

# NUMA-aware OpenMP Algorithm for Three-Center Electron Repulsion Integrals (+ Starting MPI Algorithm Development)

Кашпурович Ю.В.  
Олейниченко А.В.  
Стегайлов В.В.

Объединённый Институт Высоких Температур  
Московский Физико-Технический Институт  
Петербургский Институт Ядерной Физики – НИЦ "Курчатовский институт"  
Высшая Школа Экономики  
*kashpurovich.iuv@phystech.edu*

Российские Суперкомпьютерные Дни  
29 сентября, 2025

$$\hat{H}_e(r_1, \dots, r_N) \psi(x_1, \dots, x_N) = E_e(R_1, \dots, R_K) \psi(x_1, \dots, x_N), \quad x_i = \{r, \sigma\} \quad (1)$$

$$F_{\mu\nu} = H_{\mu\nu}^{\text{core}} + \sum_{\rho, \sigma} D_{\rho\sigma} \left[ (\mu\nu|\rho\sigma) - \frac{1}{2}(\mu\sigma|\rho\nu) \right] \quad (2)$$

$$(\mu\nu|\rho\sigma) = \int \frac{\chi_\mu(\mathbf{r}_1) \chi_\nu(\mathbf{r}_1) \chi_\rho(\mathbf{r}_2) \chi_\sigma(\mathbf{r}_2)}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 = \sum_{B, C}^{N_{\text{aux}}} (\mu\nu|B) (V^{-1})_{BC} (\rho\sigma|C) \quad (3)$$

$$(\mu\nu|B) = \int \frac{\chi_\mu(\mathbf{r}_1) \chi_\nu(\mathbf{r}_1) \phi_B(\mathbf{r}_2)}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \quad (4)$$

- 1 Для каждой новой геометрической конфигурации интегралы рассчитываются вновь [1].
- 2 В «прямом» подходе интегралы рассчитываются в продолжение каждой ССП-итерации (но  $3s2e$  можно и полностью хранить в оперативной памяти [2–4]).

$$(\mu\nu|B) = \int \frac{\chi_\mu(\mathbf{r}_1)\chi_\nu(\mathbf{r}_1)\phi_B(\mathbf{r}_2)}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2, \quad (\mu\nu|B) = (\nu\mu|B)$$

$$\chi_\mu(\mathbf{r}) = P_\mu(\mathbf{r}) \exp(-\alpha_\mu r^2), \quad \phi_B(\mathbf{r}) = Q_B(\mathbf{r}) \exp(-\beta_B r^2) \quad (5)$$

## Особенности

- 1 Интегрирование осуществляется по оболочкам (libcint [5]).
- 2 Оболочки имеют разные размеры.
- 3 Оболочки интегрируются за разное время.

# Трёхцентровые кулоновские интегралы

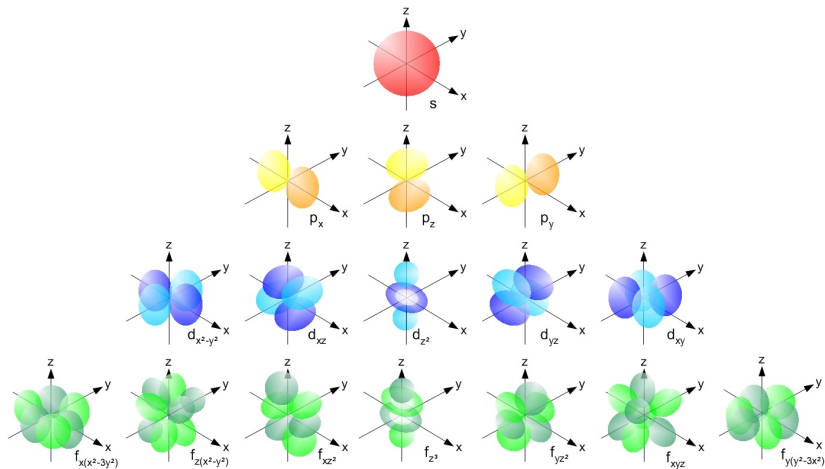


Рис.: spdf-орбитали (ссылка: [Wikimedia Commons](#))

