Buffer法を用いた並列MO計算の開発

超並列分子軌道計算の性能向上への挑戦

分子軌道(MO)法に基づいた理論計算は、分子の構造や化学的性質、あるいは反応性などを理論的に解明するための道具であり、計算化学の専門家だけではなく、有機化学や生物化学などの研究者にも幅広く用いられている。MO法では繰返し計算を行う必要があり、その際に、分子サイズの4乗に比例する膨大な数の2電子積分と呼ばれる積分の計算・操作が必要であり、これには多くの時間を費やす。この2電子積分は、繰り返し計算の間で変化しないため、本来は繰り返し計算の最初に1度だけ計算して保存し、そのデータを2回目以降の繰り返し計算の時に再利用できる。しかしながら、たとえば水溶液中での酵素反応といった一般的な反応のMO計算を考えた場合でさえも、保存すべき2電子積分のファイルサイズが非常に大きくなり、内部メモリはもとより磁気ディスクなどの大容量な外部2次記憶装置への保存もさえも困難になる。したがって、そのようなサイズの2電子積分を持つ分子に対するMO計算では、繰返しのたびに2電子積分計算を行うdirect法が一般に用いられる。幸いなことに各繰り返しにおける2電子積分は同じであるため、積分計算は数百～数千プロセッサを用いた超並列処理が可能である。一方で、並列計算に用いるプロセッサが増えると、使用できるメモリも一般に増加するため、そのメモリ資源を余すところなく利用したい。そこで、2電子積分の一部を余っているメモリ上に保存して、繰返し計算で再利用する計算手法(buffer法)[1]を開発して、性能がどの程度向上するかを確かめた。

このBuffer法では、積分の保存順序が重要となる。MO法に現れる2電子積分には(ss,ss)や(ps,ss)など、いくつかのタイプがあって、積分タイプによって計算コストが大きく異なる(図1)。そこで、計算のコストが大きい積分から順に保存用メモリ(buffer)が一杯になるまで保存し再利用する、という方針で計算を行った。Buffer法は、このように単純な改良であるが、使ったプロセッサ数以上の速度向上が得られていること、さらに、bufferサイズが大きくなるほど性能がよくなることが分かった(図2)。したがって、AIST super cluster[2]のようにプロセッサ数が多く、プロセッサあたりのメモリサイズも大きなPCクラスタを用いたbuffer法による並列MO計算では、非常に高い並列化効率が得られるものと期待される。

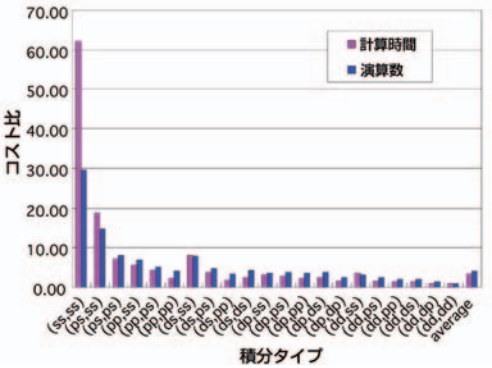

図1　各タイプの1積分値当たりの計算コスト比
(dd,dd)タイプを1とした値

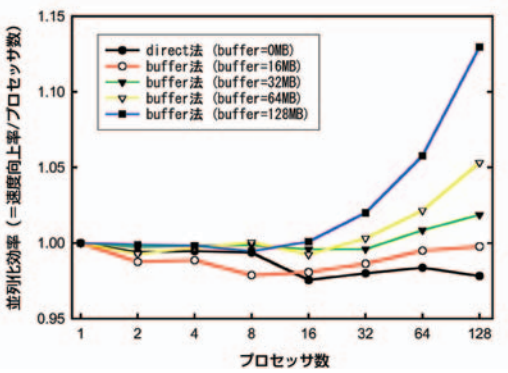

図2　いくつかのbufferサイズを用いた並列buffer法の並列化効率

いなどみゆういち
稲富雄一
y.inadomi@aist.go.jp
グリッド研究センター

関連情報
● 1) 特願 2004-010676「分子軌道法計算方法および計算装置」(稲富雄一, 長嶋雲兵, 佐々木徹).
● 2) プレス発表, 平成 16 年 5 月 10 日 : http://www.aist.go.jp/aist_j/press_release/pr2004/pr20040510/pr20040510.html