

課題名 (タイトル) :

高並列分子軌道プログラム開発

利用者氏名 :

○泰地 真弘人*

中田 一人**

坂倉 耕太**

所属 :

*和光研究所 次世代計算科学研究開発プログラム

次世代生命体統合シミュレーション研究推進グループ

生命体基盤ソフトウェア開発基盤ソフトウェア開発・高度化チーム

**日本電気株式会社

1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

次世代スパコンの生物学への展開に向け、高並列の分子軌道法 QM/MM 計算を計画しており、この QM/MM 計算への適用を前提とした分子軌道法ソフトウェアの基本部分の開発および高度化を行っている。本課題では、このソフトウェアの超並列クラスタにおける並列性能を測定・解析し、さらなる高度化の指針とすることを目的としている。

2. 具体的な利用内容、計算方法

分子軌道法ソフトウェアにおける CASSCF 計算のエネルギー計算および力の計算に関する並列性能の測定・解析を行った。

3. 結果

CASSCF 計算のエネルギー計算 (SCF 反復 1 回) と力の計算について、64 コアと 2000 コアの測定結果から算出した並列化率を示す。データは、DNA/ST0-3G (原子数 218、AO 数 798) を用いた。

表 1 CASSCF の並列化率

	並列化率(%)
全体(エネルギー+力)	99.91
エネルギー計算	99.74
力の計算	99.96

また、CASSCF エネルギー計算の中の、MO 基底変換アルゴリズムの並列性能を次に示す。

表 2 MO 基底変換の並列性能

	並列化率(%)
MO 基底変換用積分	99.93
MO 基底変換	99.96

4. まとめ

上記結果から、高い並列性能を有していることが分かった。また、エネルギー計算において、並列化していない部分があり、この部分が多少見えてきている。これは今後の高度化の課題と考える。

5. 今後の計画・展望

さらなる性能向上のために、MPI と OpenMP によるハイブリッド並列、および並列化していない部分の並列化などが必須と考えている。

6. RICC の継続利用を希望の場合は、これまで利用した状況 (どの程度研究が進んだか、研究においてどこまで計算出来て、何が出来ていないか) や、継続して利用する際に行う具体的な内容希望なし

7. 利用研究成果が無かった場合の理由

現時点での目的は、高並列性能をもつソフトウェアの開発および高度化であり、研究成果としてのシミュレーション計算ではない。しかしながら、開発したソフトウェアが高い並列性能を持っていることが検証でき、これが成果の達成であると考えている。

