

渡邊寿雄 (東京工業大学)

# 並列フラグメント分子軌道計算プログラムOpenFMOのマルチプラットフォーム化



## 研究背景

コンピュータシミュレーションによって原子や電子を露わに扱い化学反応を解明・予測する計算化学は、2013年ノーベル化学賞を受賞し、方法論やプログラムの開発から様々な応用まで幅広く研究・開発が行われている。その中でもフラグメント分子軌道(FMO)法は、たんぱく質などの巨大分子に対する第一原理電子状態計算を可能にする計算手法として注目されている。いくつかのFMOプログラムではスパコンへ向けた最適化も行われており、稲富(九州大学)らにより開発されたFMOプログラムOpenFMOは、京をはじめとしたSMPクラスタ型並列計算機で効率的な超並列実行が可能なプログラムである。

昨今、様々なアーキテクチャのスパコンが登場し、特に省電力性能に優れたアクセラレータ型スパコンはエクサスケールに向けて重要な役割を果たすことが期待されている。しかしながら、同じ計算化学分野のプログラムである分子軌道法がアクセラレータ化に素早く対応したのとは対照的に、分子軌道法のプログラム群のアクセラレータ化はその複雑なカーネルコードが原因で遅れている。そのカーネルコードの複雑さを解消することは、今後SIMD長が増大するであろうアクセラレータ向けのコード開発が可能になるだけでなく、計算化学者と計算機科学者によるプログラムの共同開発も容易にすることが期待できる。

## 目的

カーネルコードの複雑さ解消のために、電子状態の基底関数展開を最も単純な関数(s型 Gauss関数)のみを用いて再展開を試みる。このアイデア自体は非常に古くから(1956年H. PreussらのGaussian Lobe法など)あり、アルゴリズムやカーネルコードの簡素化とそれに伴うプログラムの高速化が可能であるが、その一方で計算量の増大が起るため、現在の主要プログラムでは採用されていない。この計算量増大は高々定数倍であるため、アクセラレータ化による高速化によってこの問題を克服し、実用的なFMOプログラムの開発を行うことを目的とする。

## 電子波動関数の基底関数による展開

- 分子軌道計算では電子波動関数をガウス型基底関数で展開(図1)
- 分子軌道計算のホットスポットは基底関数の4つ組の積分計算(2電子反積積分)
- 4つ組のタイプそれぞれ積分ルーチンが必要であり、プログラムの複雑さの原因

## 基底関数の再展開

- 最も単純なs型基底関数で基底関数を再展開するアイデア自体は古い(1956年H. PreussらのGaussian Lobe法など)
- アルゴリズムやカーネルコードの簡素化とそれに伴うプログラムの高速化が可能
- 一方で計算量の増大が起るため、現在の主要プログラムでは採用されていない
- この計算量増大は高々定数倍であるため、アクセラレータ化による高速化によりこの問題を克服し、実用的なFMOプログラムの開発を行うことが目的である

$$s(\alpha, x) = N(\alpha) \exp(-\alpha x^2)$$

$$p_x(\alpha, x) = N(\alpha) x \exp(-\alpha x^2)$$

$$\sim N'(\alpha)(s(\alpha, x+d) - s(\alpha, x-d))$$

$s(\alpha, x)$ : s型ガウス型基底関数  
 $p_x(\alpha, x)$ :  $p_x$ 型ガウス型基底関数  
 $\alpha$ : 軌道指数(軌道の広がりを示す)  
 $x$ : 軌道中心位置  
 $N(\alpha)$ : 規格化定数

