

フラグメント分子軌道 (fragment molecular orbital, FMO) 法<sup>[1]</sup>とは？

- たんぱく質や糖鎖などの大規模分子に対する量子力学に基づいた電子状態計算の高速計算手法
- 大規模分子を20~40原子程度の小規模なフラグメントに分割して、各フラグメントとフラグメントペアに対する小規模な電子状態計算を行うことで、全体の電子状態を近似(図1)
- 各フラグメント(フラグメントペア)の電子状態計算を独立に行うことができるため、並列処理向き(図2)
- モノマー(ダイマー)の電子状態計算自体も、さらに並列処理可能であるため2段階並列化が可能(図3)

図1: FMO法におけるフラグメント分割

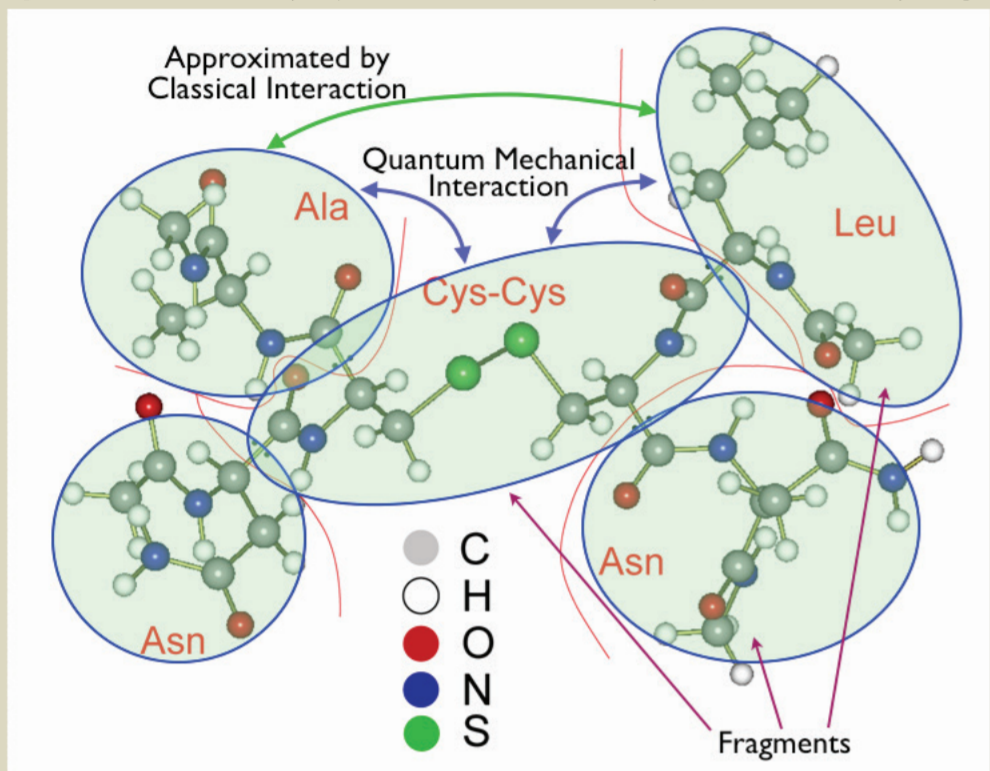


図2: FMO法の計算フロー

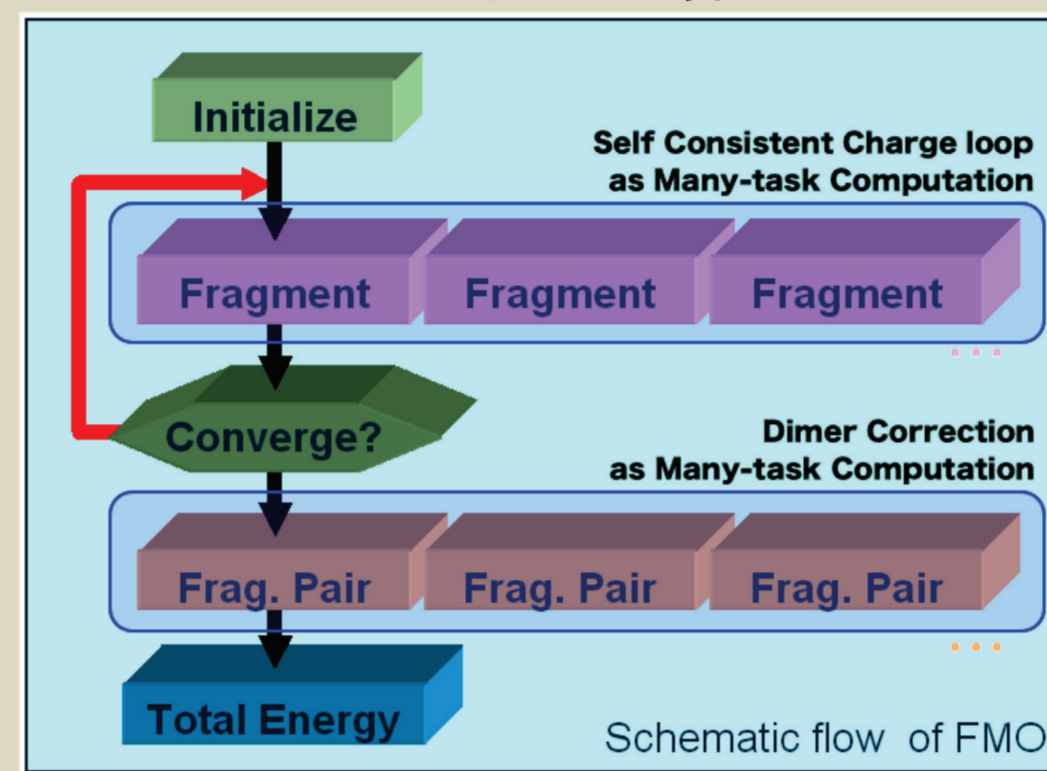
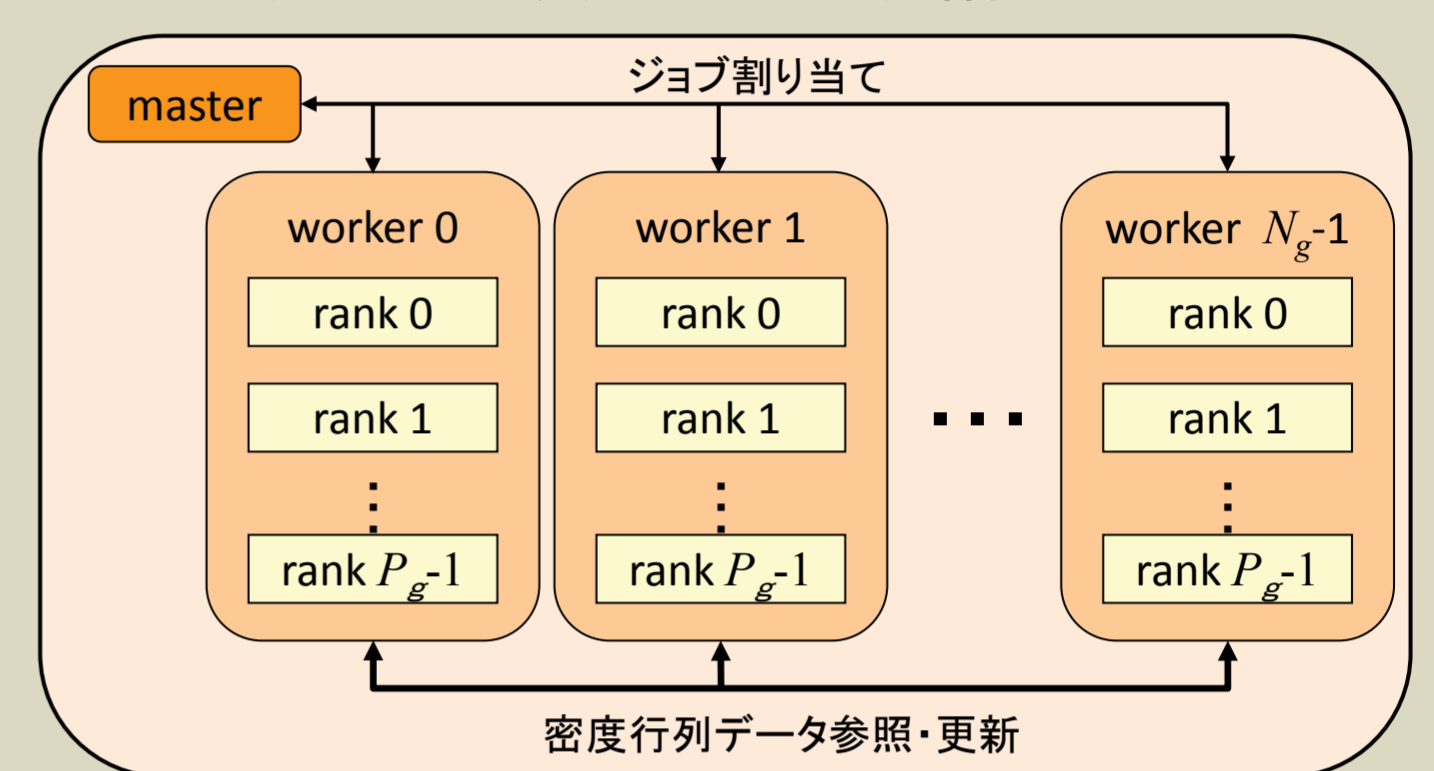


