

課題名 (タイトル) :

量子化学計算プログラムパッケージの並列性能の評価と最適化

利用者氏名 : ○横山 尚弥, 中田 真秀

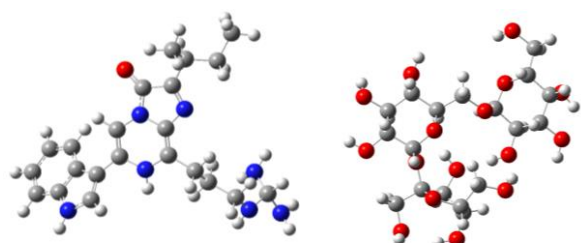
所属 : 情報基盤センター

【序論】 近年、分子軌道(MO)計算に基づく理論化学・計算化学という分野が一定の存在感を持つに至った。それは、方法論の発展と共に並列処理などの新しい計算技術の導入が進み、小型モデルではなく実在系の大型分子まで扱えるようになったことが一つの要因である[1]。特に、代表的な MO プログラムである GAUSSIAN が共有メモリ環境で並列化され[2]、現在では PC でも手軽に利用出来るようになっており、実験系の研究室にも普及が進みつつあるが、並列加速の性能はあまり知られていない。そこで、本研究では GAUSSIAN09 の並列性能を分子サイズを変えながら系統的に測定し、相対コストを算定する基礎的なデータを取得することにした。

【並列化】 エネルギー計算の場合、HF でコストを決するのは 2 電子積分から Fock 行列を構築する部分で、基底関数の四つの添字(実際はシェル)を各プロセスで分配して並列化を行う[1]。DFT 計算では、交換・相関ポテンシャルに関する数値積分の部分も適宜並列化される。エネルギー計算の自己無撞着(SCF)条件達成後、核座標に関するエネルギー微分では 2 電子積分の微分値の評価が並列処理される。これらの並列化では同期を伴う総和が必要なため、性能低下の原因となり得る。

【方法】 主に生化学や薬学に関連する分子群を選んで Gauss View でモデリングし、GAUSSIAN09 で Hartree-Fock (HF) と DFT の代表汎関数である B3LYP の各レベルで構造最適化計算を行った。基底関数は 6-31G で統一した。RICC を使い、各ノードで 1CPU の中の 8 コアの中でコア数を 1,2,4 と変えて並列性能を測定した。

【結果】 ここでは cypridinaluciferin と raffinose (図 1 参照)についての測定結果を表 1 に示す。2 コアではほぼ理想的な加速であるが、4 コアでは raffinose の場合に性能低下が見られ負荷分散の問題が後者では顕在化している。



| Time (sec) | HF | Acc. | B3LYP | Acc. |
|---------------------------|-------|------|-------|------|
| cypridinaluciferin | | | | |
| #1 | 5949 | | 12927 | |
| #2 | 3106 | 1.9 | 6687 | 1.9 |
| #4 | 1701 | 3.5 | 3641 | 3.6 |
| raffinose | | | | |
| #1 | 49254 | | 66804 | |
| #2 | 25405 | 1.9 | 36327 | 1.8 |
| #4 | 17559 | 2.8 | 21654 | 3.1 |

図 1 cypridinaluciferin(左)と raffinose(右) 表 1 コア数が 1,2,4 の場合の計算時間と加速

【文献】 [1] W. A. de Jong et al., *Phys. Chem. Chem. Phys.* **12** (2010) 6896-6920. [2] C. P. Sosa et al., *J. Comp. Chem.* **19** (1998) 1053-1063.