

2P05

FMO-MO 法による大規模分子軌道計算: グリッド環境下での FMO 計算

○梅田宏明^{1,2*}、稲富雄一³、渡邊寿雄^{1,2}、石元孝佳^{1,2}、長嶋雲兵^{1,2}

¹科学技術振興機構 CREST、²産業技術総合研究所 計算科学研究部門、

³九州大学 情報基盤センター、*E-mail address: h-umeda@aist.go.jp

生体分子のような大規模系の分子軌道計算ではフォック行列の生成に全計算時間の 9 割以上の時間を費やすことが知られており、巨大な全系のフォック行列計算を回避するための様々な手法が開発されてきた。フラグメント分子軌道法(FMO 法)[1,2]は、系をより小さなフラグメントに分割することによりこのような大規模分子軌道計算を可能にする手法である。また FMO 法は計算量が小さいだけでなく並列化も比較的容易であり、非常に大規模分子軌道計算に向いている。我々のプロジェクトではこの FMO 法を拡張する FMO-MO 法[3]についての研究・開発およびグリッド化を行っており、FMO-MO 計算の一部として FMO 計算をグリッド環境下で効果的に実行する必要がある。そこ FMO 計算プログラムの一つである ABINIT-MP [2]をグリッド環境下で実行し、その影響を調査した。

ABINIT-MP は並列プログラミング API である MPI を利用したプログラムであり、グリッド環境下で動作する MPI ライブラリ GridMPI [4]を利用することで、グリッド環境下での FMO 計算を実行することができる。グリッド環境下での並列実行では、広域ネットワーク等にみられる遅い通信速度や通信遅延はもちろん、異なる計算機構成の PC を多数接続することによる負荷分散への影響も問題となる。Fig.1 は単一クラスタで実行した FMO 計算における MPI のプロファイルの一部である。ABINIT-MP(Ver.20020626)は動的負荷分散を実装していないため、均一な計算機構成の PC クラスタにおいても負荷分散の不均衡が目立ってしまっている。またコミュニケーター内の通信頻度が大きいいため、通信遅延を考慮したグループ化も重要になるとと思われる。

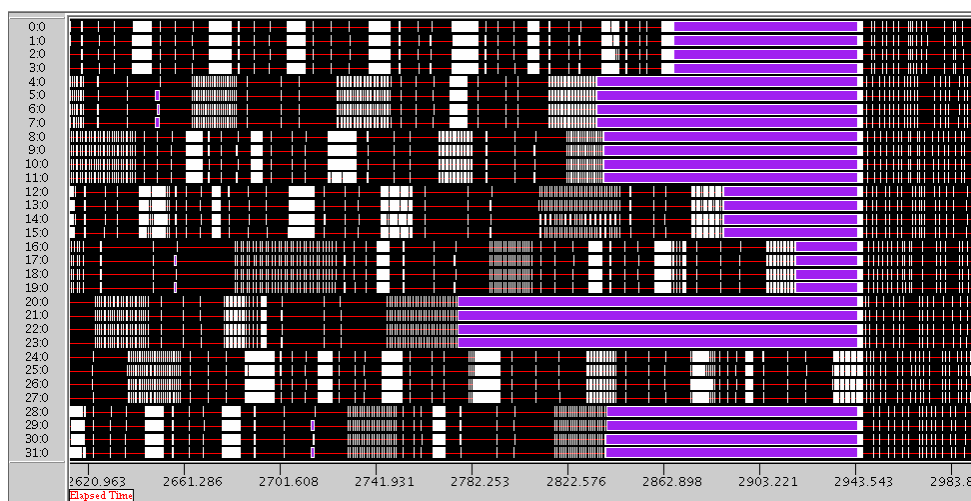


Fig. 1 MPI timing profile in FMO calculation (Lysozyme FMO/HF/STO-3G).

謝辞: 本研究の一部は科学技術振興機構, CREST プロジェクト「グリッド技術を用いた大規模分子シミュレーションプログラムの開発」(研究展示 T1)によるものである。

[1] K. Kitaura et al., *Chem. Phys. Lett.*, **312**, 319 (1999), K. Kitaura et al., *Chem. Phys. Lett.*, **313**, 701 (1999).

[2] T. Nakano et al., *Chem. Phys. Lett.*, **318**, 614 (2000). [3] Y. Inadomi et al., *Chem. Phys. Lett.*, **364** 139

(2002). [4] <http://www.gridmpi.org/>.