# Трёхцентровые кулоновские интегралы

$$(\mu\nu|B) = \int \frac{\chi_\mu(\mathbf{r}_1)\chi_\nu(\mathbf{r}_1)\phi_B(\mathbf{r}_2)}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2, \quad (\mu\nu|B) = (\nu\mu|B)$$

|                      |              |          |                   |              |          |                   |              |          |                   |          |
|----------------------|--------------|----------|-------------------|--------------|----------|-------------------|--------------|----------|-------------------|----------|
| $N_{AO}(N_{AO}+1)/2$ |              |          |                   |              |          |                   |              |          |                   |          |
| $N_{aux}$            | 111          | ...      | $11N_{AO}$        | 122          | ...      | $1N_{AO}2$        | 133          | ...      | $1N_{AO}3$        | ...      |
|                      | 211          | ...      | $21N_{AO}$        | 222          | ...      | $2N_{AO}2$        | 233          | ...      | $2N_{AO}3$        | ...      |
|                      | $\vdots$     | $\ddots$ | $\vdots$          | $\vdots$     | $\ddots$ | $\vdots$          | $\vdots$     | $\ddots$ | $\vdots$          | $\ddots$ |
|                      | $N_{aux} 11$ | ...      | $N_{aux} 1N_{AO}$ | $N_{aux} 22$ | ...      | $N_{aux} N_{AO}2$ | $N_{aux} 33$ | ...      | $N_{aux} N_{AO}3$ | ...      |
|                      | $N_{AO}$     |          |                   | $N_{AO}-1$   |          |                   | $N_{AO}-2$   |          |                   |          |

Рис.: Массив интегралов (хранение по столбцам)

## Задачи

- ❶ Обеспечить локальность хранения элементов массива.
- ❷ Сбалансировать параллельный расчёт интегралов.

## Дизайн алгоритма: параллельное интегрирование

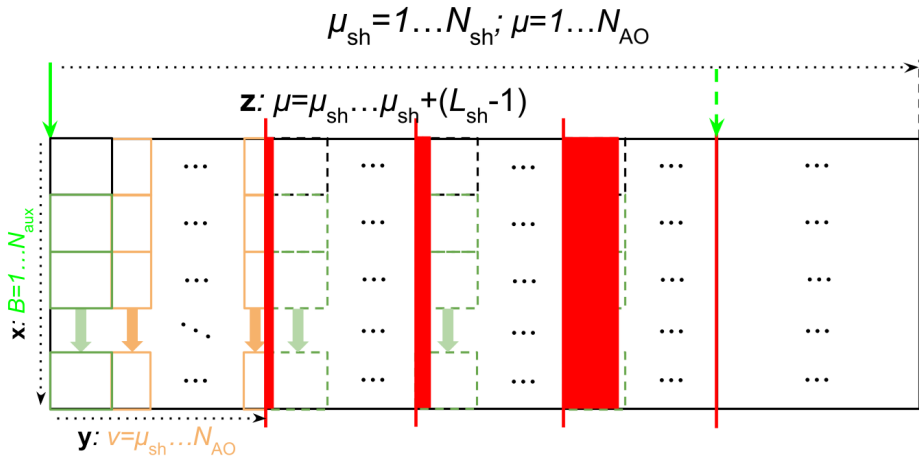
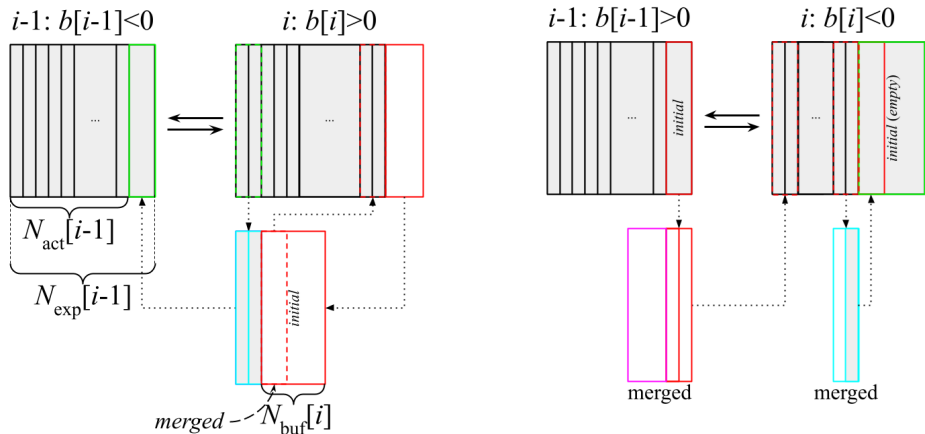


