

ハイブリッド並列結晶計算法による酢酸結晶構造予測

○佐藤充晃¹, 上林紺¹, 小幡快之助¹, 小畑繁昭², 後藤仁志¹ (豊橋技大院, 産総研)

¹豊橋技術科学大学大学院 (〒441-8580 愛知県豊橋市天白町雲雀ヶ丘 1-1)

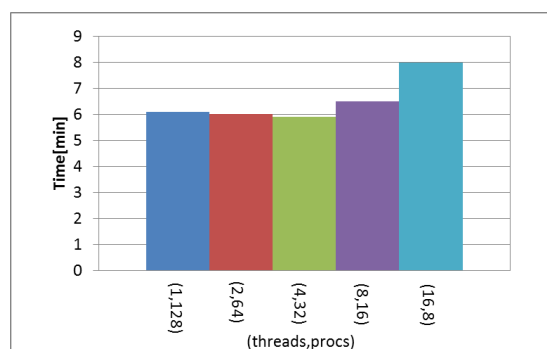
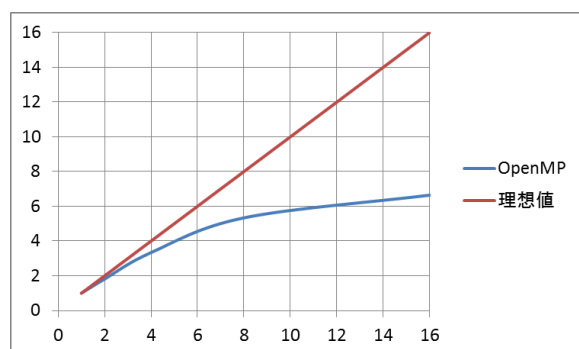
²産業技術総合研究所 (〒305-8568 茨城県つくば市梅園 1-1-1 中央第2)

同じ分子が複数の異なる結晶構造を持つ結晶多形現象を示す有機化合物は多く存在し、それらは異なる物性を持つ。酢酸もその一つであり、現在、2種類の結晶構造が確認されている[1,2]。一方、最近我々は、二分子複合体構造の網羅的探索プログラムを開発し、酢酸二量体構造の探索を行ったところ、酢酸の結晶構造に観測される二量体ユニットは、必ずしも安定な二量体構造ではないことが分かった。そこで本研究では、汎用分子計算ソフトウェア CONFLEX[3]に導入された結晶多形構造探索法を検証し、より確実に効率的な探索法を検討するため、酢酸分子の結晶多形構造を探索し、新たな結晶多形の可能性を探る。

また、結晶構造予測において、数多く試行しなければならない結晶構造最適化にかかるコストを抑えることは重要である。そこで、分散メモリ型 MPI と共有メモリ型 OpenMP を組み合わせたハイブリッド並列分散処理技術を CONFLEX の結晶計算に導入する。今回は、単位格子内の分子間相互作用計算を OpenMP によるマルチスレッド処理を行い、単位格子間の分子間相互作用計算を MPI により分散処理することでハイブリッド化を試みる。ここでは、そのハイブリッド並列結晶計算法のベンチマーク結果の一部について報告する。

ハイブリッド並列結晶計算の検証は、京大スパコン Green Blade 8000 を用いた。同システムはノード辺り 2 つの Intel Xeon E5 系プロセッサ (2.6 GHz, 2 CPUs×16 cores = 32 cores), メインメモリ 64 GB を搭載し、ノード間を InfiniBand FDR x2 で接続している。今回の検証では、最大使用コア数を 128 に固定し、OpenMP/MPI の効率的な負荷分散を検討した結果を示す。

酢酸による検証は現在進行中である。ここでは、アスピリン結晶におけるベンチマークの結果を示す。下図に OpenMP のみによる並列化効率 (左図) とハイブリッド並列結晶計算の実行時間 (右図) を示した。ポスター発表では、酢酸分子を用いた検証と結晶構造予測について報告する。



参考文献

- [1] R.Boese, D.Blaser, R.Latz, A.Baumen, *Acta Cryst., C: Cryst. Struct. Commun.* 55, 9900001 (1999).
 [2] A. Dawson, D. R.Allan, S. Parsons, M. Ruf, “, *J. Appl. Cryst.*, 37, 410-416 (2004).
 [3] 大田一男, 後藤仁志, *Mol. Sci.*, 1, NP001 (2007).