図3: FMO法における2段階並列化



## 並列FMOプログラムの問題点と本研究の目的

昨年度までの成果で、分散保存した中間データ(密度行列データ)への効率的なアクセス方法を確立し、また、FMO計算におけるカーネルである分子積分計算の負荷均等化を図り、並列性能を向上させ、8000並列時に約90%の並列化効率を達成した。しかし、数10万並列での効率実行のためには、更なる並列性能の向上が必要である。

- ワーカー間の負荷分散の状況、ならびに、通信負荷の詳細を確認するための性能評価を行う
- 評価結果に基づいて、更なる負荷均等化、あるいは、不要な同期・通信処理の削減などを行うことで、数万~数10万並列で効率的に処理できるFMOプログラムを作成する

\*: 並列FMOプログラム OpenFMO<sup>[2,3]</sup>

- FMOプログラムの超並列化を目的として九州大学、九州先端科学技術研究所でスクラッチから開発された並列FMO計算プログラム
- MPI-1版とMPI-2版が作成されており、MPI-2版では、片側通信機構を用いて大規模入力への対応済み
- Hartree-Fock 分子軌道法に基づいたFMO法に特化した小規模なプログラムなので、最適化作業が比較的容易

## 研究意義、ならびに、必要性

- 効率的な超並列処理を行うことのできるFMOプログラムができると、創薬分野におけるスクリーニングを計算機シミュレーションでサポートすることが可能になり、薬剤の開発コストの削減や開発期間の短縮に寄与できる
- 大規模分子に対する計算機実験が容易になるため、これまでモデル化などで対応していた巨大分子が関与する反応メカニズムなどを、モデル化なしで理論的に調べることが可能になる
- より大規模な分子の計算を行いたい、あるいは、より短時間に計算を行いたい、という量子化学者の要求を満たすためには、並列処理に適したアルゴリズムの開発だけでなく量子化学計算プログラムの超並列化が不可欠
- ハードウェア性能を生かしたプログラム作成のためには、理論化学者と計算機科学者との間に協力体制を確立することが大切

**謝辞** 本研究は、科学研究費補助金基盤研究(C)「超並列フラグメント分子軌道法プログラムライブラリの開発」(課題番号 22550015)、および、JST,CRESTの研究領域「ポストペタスケール高性能計算に資するシステムソフトウェア技術の創出」の研究課題「省メモリ技術と動的最適化技術によるスケーラブル通信ライブラリの開発」の支援を受けている。

**参考文献** [1] K. Kitaura et al., Chem. Phys. Lett., Vol.312, pp.319-324 (1999), K. Kitaura et al., Chem. Phys. Lett., Vol.313, pp.701-706 (1999), T. Nakano et al., Chem. Phys. Lett., Vol.318, pp.614-618 (2000) [2] 稲富雄一他, 「片側通信を用いた並列フラグメント分子軌道計算プログラムの実装」, 情報処理学会研究報告 2007-HPC-111, 85-90 (2007) [3] J.Maki et al., Proc. HPCAsia07, 137-142, 2007