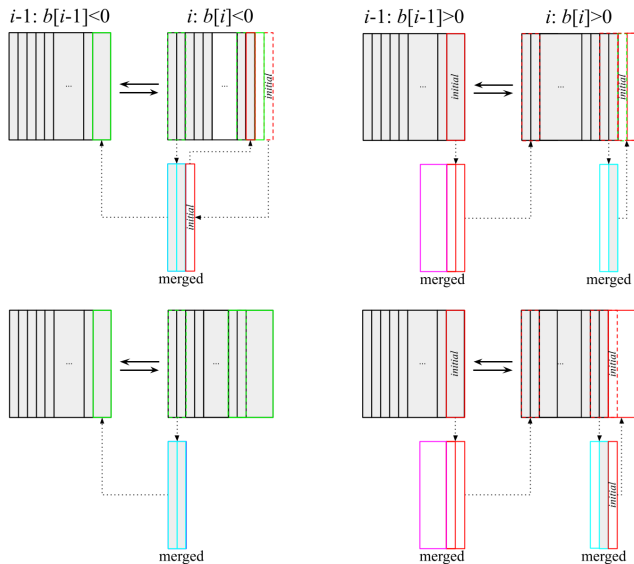
Рис.: Заполнение массива интегралов

# Дизайн алгоритма: шаги релаксации и слияния

$$b[i] = \begin{cases} N_{\text{buf}}[i] - (N_{\text{exp}}[i] - N_{\text{act}}[i]), & i = 0; \\ N_{\text{buf}}[i] - (N_{\text{exp}}[i] - N_{\text{act}}[i]) + b[i-1], & i \neq 0. \end{cases} \quad (6)$$



# Дизайн алгоритма: шаги релаксации и слияния





## Вычислительный узел 2x AMD EPYC 7662 64-core CPU

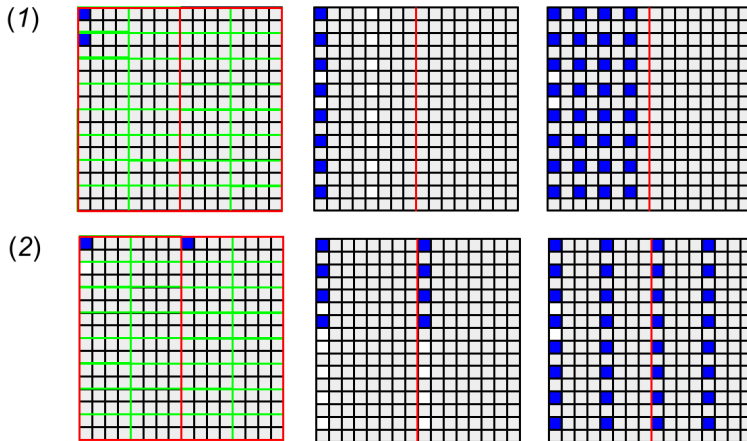
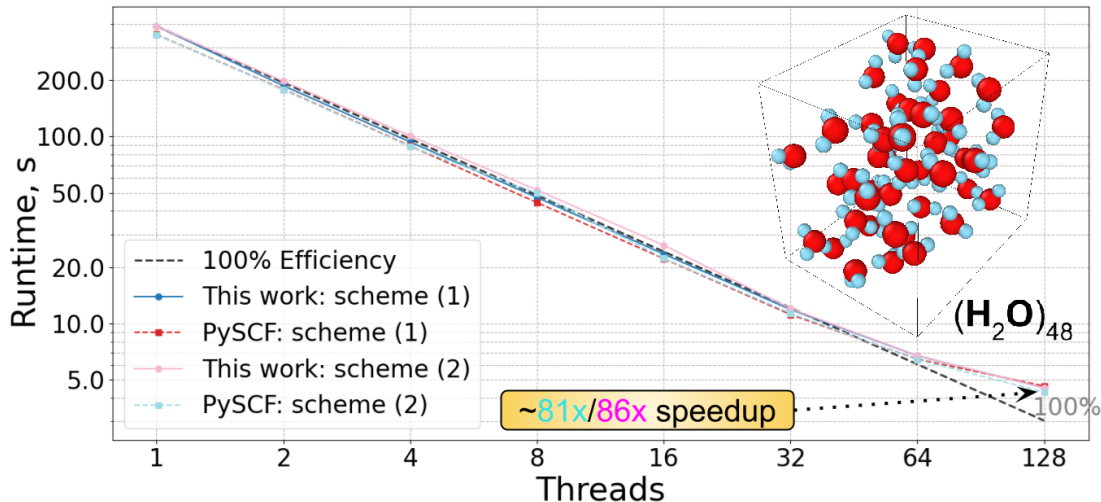


