

4P064

量子化学計算実行を補助する Cyber Science Infrastructure の開発

(東工大・GSIC*, NII**) ○西川 武志*, 松岡 聡*, **

【序】 Gaussian 03、GAMESS、Molpro、NWChem、UTChem 等に代表されるパッケージプログラムの普及により、計算化学の専門研究グループであっても自前での開発を中止し、それらを利用したり自前の手法を追加機能として実装したりするようになってきている。計算化学の初心者や非専門家がパッケージプログラムをブラックボックスとして利用するのは当然の帰結と言える。極論すれば入力データの形式さえ整えば内容を全く理解していない利用者でもジョブを実行することが可能である。意味のあるシミュレーションを実行するためには十分な知識と経験が必要であり、現状では専門家との連携ができない場合は正しい結果を得ることが困難であり、それは単なる CPU 資源の浪費では収まらず、人的資源の浪費や欠陥生産物（論文、製品）を生み出しかねない。ところが計算化学の専門家は新しい手法の開発を優先しがちであり、計算化学を手段として用いる計算科学の非専門家で十分な経験を持つ先行者は自らのノウハウを他者に提供するのには倦厭しがちである。

これに対する解決策として西川とその共同研究者はこれまで量子化学の専門知識と経験を、グリッド技術を用いて、広く共有する仕組みとして量子化学グリッドを開発し構築してきた[1-3]。これにより計算内容に対し適切な計算条件の設定と計算資源の選択の自動化、多数の専門家の知識や、量子化学グリッドの利用者の経験を知識データベースに反映する仕組みの自動化、これらにより一定の計算資源の利用効率の向上が図れるようになった。

このように知財優先権を確保する仕組みを備え、先行者の利益を守った上で、量子化学プログラムの利用者に協力してもらい、知見を収集する実証実験も 2004 年から 2007 年 6 月末まで行った[4]。

ところが、東京工業大学（以下、東工大）に 2006 年 3 月に導入され 2006 年 4 月から稼働し始めたアジア No.1、日本 No.1 のスーパーコンピューティングキャンパスグリッドシステム、TSUBAME Grid Cluster（以下、TSUBAME）は、東工大の以前のシステムの 65 倍の演算性能を誇るとともに、バッチキューに実行時間制限が原則存在しない運用がなされている。そのため、量子化学グリッドで開発して来た量子化学プログラムの入力ファイルを読み込み、過去のジョブ実行履歴から必要な CPU、メモリ、ディスク等をロバストな回帰分析により予測するメタスケジューラが、有効でないジョブが多数存在することが判明した（図 1）。

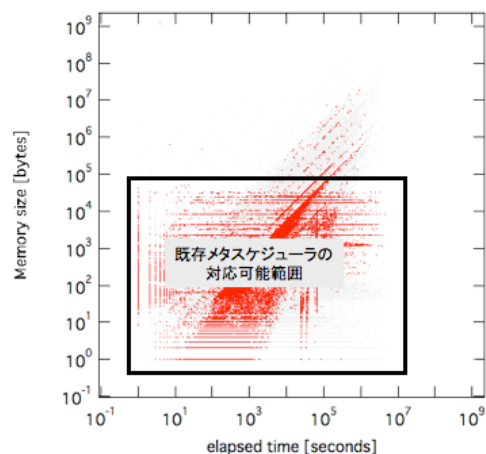


図1 既存メタスケジューラの計算資源量予測適応範囲（太枠内）とそれを超える TSUBAME Grid Cluster 上のジョブの存在

【目的】 Gaussian 03 を代表とする量子化学アプリケーションプログラムを対象に、それぞれの入力ファイルから必要とする計算資源を予測するメタスケジューラの適用範囲を拡大し、計算資源の有効活用を図る量子化学計算実行を補助する Cyber Science Infrastructure の開発を目指す。

【目標】 数ヶ月に渡り、かつ数百並列までのジョブ実行が可能な環境を提供している TSUBAME において、入力ファイルの情報のみならず、ジョブ実行者のプロフィール（誰がそのジョブを実行したか）を予測のための説明変数に加えて資源予測を改善する。

【参考文献】

- [1] 「量子化学計算における計算資源予測機能の改良」, 西川武志, 伊藤智, 長嶋雲兵, 関口智嗣, 情報処理学会論文誌: コンピューティングシステム, Vol.46 No.SIG7(ACS10), pp.28-34, (2005) .
- [2] 「Estimating required CPU time for iterative procedures in quantum chemical calculation by Quantum Chemistry Grid meta-scheduler」, Takeshi Nishikawa, Proceedings of NPC 2006: IFIP International Conference on Network and Parallel Computing, Tokyo (2006).
- [3] Takeshi Nishikawa, Umpei Nagashima, and Satoshi Sekiguchi, "Design and implementation of Intelligent Scheduler for Gaussian Portal on Quantum Chemistry Grid", Lecture Notes in Computer Science (LNCS) ,2659, pp.244-253 (2003)
- [4] NEDO 平成 16 年度産業技術研究助成事業「量子化学グリッド ASP 実証実験」