

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、およびソフトウェアの開発を行っている。昨年度の RICC 利用課題では、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 MPI/OpenMP ハイブリッド超並列アルゴリズムおよびソフトウェア開発を RICC 超並列クラスタシステム上で行った。今年度の利用課題では、RI-MP2 計算の実行性能向上を目的として、昨年度に開発した RI-MP2 超並列計算ソフトウェアのアルゴリズムの改良および並列性能チューニングを行い、性能評価テストを RICC 上で行った。

2. 具体的な利用内容、計算方法

実行性能向上を目的として、昨年度に開発した 3 中心 2 電子積分をディスクに保持するセミダイレクトアルゴリズムを元に、3 中心 2 電子積分を各計算ノードの分散メモリに保持するインコア

アルゴリズムを新たに開発した。RI-MP2 法では中間データとして 3 中心 2 電子積分を保持すればよいため、必要な分散メモリの総量は $O(N^6)$ となる。十分な数の計算ノードを用いた場合には、数百原子、数千原子軌道程度の分子の計算の場合でも各計算ノードの分散メモリにデータを十分保持可能であり、セミダイレクトアルゴリズムで発生するディスク I/O オーバーヘッドを削減することにより、実行性能の大幅な向上が達成される。また、並列性能向上を目的として、インコアアルゴリズムの実装およびセミダイレクトアルゴリズムの実装の両方に対し、(1)MPI 並列タスク分割が各プロセスにより均等に割り振られるような仮想軌道のバッチの分割方法の再検討、(2)MPI 通信のバッチ化による MPI 通信立ち上げ時のオーバーヘッド削減、および(3)OpenMP スレッド並列向上のために 3 中心 2 電子積分計算部分のコードのプライベート変数の局所変数への書き換え、といったコードチューニングを行った。性能評価テストは RICC 超並列クラスタ上で行った。

3. 結果

表 1. バッキーキャッチャー $C_{60}@C_{60}H_{28}$ の RI-MP2/cc-pVTZ 並列計算の計算時間 (秒) と加速率

CPU cores	InCore algorithm		Semi-direct algorithm	
	Time [s]	Speedups	Time [s]	Speedups
256	8377.3	256.0	8849.7	256.0
512	4312.8	497.3	4464.8	507.4
1024	2285.2	938.5	2427.7	933.2
2048	1269.9	1688.8	1389.7	1630.2
4096	779.2	2752.2	904.0	2506.1
8192	602.3	3560.7	708.6	3197.2

表 1 にバッキーキャッチャー $C_{60}@C_{60}H_{28}$ の RI-MP2/cc-pVTZ 計算 (3992 原子軌道) の計算時間と加速度を示す。インコアアルゴリズムの実装を用いた場合の結果とセミダイレクトアルゴリズムの実装を用いた場合の結果を比較した場合、計算時間と加速度の両方でインコアアルゴリズム

の実装を用いた結果の方が、常に良好な結果を得られた。また、1024 ノード 8192CPU コアを用いた場合、 $C_{60}@C_{60}H_{28}$ の RI-MP2 計算は 10 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、昨年度の RICC 利用課題で開発した RI-MP2 法の MPI/OpenMP ハイブリッド並列ソフトウェアの実行性能向上のためのアルゴリズム改良をおよび性能チューニングを RICC 超並列クラスタを利用して行った。改良したソフトウェアの並列性能テストを RICC 上で行った所、本課題で新たに開発したインコアアルゴリズムは従来のセミダイレクトアルゴリズムよりも高い実行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 RI-MP2 並列計算ソフトウェアの改良作業を完了した後、本ソフトウェアの京コンピュータへの移植および性能テストを行った。世界記録規模となるナノグラフェン 2 量体 ($C_{150}H_{30}$)₂ の RI-MP2/cc-pVTZ 計算 (9840 原子軌道) を京 8921 ノード 71288 コアを使用して行った所、64.6 分で計算が完了し、494.2TFLOPS (ピーク比 43.4%) の実効性能を達成した。また、ナノグラフェン 2 量体 ($C_{96}H_{24}$)₂ の RI-MP2/cc-pVTZ 計算 (6432 原子軌道) を京 1065 ノード 8520 コアを使用して計算した結果 (計算時間 51.7 分) よりウィークスケールリングの見積りを行った所、並列化効率 0.80 を達成した。開発したソフトウェアは、本課題利用者の所属する研究チームで開発を行っている分子科学計算ソフトウェア NTChem に組み込まれ、2013 年 8 月に京利用者向け公開ソフトウェアとして一般公開された (http://labs.aics.riken.jp/nakajimat_top/ntchem_j.html)。本ソフトウェアを京コンピュータや理研 RICC スーパーコンピュータシステム上で用いることにより、既存の計算手法およびソフトウェア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十分に期待できる。

平成 25 年度 RICC 利用研究成果リスト

【論文発表】

1. Michio Katouda, Takahito Nakajima, “MPI/OpenMP hybrid parallel algorithm of resolution of identity second-order Møller–Plesset perturbation calculation for massively parallel multicore supercomputers”, J. Chem. Theory Comput., 9, 5373 (2013).

【国際会議、学会などでの口頭発表】

1. Michio Katouda, Takahito Nakajima, “MPI/OpenMP hybrid parallel algorithm of resolution of identity second-order Møller–Plesset perturbation calculation for K computer”, 5th JCS International Symposium on Theoretical Chemistry, Nara, 4 Dec. 2013. (ポスター、招待講演)
2. Michio Katouda, “NTChem and Beyond”, 4th AICS International Symposium, Kobe, 3 Dec. 2013. (依頼講演)
3. Michio Katouda, Takahito Nakajima, “Development of MPI/OpenMP hybrid parallel algorithm of resolution of identity second-order Møller–Plesset perturbation calculations for massively parallel multicore supercomputers”, ISTCP-VIII, Budapest, 29 Aug. 2013. (ポスター)
4. 河東田道夫, 中嶋隆人, ” MP2 法と分散力補正 DFT 法によるナノグラフェン表面間の π · π 相互作用解析”, 第 16 回理論化学討論会, 福岡, 2013 年 5 月 16 日. (ポスター)

【その他】

1. NTChem 2013, http://labs.aics.riken.jp/nakajimat_top/ntchem_e.html (ソフトウェア)