

2C04 高速・高並列 MP2 計算アルゴリズム

(分子研¹・Arkansas大²) ○石村和也¹, Peter Pulay², 永瀬茂¹

【序】量子化学計算で取り扱う分子のサイズは年々大きくなり、それに応じて計算量は急激に増加している。我々の興味のある分子の多くは、分散力など弱い相互作用が重要であり、MP2 摂動法や coupled-cluster 法などの高精度な計算方法が求められている。また、ここ数年で用いられる計算機はワークステーションから安価な PC クラスタへと変わり、並列計算が重要となってきた。本研究では、新たな近似を加えることなく演算量を減らし、並列化効率が高い MP2 計算アルゴリズムを開発し、その性能を調べた。約 1500 の基底関数の MP2 エネルギー計算が、PC(Pentium4 3.0GHz)8 台で 6.9 時間、4 台で 12.9 時間と、本アルゴリズムは高速かつ並列化効率が良く、巨大分子の MP2 計算が可能になった。

【方法】閉殻分子の MP2 エネルギーは

$$E_{MP2} = \sum_{i,j,a,b} \frac{(ai|bj)[2(ai|bj) - (bi|aj)]}{\epsilon_i + \epsilon_j - \epsilon_a - \epsilon_b}$$

で表せる。 i, j は占有軌道、 a, b は空軌道、 ϵ は軌道エネルギーである。 $(ai|bj)$ は MO 二電子積分で、次式によって求められる。

$$(ai|bj) = \sum_{\mu,\nu,\lambda,\sigma} C_{\mu a} C_{\nu i} C_{\lambda b} C_{\sigma j} (\mu\nu|\lambda\sigma)$$

C は MO 係数で、 $(\mu\nu|\lambda\sigma)$ は AO 二電子積分である。

AO 積分を MO 積分に変換して MP2 エネルギーを求めるアルゴリズムを次のページに示す。SCF 法で用いられる AO 積分のスクリーニングのみを導入し、それ以外の近似は導入せず精度を落とすことなく計算する。並列計算では、third quarter transformation まではインデックス μ が各 CPU に分配され、fourth transformation では ij が分配される。必要なメモリーサイズは各 CPU ごとに $4s^2N$ バイト、ディスクサイズは全体で $4o^2vN$ バイトである。 o は関連する占有軌道の数、 v は空軌道の数、 s は shell 中の基底関数の最大値、 N は基底関数の次元数である。また、並列計算における通信量は CPU の数にかかわらず全体で $4o^2vN$ である。

【結果】taxol($C_{47}H_{51}NO_{14}$)分子を用いて、本アルゴリズムのテスト計算を行った。使用した計算機は、メモリーを 2GB 搭載した Pentium4 3.0GHz クラスタで、各計算機は Gigabit ethernet で接続されている。基底関数は 6-31G(d)及び 6-311G(d,p)を用い、その詳細を表 1 にまとめた。表 2 は CPU 時間、実時間、そして並列加速率を示している。計算時間は 6-311G(d,p)(約 1500 基底)の場合、8CPU で 6.9 時間、4CPU で 12.9 時間、2CPU で 24.4 時間、6-31G(d)(約 1000 基底)の場合、8CPU で 2.1 時間、4CPU で 3.9 時間、2CPU で 7.3 時間であった。本アルゴリズムは高速かつ高並列であり、巨大分子の MP2 エネルギー計算に非常に有効であることがわかった。

MP2 エネルギー計算アルゴリズム

```

do M = 1, nshells
  distribute M to each node
  do Λ = 1, nshells
    do Σ = 1, Λ
      do N = 1, nshells
        calculate( $\mu\nu | \lambda\sigma$ )
        ( $\mu i | \lambda\sigma$ ) += ( $\mu\nu | \lambda\sigma$ ) *  $C_{\mu i}$  (all i)
      end do
      ( $\mu i | \lambda j$ ) += ( $\mu i | \lambda\sigma$ ) *  $C_{\sigma j}$  (all j)
      ( $\mu i | \sigma j$ ) += ( $\mu i | \lambda\sigma$ ) *  $C_{\lambda j}$  (all j)
    end do
  end do
  ( $\mu i | b j$ ) += ( $\mu i | \lambda j$ ) *  $C_{\lambda b}$  (all b)
  store ( $\mu i | b j$ ) on disk
end do

do batches of (i, j) indices
  read ( $\mu i | b j$ ) from disk
  distribute (i, j) to each node
  send ( $\mu i | b j$ ) to the appropriate node
  recieve ( $\mu i | b j$ )
  ( $a i | b j$ ) += ( $\mu i | b j$ ) *  $C_{\mu a}$  (all a)
  calculate MP2 energy
end do

```

表 1 taxol 分子の軌道数

基底関数	6-31G(d)	6-311G(d,p)
相関する占有軌道数	164	164
空軌道数	806	1258
基底関数の次元数	1032	1484

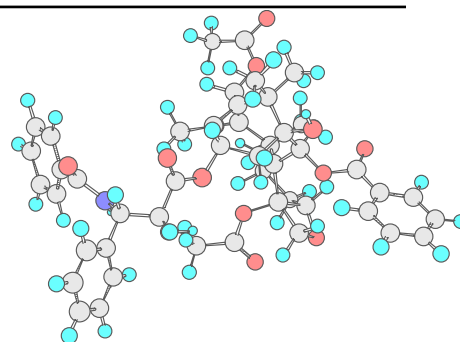


図 1 taxol 分子

表 2 MP2 一点計算の CPU 時間及び実時間(カッコ内は並列加速率)

	1CPU	2CPU	4CPU	8CPU
CPU 時間/hour				
6-31G(d)	12.08(1.00)	6.37(1.90)	3.41(3.54)	1.84(6.56)
6-311G(d,p)	38.44(1.00)	20.41(1.88)	11.08(3.47)	5.97(6.44)
実時間/hour				
6-31G(d)	13.14(1.00)	7.32(1.79)	3.87(3.39)	2.14(6.13)
6-311G(d,p)	40.96(1.00)	24.42(1.68)	12.94(3.17)	6.85(5.98)