

1A15 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

(¹ 科技振 CREST, ² 産総研, ³ 筑波大, ⁴ 横浜市大, ⁵ 九州先端研)

長嶋雲兵^{1,2}, 櫻井鉄也^{1,3}, 立川仁典^{1,4},
石元孝佳^{1,2}, 梅田宏明^{1,2}, 北幸海^{1,4}, 渡邊寿雄^{1,2}, 稲富雄一⁵

序

JST, CREST 研究領域「シミュレーション技術の革新と実用化基盤の構築」の研究プロジェクト「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」は、グリッド技術を利用した FMO-MO 計算[1]プログラムの開発と大規模分子軌道計算の実現を目指したプロジェクト(期間:2003.10-2009.3)である。特に FMO-MO 計算に適した一般化固有値問題解法として櫻井-杉浦法[2]を利用することにより、グリッド環境下でも効果的な並列計算が可能となる。またプロトンの波動性を考慮した MC_MO 法との連携や、分散処理によるポテンシャル面の精密計算なども研究の対象としている。本発表では FMO-MO 法の概略を述べるとともに、大規模 FMO-MO 計算の計算例を紹介する。

FMO-MO 計算

我々の開発した FMO-MO 法は大規模分子軌道計算が可能なフラグメント分子軌道法(FMO)[3]を拡張した計算法であり、FMO 法では得られなかった大規模分子の分子軌道を求めることが可能である。FMO-MO 計算は主に(1)FMO 計算, (2)分子全体のフォック行列の生成, (3)フォック行列の対角化の3つのステップから構成されている(図1)。このうち FMO 法は GAMESS や ABINIT-MP 等の分子軌道計算プログラムに実装されており、タンパク質等の巨大な生体分子の FMO 計算も可能となっている。分子全体のフォック行列を生成するためには、分子サイズに対して形式的には $O(N^4)$ で表わされる計算量とともに、 $O(N^2)$ で増加するデータ量も問題となる。収束するまで繰り返しフォック行列を計算する必要のある SCF 計算法とは異なり、FMO-MO 計算では一度だけフォック行列を生成すればよく、それだけ高速かつ確実に分子軌道を求めることが可能になる。最後に実行する対角化については、一般的な解法では計算量が $O(N^3)$ であり、また十分に効率の良い並列化手法が確立していない。計算量を減らすためにフォック行列を疎行列として取り扱う手法があるが、分子軌道計算で生成されるフォック行列はこれまでの疎行列解法で取り扱ってきた行列に比べるとかなり密な行列であり、単純な適用には困難も多い。

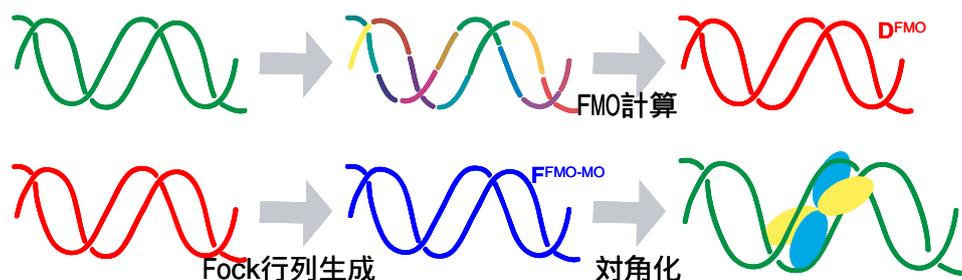


図1 FMO-MO 計算の概念図。(1)FMO 計算 (2)フォック行列の生成 (3)フォック行列の対角化の3ステップにより分子軌道を求める。

大規模 FMO-MO 計算プログラムの開発

FMO-MO 計算に関わるこれらの困難を解決するため、新たに大規模フォック行列生成プログラムを開発するとともに、大規模フォック行列対角化用の櫻井-杉浦法を開発した。FMO 計算は全系の密度行列を出力するよう修正した ABINIT-MP を用いた。また現在では GAMESS から出力した密度行列も利用できるようになっている。大規模フォック行列を生成するため、Global Arrays Toolkit [4]を用いた行列の分散共有による実装を行なった。行列を分散共有した場合に生じるオーバーヘッドを減らしながら高い並列性能を保持するため、非同期一方向通信を活用している。櫻井-杉浦法は指定したエネルギー領域内の固有値・固有ベクトルだけを計算する手法で、密行列・疎行列どちらにも適用可能である。特に FMO-MO 計算では分子軌道を最後に一度計算するだけでよいため、欲しい分子軌道のあるエネルギー領域(例えばフロンティア軌道周辺)だけを狙って計算することができる。計算は独立した複数の連立方程式を解けばよく、容易に並列化が可能である。

さらに大きな分子軌道計算を可能にするため、グリッド技術を用いて複数の PC クラスタシステムを結合し多数のプロセッサを使うプログラムも開発している。Ninf-G [5]による GridRPC/MPI ハイブリッド並列化により、規模の違う PC クラスタを結合した場合でも無駄のない並列計算が実行できた。

テスト計算および結果

図 2 は 512 残基のアミノ酸からなる epidermal growth factor 受容体(EGFR、7,837 原子)のリガンド分子(53 残基、824 原子)と結合した際の HOMO および LUMO を FMO-MO 計算 (FMO-HF/STO-3G)により求めたものである。大規模分子軌道計算に適した FMO-MO 法を用い、櫻井-杉浦法によって並列対角化を行なうことで、この系(26,461 基底)は大規模 PC クラスタである AIST スーパークラスタ[6]上で高速に計算することができた(表 1)。

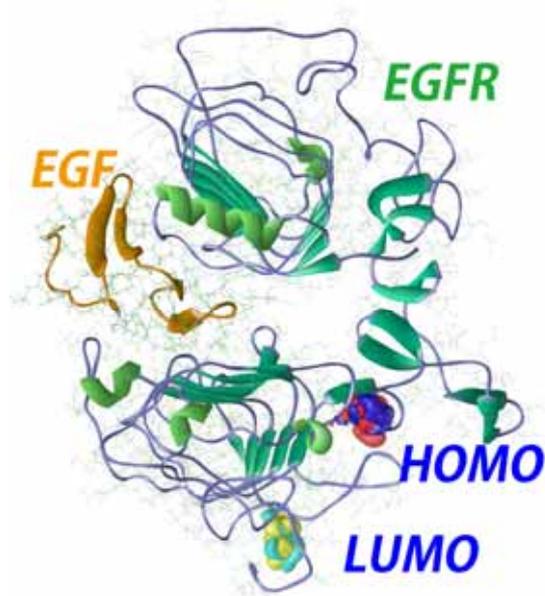


図 2 EGFR-EGF のフロンティア軌道

表1 Elapsed time for FMO-MO calculation.

	Elapsed Time	#PUs
FMO calculation	40 min	512 ^{*1}
Fock construction ^{*2}	3.9 hr	248 ^{*3}
Eigen problem	3 min	64 ^{*3}
Total	4.7 hr	

^{*1}P32 cluster; ^{*2}Screening threshold 10^{-10} ; ^{*3}F32 cluster

[1] Y. Inadomi et al., *Chem. Phys. Lett.*, **378**, 589(2002).

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

[3] T. Sakurai et al., *J. Comput. Appl. Math.*, **159**, 119(2003).

[4] <http://www.emsl.pnl.gov/docs/global/>.

[5] <http://ninf.apgrid.org/>.

[6] <http://unit.aist.go.jp/tacc/ci/supercluster.html>.