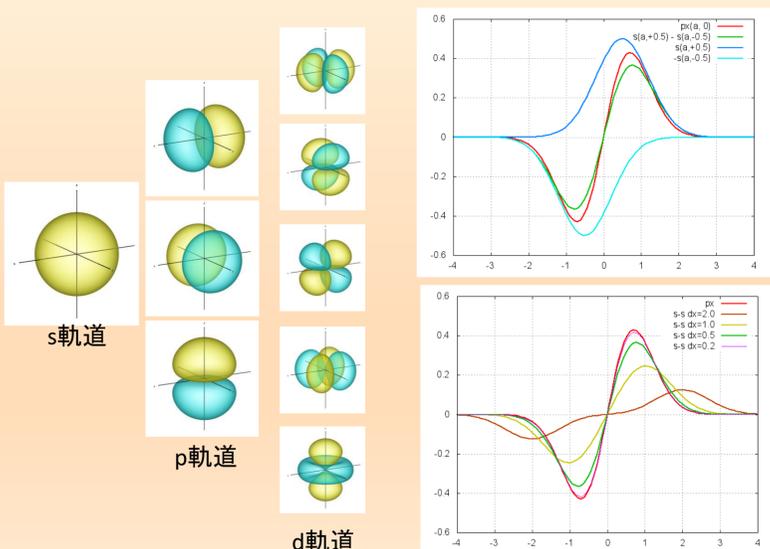


図1 ガウス型基底関数による展開

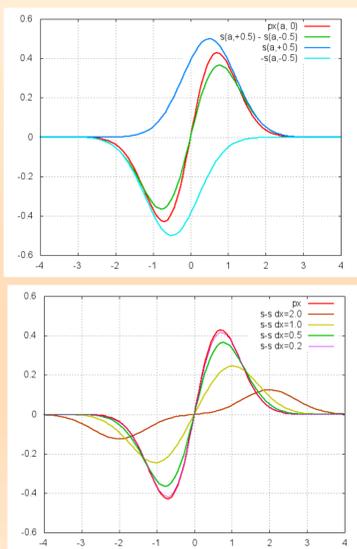


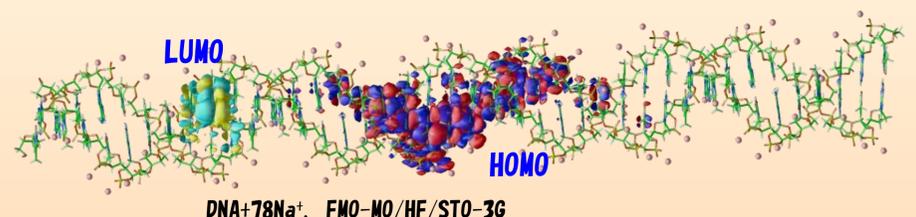
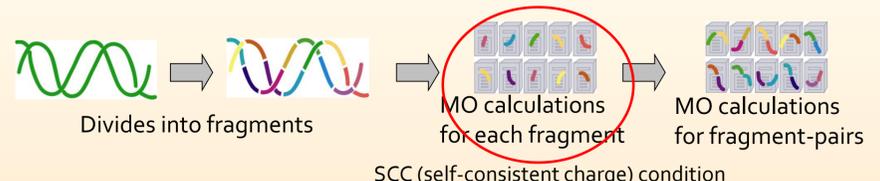
図2 s型基底関数による再展開

## 研究の意義

本研究課題における主目的は、FMOプログラムであるOpenFMOのカーネルコードの簡素化とそのアクセラレータ化である。カーネルコードの簡素化のメリットとして、これまでアクセラレータ化が遅れてきた分子軌道法のプログラム群のアクセラレータ化が容易になる点が挙げられる。本研究課題においては、アクセラレータとしてGPUとIntel Xeon Phiを想定しているが、今後新たなアーキテクチャのアクセラレータが登場した際にも他分野のアプリケーションに後れを取ることなく、アクセラレータ化が可能になるだろう。

## フラグメント分子軌道(fragment molecular orbital, FMO)法とは?

- たんぱく質や糖鎖などの大規模分子に対する量子力学に基づいた電子状態計算の高速計算手法
- 大規模分子を20~40原子程度の小規模なフラグメントに分割して、各フラグメントとフラグメントペアに対する小規模な電子状態計算を行うことで、全体の電子状態を近似
- 各フラグメント(フラグメントペア)の電子状態計算を独立に行うことができるため、並列処理向き
- モノマー(ダイマー)の電子状態計算自体も、さらに並列処理可能であるため2段階並列化が可能

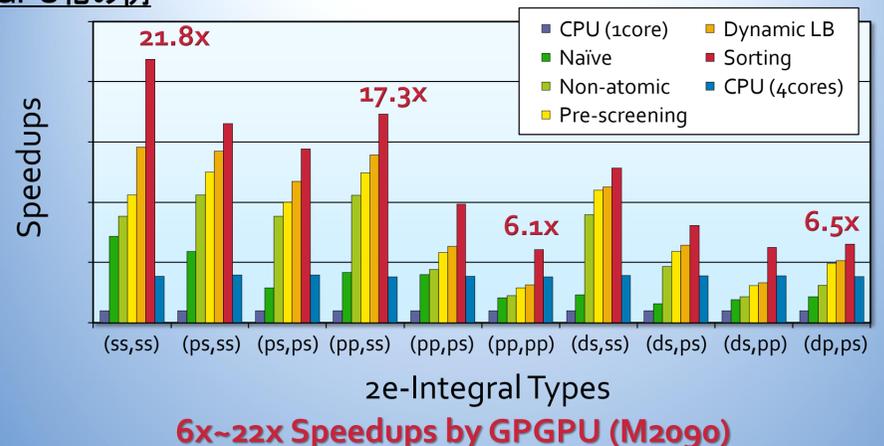


## 並列FMOプログラム OpenFMO[1,2]

- FMOプログラムの超並列化を目的として九州大学、九州先端科学技術研究所でスクラッチから開発された並列FMO計算プログラム
- MPI-1版とMPI-2版が作成されており、MPI-2版では、片側通信機構を用いて大規模入力への対応済み
- Hartree-Fock 分子軌道法に基づいたFMO法に特化した小規模なプログラムなので、最適化作業が比較的容易

[1] 稲富雄一他, 「片側通信を用いた並列フラグメント分子軌道計算プログラムの実装」, 情報処理学会研究報告 2007-HPC-111, 85-90 (2007) [2] J.Maki et al., Proc. HPCAsia07, 137-142, 2007

## GPU化の例



Ref. 梅田 宏明, 埴 敏博, 庄司 光男, 朴 泰祐, 稲富 雄一, "フラグメント分子軌道法に現れるFock行列のGPGPU化", 情報処理学会論文誌コンピューティングシステム, Vol.6, No.4, pp.26-37, 2013.

カーネルコードの簡素化による副次的効果として、計算化学者と計算機科学者によるプログラムの共同開発も容易にすることが期待できる。また、古くからある計算化学分野のアイデアが計算機アーキテクチャの変遷により再び脚光を浴びることにより、今後のスパコン上でのアプリケーション開発における計算機科学者との共同研究の重要性を計算化学分野の研究者に対してアピールし、両分野間連携の促進も期待できる。

もう一つの本研究課題の特徴として、ネットワーク側共同利用・共同研究拠点における人的交流を活かした複数拠点間の共同研究となっている点が挙げられる。各拠点の特色を生かすことで各種アクセラレータ化を進めることが可能となっている。



図3 本研究課題参加メンバー