

# 超並列量子化学計算プログラムの開発

石村和也 (分子研 計算分子科学研究拠点(TCCI))

## 京コンピュータ



88128ノード (705024コア)  
1ノード 8CPUコア(2.0GHz)  
1ノード 16GBメモリ  
3次元トラスネットワーク

最新スパコンTop500ランキング(2013/11)

Rank	Site	System	Cores	Rmax /PELOPS
1	National Super Computer Center in Guangzhou China	Tianhe-2 (MilkyWay-2) - TH-IVB-FEP Cluster, Intel Xeon E5-2692 12C 2.200GHz, TH Express-2, Intel Xeon Phi 31S1P NUDT	3,120,000	33.86
2	DOE/SC/Oak Ridge National Laboratory United States	Titan - Cray XK7, Opteron 6274 16C 2.200GHz, Cray Gemini interconnect, NVIDIA K20x Cray Inc.	560,640	17.59
3	DOE/NNSA/LLNL United States	Sequoia - BlueGene/Q, Power BQC 16C 1.60 GHz, Custom IBM	1,572,864	17.17
4	RIKEN AICS/Japan	K computer, SPARC64 VIIIfx 2.0GHz, Tofu interconnect Fujitsu	705,024	10.50

## 開発方針

- オープンソースライセンス(Apache 2.0)
- 対象マシン: 当面はスカラー型CPUを搭載した計算機(PCクラスタから京コンピュータまで)
- エネルギー微分、構造最適化計算を重点的に整備
- MPI/OpenMPハイブリッド並列を設計段階から考慮したアルゴリズム及びプログラム開発 (Module変数、サブルーチン引数の仕分け)
- 言語はFortran90のみ
- 1,2電子積分など頻繁に使う計算ルーチンのライブラリ化で開発コスト削減  
例) subroutine int2eri(eri, basis, coordinate, inttype)
- 2014年夏公開予定
- シンプルな入力形式、Gaussianのインプットを変換するスクリプトも準備

## 並列化

K. Ishimura, K. Kuramoto, Y. Ikuta, S. Hyodo, J. Chem. Theory Comp. 2010, 6, 1075.

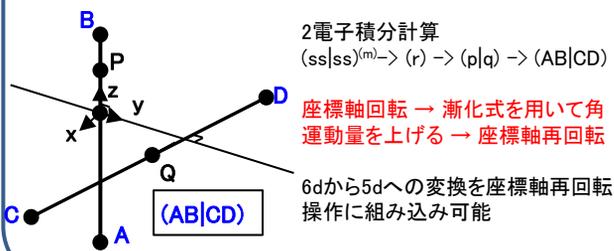
```

!$OMP parallel do schedule(dynamic,1)
do μ=n, 1, -1 <--- OpenMPIによる振り分け
do v=1, μ
  μv=μ*(μ+1)/2+v
  λstart=mod(μv+mpi_rank,nproc)+1
  do λ=λstart, μ, nproc <--- MPIランクによる振り分け
do σ=1, λ
  AO2電子積分(μν|λσ)計算+
  Fock行列に足し込み
enddo
enddo
enddo
call mpi_allreduce(Fock)
    
```

MPI/OpenMPハイブリッド並列化

## 高速化

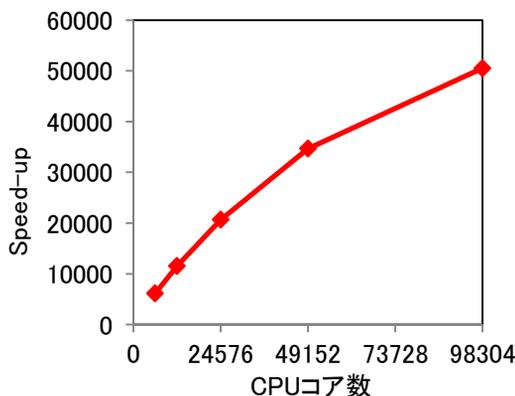
K. Ishimura, S. Nagase, Theoret Chem Acc, 2008, 120, 185.



## 計算性能

並列化効率(京コンピュータ)

(C<sub>150</sub>H<sub>30</sub>)<sub>2</sub>, cc-pVDZ (4500 基底)のB3LYP計算性能



360原子系が10万コアで計算時間2分半  
並列加速率50,500倍

GAMESSとの比較 (Xeon E5649 2.53GHz 12core, 1ノード利用) taxol(C<sub>47</sub>H<sub>51</sub>NO<sub>14</sub>)の計算時間(sec)

基底関数	GAMESS	New program
6-31G(d) (1032基底)	706.4	666.6
cc-pVDZ (1185基底)	2279.9	1434.3

GAMESSより5-40%高速

## まとめ

- 高速かつ高並列量子化学計算プログラムの土台が完成し、巨大分子の電子状態計算がルーチンワークで行えるようになった
- 来年度京一般利用枠で触媒・電池の元素戦略拠点と連携した課題が採択されたため、今後金属ナノクラスタを始めとしたナノサイズ系の計算を進めていく