

1Pa037

二段階並列化法と FMO 法の開発

(産総研・計算科学) フェドロフ・ドミトリ、北浦和夫

【序】

生体分子の構造・物性や酵素反応の反応機構等は大変興味深い問題である。これらの理論研究のために、大規模分子の電子状態を効率的に良い精度で計算できる方法が望まれている。

FMO 法¹は標準 *ab initio* MO 法と殆んど同じ全エネルギーを再現し、しかも、効率的に生体高分子など巨大分子・分子系の計算が可能であることが示されている。FMO 法を用いた dynamics² (FMO-MD) は大規模分子における多数極小エネルギー面の探索にも有効であると思われる。

【方法】

FMO 法を、タンパク質などの生体高分子のみならず、幅広い大規模分子・分子系に適用出来る様に、一般的な量子化学 program GAMESS³ に実装した。FMO 法のように、計算をほぼ独立に実行できるような方法を効率的に並列計算するために、二段階並列化法を開発した。従来の大規模行列を並列的に分担する方法 (DDI⁴) と組み合わせ、Generalised DDI (GDDI⁵) を GAMESS に実装した。FMO 法の場合、一、二量体の一点計算を班毎に分け、各班はその内で更に計算負担 (二電子積分等) を班員内で分ける仕組みである。班間の情報通信は、数回の全一量体の密度行列の交換に限られ、並列効率は殆ど少数の計算機からなる班内で決まる為、超大規模並列計算機を高効率で使用出来ると考えられる。実際に、7 FastEthernet hub により繋がる 128 台のパソコン (PC cluster) で 75-90% の並列化効率が得られた。FMO 法の外、この二段階並列化法は数値微分等にも適用出来る。

FMO 法の適用範囲を広める為、電子交換と三量体の効果を考慮することにより計算

精度を向上させた結果、複雑な電子構造を持つ分子の計算が出来るようになり、生体分子などの化学反応機構の解析にも役立つと思われる。

【結論】

情報交換が殆んど班内に限られるタイプの計算について、GDDI で高い並列化効率を得られた。多数の計算機を班に分ける基準は、接続経路を考慮して簡単に行うことができ、大規模並列計算機に適用出来ると期待する。

【文献】

1. Kitaura, K., Ikeo, E., Asada, T., Nakano, T., Uebayasi, M., *Chemical Physics Letters*, 313 (1999), 701.
2. Komeiji, Y., Nakano, T., Fukuzawa, K., Ueno, Y., Inadomi, Y., Nemoto, T., Uebayasi, M., Fedorov, D.G., Kitaura, K., *Chemical Physics Letters*, 372 (2003), 342.
3. Schmidt, M. W.; Baldrige, K. K.; Boatz, J. A.; Elbert, S. T.; Gordon, M. S.; Jensen, J. H.; Koseki, S.; Matsunaga, N.; Nguyen, K. A.; Su, S.; Windus, T. L.; Dupuis, M.; and Montgomery, J.A. Jr. *J Comp Chem* 1993, 14, 1347.
4. Fletcher, G. D.; Schmidt, M. W.; Gordon, M.S. *Adv Chem Phys* 1999, 110, 267.
5. Dmitri G. Fedorov, Ryan M. Olson, Kazuo Kitaura, Mark S. Gordon, Shiro Koseki, submitted to *J. Comp. Chem.*