

課題名 (タイトル):

## 大規模系の超並列量子化学計算のための理論およびアルゴリズムの開発

利用者氏名: 河東田 道夫

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

近年の大規模計算システムではマルチコア超並列クラスタシステム構成が一般的となっており、現在では京コンピュータのような 10 ペタフロップス級の演算性能を持つシステムも登場している。理論分子科学の分野においても、巨大分子の高精度量子化学計算をこれらのシステム上で実行可能とする計算科学基盤技術を整備し、ナノ分子や生体分子の機能デザインや生体系の現象解明といった応用計算を行うことが重要な研究課題となっている。本課題では、京コンピュータなどのマルチコア超並列クラスタシステムを用いてナノ分子や生体分子の高精度量子化学計算を現実的な計算時間で実行可能とするために、超並列計算に適した高精度量子化学理論の計算手法・超並列アルゴリズム、およびプログラムの開発を行っている。今年度には、ナノ分子や生体分子などの化学現象で重要な役割を果たすファンデルワールス力のような電子相関に由来する弱い非共有結合相互作用を正しく再現し、かつ高速に計算すること可能な Resolution-of-identity Møller-Plesset 2 次摂動 (RI-MP2) 計算の超並列アルゴリズム開発を RICC 超並列クラスタシステム上で行った。

## 2. 具体的な利用内容、計算方法

ノード間の並列化を MPI、ノード内の並列化を OpenMP で行う RI-MP2 法の MPI/OpenMP ハイブリッド並列アルゴリズムおよびソフトウェアを開発し、実行性能テストを RICC 超並列クラスタ上で行った。また、並列性能向上を目的として、MPI 並列タスク分割方法についても検討を行い、その並列性能への影響についても実効性能テストを行い確認した。

## 3. 結果

図 1 にタキソールの RI-MP2/cc-pVDZ 計算の CPU コア数に対する高速化率を示す。MPI/OpenMP ハイブリッド並列化により、フラット MPI 並列化の場合より高速化率が大きく向上した。また、MPI 並列化の分割軸を仮想軌道にしたことにより、分割軸を占有軌道とした時よりも高速化率が大きく向上した。

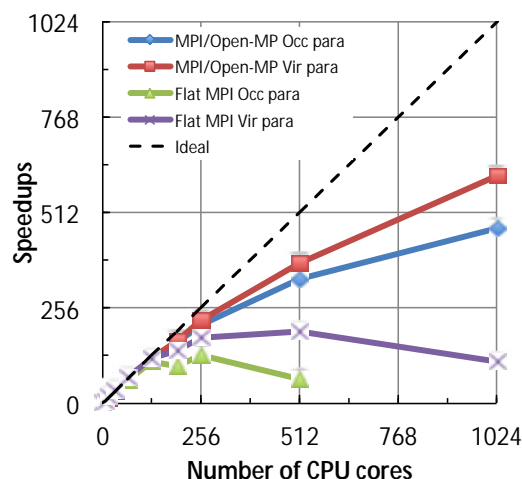


図 1. タキソールの RI-MP2/cc-pVDZ 並列計算の高速化率

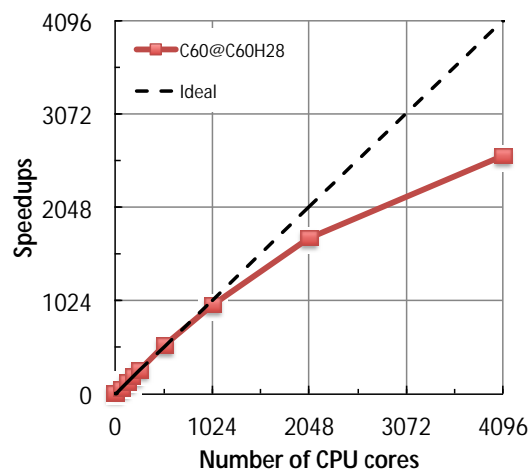


図 2. バックキキャッチャー  $C_{60}@C_{60}H_{28}$  の RI-MP2/cc-pVTZ 並列計算の高速化率

図 2 にバックキキャッチャー  $C_{60}@C_{60}H_{28}$  の RI-MP2/cc-pVTZ 計算の高速化率を示す。512 ノー

ド 4096CPU コアを用いた場合でも 2621 倍の高速化率を達成した。また、512 ノード 4096CPU コアを用いた場合、 $C_{60}@C_{60}H_{28}$  の計算は 15 分で終了した。

#### 4 . まとめ

巨大分子の RI-MP2 計算をマルチコア超並列クラスタシステム上で高速・高並列に行うことを目的として、RI-MP2 法の MPI/OpenMP ハイブリッド並列アルゴリズムおよびソフトウェアの開発を RICC 超並列クラスタを利用して行った。開発したソフトウェアの並列性能テストを RICC 上で行った所、良好な並列性能を達成することを確認した。

#### 5 . 今後の計画・展望

本課題にて開発された RI-MP2 計算ソフトウェアは RICC 超並列クラスタ上で性能チューニングを行った後、京コンピュータへの移植を行った。現状では単体性能および並列性能チューニングの途上であるものの、バッキーキャッチャー  $C_{60}@C_{60}H_{28}$  の RI-MP2/cc-pVTZ 計算で 2048 ノード 16384 コアを使用して 5 分で計算が完了し、並列化効率 0.54 (256 ノード 2048 コア基準)、45.2TFLOPS (34.5%) の実効性能を達成している。

現在、更なる性能向上のためのチューニング作業を京コンピュータ上で行なっている。本ソフトウェアおよび理研 RICC スーパーコンピュータシステムや京コンピュータを用いることにより、従来の手法では困難であった理論量子分子科学計算によるナノ分子や生体分子の化学現象の解明や機能デザインといった応用への展開が大いに期待される。

平成 24 年度 RICC 利用研究成果リスト

【国際会議などの予稿集、proceeding】

1. Michio Katouda, Takahito Nakajima, and Shigeru Nagase, “Development of efficient computational techniques and codes for second-order Møller Plesset perturbation calculation of extended systems”, Proceedings of JSST 2012, 338–343 (2012) (査読付国際会議プロシーディング).

【国際会議、学会などでの口頭発表】

1. Michio Katouda and Takahito Nakajima, “Massively parallel second-order Møller–Plesset perturbation calculations on K computer”, The 3rd AICS International Symposium, Kobe, 28 Feb. 2013.
2. 河東田道夫, “マルチコア超並列クラスタシステムに適した高精度量子化学計算手法の開発”, 日本応用数理学会 若手の会 単独研究会, 東京, 2012 年 12 月 26 日 (招待講演).
3. Michio Katouda, Takahito Nakajima, and Shigeru Nagase, “Development of efficient computational techniques and codes for second-order Møller–Plesset perturbation calculation of extended systems”, JSST 2012, Kobe, 27 Sep. 2012.
4. 河東田道夫, 中嶋隆人, “大規模分子の超並列計算のための MPI/Open-MP ハイブリッド並列 RI-MP2 アルゴリズム”, 分子科学討論会 2012, 東京, 2012 年 9 月 21 日.
5. Michio Katouda and Takahito Nakajima, “Efficient quantum chemical calculations of macromolecules”, CJK-WTCC-2012, Beijing, 20 Jul. 2012 (招待講演).
6. 河東田道夫, 中嶋隆人, “2 成分相対論的結晶軌道法の開発”, 理論化学討論会, 仙台, 2012 年 5 月 24 日 (ポスター発表).