

グリッド技術を用いた 並列フォック行列計算プログラムの開発

○梅田宏明^{1,2*}、稲富雄一^{1,2,3}、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いる。このような大規模分子軌道計算を可能にするための手法として、ボトルネックとなっているフォック行列の生成を何らかの高速計算機にオフロードする方法がある。我々はEHPC (Embedded High Performance Computing)プロジェクト[1]においてフォック行列生成専用計算機を開発することにより、これの実現を目指してきた。一方、近年のPCの高速化やインターネット環境の発達により、多数のPCを接続して計算するグリッド技術が現実的なものとなってきた。本研究では、フォック行列の生成をオフロードする対象としてグリッド環境を想定し、広域ネットワークで接続された複数のPCクラスタシステムにおいても効果的に動作するフォック行列計算プログラムを開発した。

EHPCプロジェクトにおいて、階層的な構造を持った並列コンピュータシステムにおいても効果的に並列計算が可能な多段階動的負荷分散アルゴリズムを開発した[2]。GridRPCはこのような階層的な構造に向けたグリッドプログラミングモデルであり、EHPCプロジェクトにおいて開発したプログラムを移植することが可能である。そこで我々はGridRPCにMPIを組合せて利用する(Fig. 1)ことが可能なグリッドミドルウェアであるNinf-G [3]を用いてフォック行列生成ルーチンを開発し、GAMESS [4]に実装した。このプログラムを使ってグリッド環境であっても効率良く計算機資源を利用できていることが確認できた。

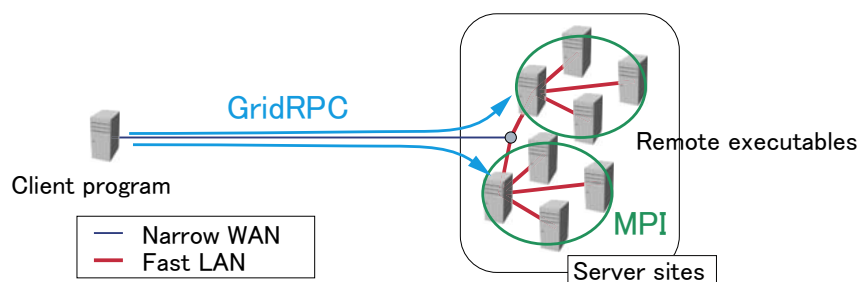


Fig. 1 GridRPC/MPI hybrid model with Ninf-G grid middleware.

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 T02)によるものである。

[1] <http://www.ehpc.jp/>. [2] H. Umeda et al., *J. Comput. Chem. Jpn.*, **4**, 179(2005). [3] Y. Tanaka et al., *J. Grid Comp.*, **1**, 41(2003); <http://ninf.apgrid.org/>. [4] M. W. Schmidt et al., *J. Comput. Chem.*, **14**, 1347(1993); <http://www.msg.ameslab.gov/GAMESS/GAMESS.html>.