Рис.: Схемы привязки OpenMP-нитей (для проверки NUMA-awareness)

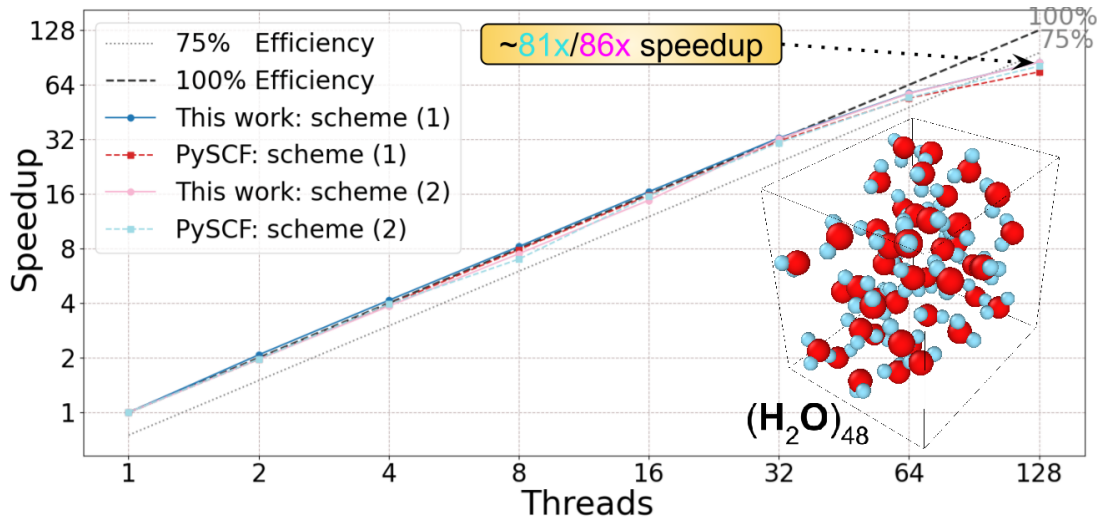
# Тестирование: масштабируемость расчёта интегралов (OpenMP)

