

課題名 (タイトル) :

生体高分子生化学的機能解析のための分子計算技術の開発

利用者氏名 :

○木寺 韶紀
中村 春木*
山中 秀介
中田 一人所属 : 社会知創成事業 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 分子スケール研究開発チーム
*和光研究所 計算科学研究機構設立準備室

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

QM/MD 連成計算プログラム Platypus における量子化学計算コンポーネント Platypus-QM の高並列化および高機能化のための改良を進めており、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と演算性能を測定・解析し、さらなる高速化・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

QM/MD 連成計算向けのエネルギーおよび力の計算では、RDFT, CASSCF, CIS について、QM 単独のエネルギー計算では、DFT-CIS^(*), CIS (D), MP2 について、それぞれ並列性能と演算性能を測定した。

(*) S. Grimme, Chem. Phys. Lett. 259 (1996) 128-137.

3. 結果

QM/MD 連成計算向けのエネルギーおよび力の計算における RDFT では、光合成活性中心バクテリオクロロフィル a の 2 量体 (原子数=280、点電荷数=30904) / 基底関数系 cc-pVDZ (原子軌道数=2728) のデータで、図 1 および表 1 のような並列性能の結果が得られた。

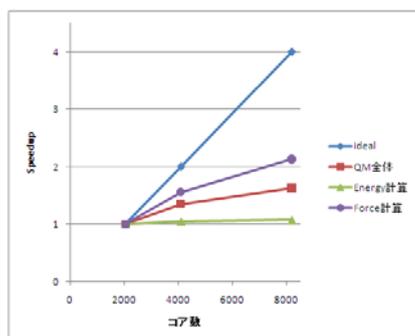


図 1 RDFT の Speedup

表 1 RDFT の並列化率 (%)

QM 全体	99.954
Energy 計算	99.521
Force 計算	99.980

また、プロファイラによる FLOPS の効率性は、表 2 のような結果が得られた。

表 2 RDFT の効率

コア数	効率 (%)
128	9.67
265	9.34
2048	6.47
4096	4.48
8192	2.70

効率については、現在 SIMD 化等による高度化を進めている。

別のデータ C₂₄₀ (原子数=240) / 基底関数系 cc-pVDZ (原子軌道数=3600) では、2048 コアと 4096 コアの測定で、QM 全体の並列化率が 99.972%であった。8192 コアでは、メモリ量の制限を超過したため途中終了した。これは、MPI ライブラリの使用メモリ量が並列数増加にともない大きくなったためと考えられる。

次に、エネルギー計算 DFT-CIS では、上記クロロフィル 2 量体を用いた基底関数系 STO-3G (原子軌道数=816) のデータで、並列化率 99.913%の結果が得られた。Speedup は図 2 のとおりであった。

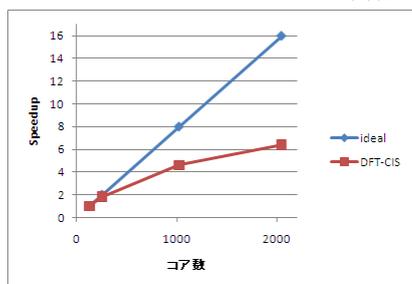


図 2 DFT-CIS の Speedup

また、プロファイラによる FLOPS の効率は、表 3 の結果が得られた。

表 3 DFT-CIS の効率

コア数	効率(%)
128	50.08
265	46.21
1024	29.22
2048	19.78

高い効率が得られたのは、2 電子積分の A0 基底から MO 基底への変換に DGEMM を用いているためである。コア数増加による効率低下が大きいのは、コア数に対して計算規模が小さいためと考えられるため、今後、規模の大きなデータを用いて、大規模並列の測定を実施する必要がある。この MO 基底への変換においては、独自開発のアルゴリズムを用いている。

4. まとめ

上記の結果から、高い並列性能と高い演算性能を有していることが分かった。

5. 今後の計画・展望

さらなる性能向上のために、ハイブリッド並列化および SIMD 化などを進めている。また、計算規模や並列数の増大にともない増大するメモリ使用量への対処も重要であると考えている。

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

引き続き、ハイブリッド並列化および SIMD 化を進め、その性能測定と分析を行う。

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高機能化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と演算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られる。