

課題名 (タイトル) :

## Development of massive parallel ab initio quantum-chemical program

利用者氏名 : 秋永宜伸

所属 : 計算科学研究機構 量子系分子科学研究チーム

### 1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

物質科学全般に関する研究において、分子の非経験的電子状態計算に対する期待は高まる一方である。すなわち、スーパーコンピュータを始めとするハイパフォーマンス計算機資源をいかした大規模な計算を可能とすることが求められている。本課題では、所属研究チームで開発中の分子科学計算ソフトウェア NTChem を対象として 8,000 コア程度までを用いた並列計算効率測定を行い、チューニングの指針を得ることを目的とした。

### 2. 具体的な利用内容、計算方法

糖代謝において中心的役割を担うホルモンであるインスリン (783 原子、4,461 基底) を対象分子として、密度汎関数法 (DFT) を用いたエネルギー計算を行った。並列化方法としてはプロセス並列化のみを用いた flat MPI 並列のほか、プロセス並列化とスレッド並列化を併用した MPI/OpenMP ハイブリッド並列を用いた。スレッド並列化では、高いロードバランス達成のためにダイナミックスケジューリングを用いた。計算の律速となるのは、 $O(N^3 - 4)$  でスケールする Fock 行列生成過程である。本課題では、このプロセスにおける並列化効率を主な解析対象とし、高いロードバランスを実現するためのチューニングを行った。簡易利用の上限である 256 コアまでを用いたパフォーマンス計測のほか、大規模運用を利用して 8,192 コアまでを用いた計算も行った。

### 3. 結果およびまとめ

256 コアまでを用いて行ったチューニングの後、8,192 コアまでを用いて得られた MPI および MPI/OpenMP 並列化効率の測定を行ったところ、

Fock 行列生成過程のうち、通信を除いた所要時間および通信を含めた所要時間のいずれについても、MPI と OpenMP を併用することで (Flat MPI よりも) 高い並列化効率を達成できる。これは以下の 2 点が主な要因と考えられる: (1) スレッド並列化との併用によるロードバランスの向上、(2) (flat MPI に比較して) 総プロセス数が減少したことによる大域通信時間の減少。

### 4. 今後の計画・展望

DFT 計算モジュールについては現在、更に多くの CPU コアを用いたパフォーマンス計測を京コンピュータにて行っている段階である。次年度以降は、高精度電子相関計算の並列化およびチューニングを行っていく予定である。