**Базис** AO (AUX) – def2-TZVPP(-RIFIT):  $N_{\text{AO}} = 2832/1104$  ( $N_{\text{aux}} = 6528/2016$ )  $\sim 200$  ГБ

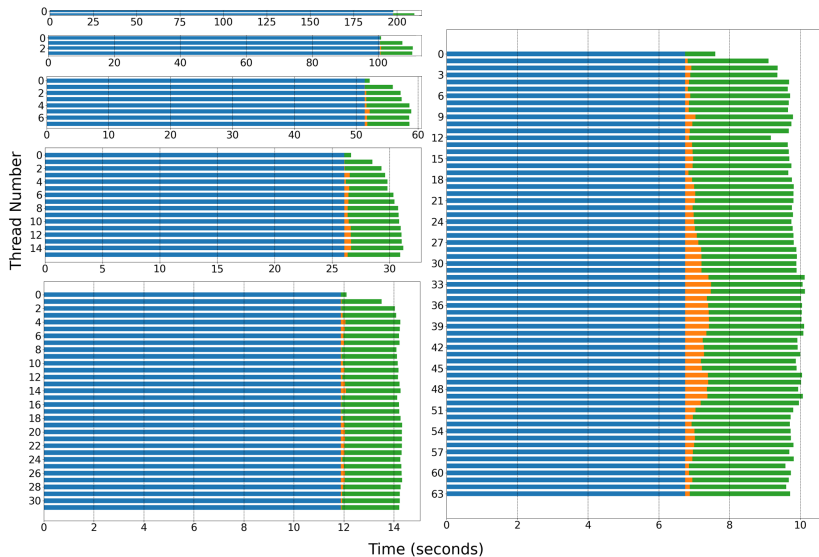


# Тестирование: ускорение расчёта интегралов (OpenMP)

**Базис** AO (AUX) – def2-TZVPP(-RIFIT):  $N_{\text{AO}} = 2832/1104$  ( $N_{\text{aux}} = 6528/2016$ )  $\sim 200$  ГБ

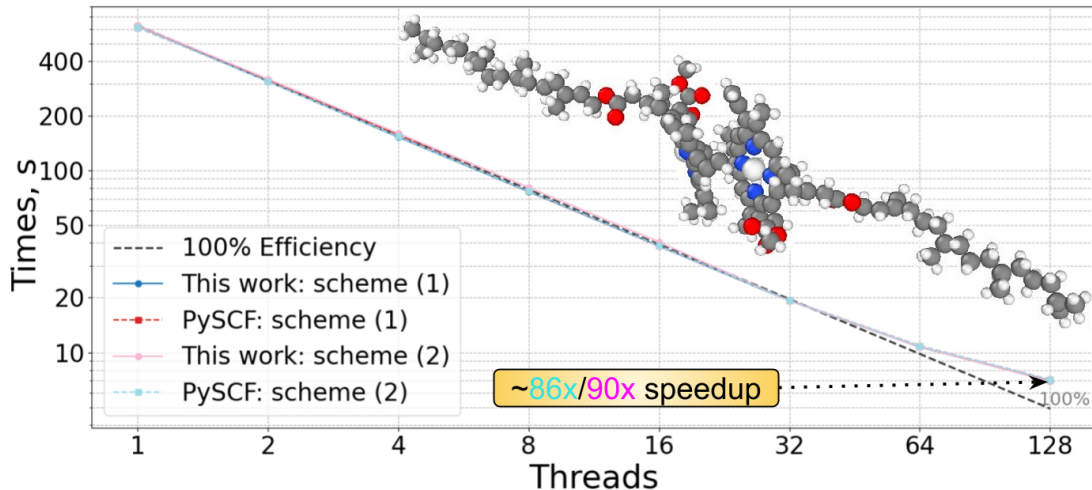


# Тестирование: время работы различных этапов алгоритма (OpenMP)



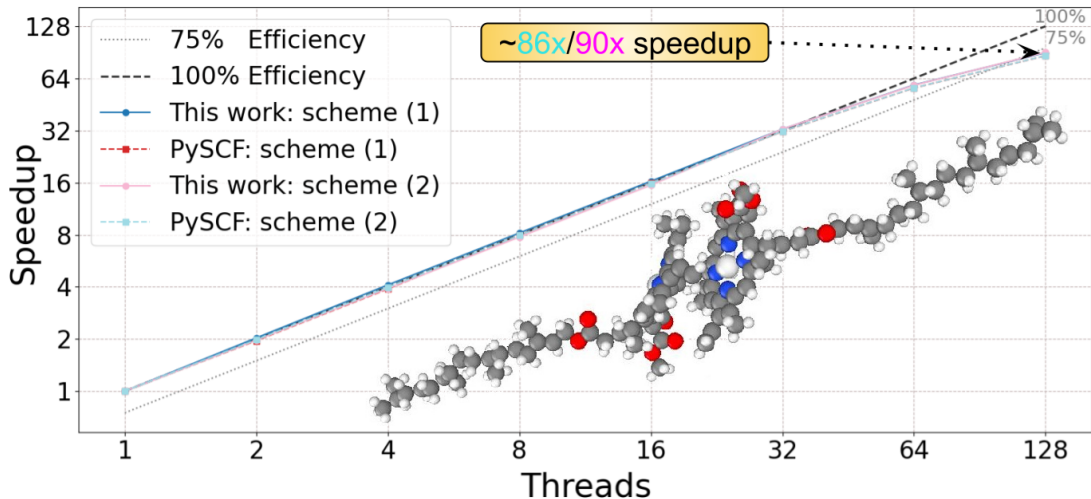
# Тестирование: масштабируемость расчёта интегралов (OpenMP)

