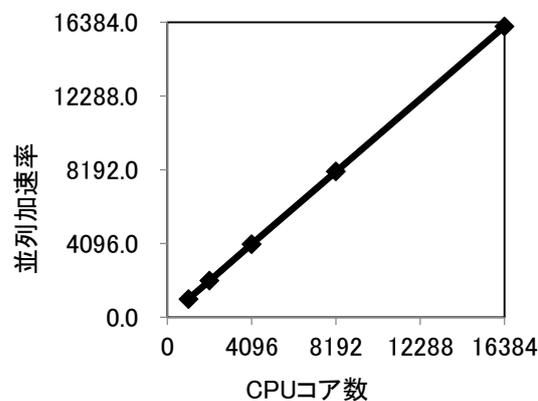


図 3 B3LYP エネルギー微分計算の並列性能

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

[2] K. Ishimura, S. Nagase, Theoret. Chem. Acc., **120**, 185 (2008).

[3] K. Ishimura, K. Kuramoto, Y. Ikuta, S. Hyodo, J. Chem. Theory Comput., **6**, 1075 (2010).