**Базис** AO (AUX) – def2-SVP(-RIFIT):  $N_{\text{AO}} = 2548/1216$  ( $N_{\text{aux}} = 8248/2944$ )  $\sim 200$  ГБ

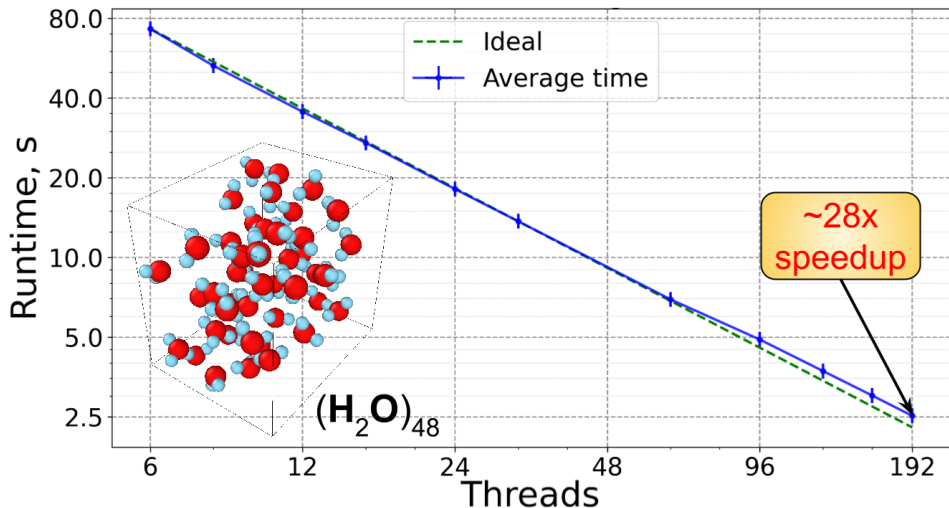


# Тестирование: ускорение расчёта интегралов (OpenMP)

**Базис** АО (AUX) – def2-SVP(-RIFIT):  $N_{\text{AO}} = 2548/1216$  ( $N_{\text{aux}} = 8248/2944$ )  $\sim 200$  ГБ

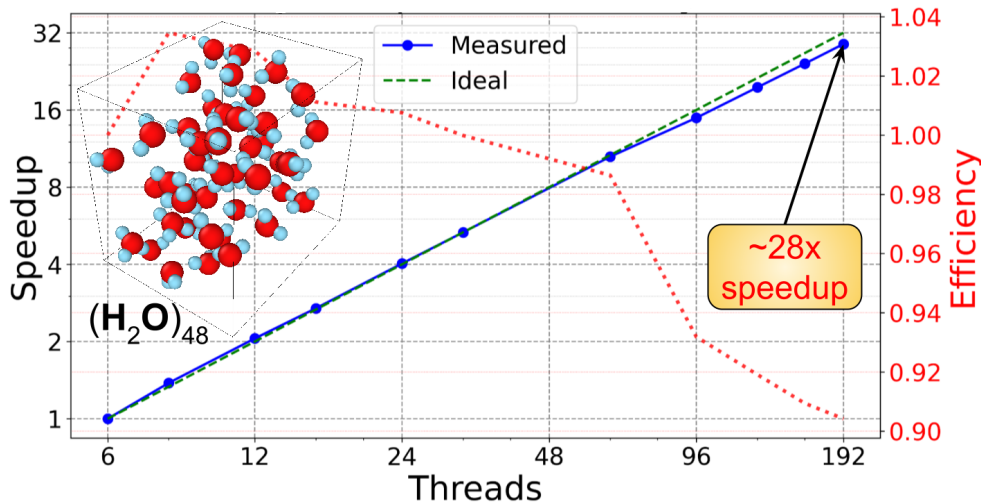


**Вычислительные узлы** 32x Intel Xeon E5-2683 v4 6-core CPU; **Сеть** Infiniband FDR



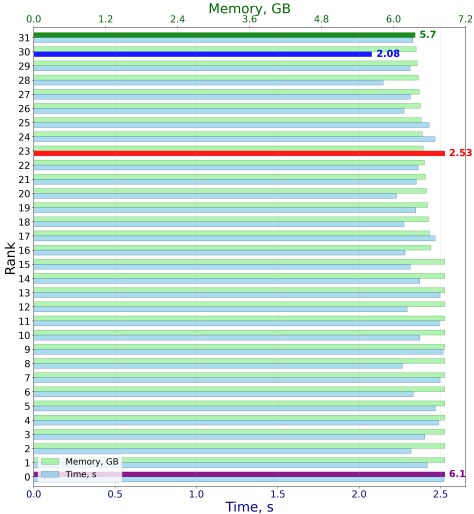
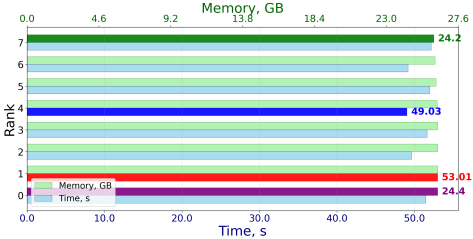
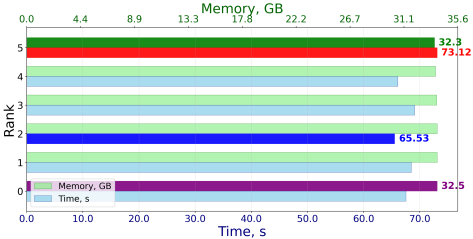
# Тестирование: ускорение расчёта интегралов (MPI/OpenMP)

**Базис** AO (AUX) – def2-TZVPP(-RIFIT):  $N_{\text{AO}} = 2832/1104$  ( $N_{\text{aux}} = 6528/2016$ )  $\sim 200$  ГБ





# Тестирование: распределение времени работы процессов и объёма использованной каждым из них памяти (MPI/OpenMP)



## Прекрасная реальность

- ➊ Масштабируемый алгоритм расчёта трёхцентровых кулоновских интегралов для распределённых (MPI/OpenMP) и распределённых с разделяемой памятью систем (OpenMP).
- ➋ Для OpenMP реализована схема балансировки вычислений и памяти, а алгоритм уже применялся в рамках вычислений методом ХФ.

## Светлое будущее

- ➊ Оптимизировать шаг релаксации, устранив избыточное копирование памяти.
- ➋ Реализовать распределённый алгоритм метода ХФ.
- ➌ Выполнить балансировку методом «кражи задач» и сравнить с предложенной.
- ➍ Добавить прескриннинг интегралов.

-  Hutter, J. Car-Parrinello molecular dynamics // Wiley Interdiscip. Rev. Comput. Mol. Sci. 2011. Vol. 2, No. 4. P. 604–612.
-  Sun, Q. et al. PySCF: the Python-based simulations of chemistry framework // Wiley Interdiscip. Rev. Comput. Mol. Sci. 2017. Vol. 8, No. 1. P. e1340.
-  Glebov, I. O., Poddubnyi, V. V. An effective algorithm of the Hartree–Fock approach with the storing of two-electron integrals in the resolution of identity approximation // Russ. J. Phys. Chem. A. 2024. Vol. 98, No. 4. P. 617–625.
-  Kashpurovich, I. V., Oleynichenko, A. V., Stegailov, V. V. Achieving the maximum performance of the resolution of the identity approximation in the Hartree-Fock method // Commun. Comput. Inf. Sci. 2025. (Accepted for publication)
-  Sun, Q. Libcint: An efficient general integral library for Gaussian basis functions // J. Comput. Chem. 2015. Vol. 36, No. 22. P. 1664–1671.