

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 詔紀*, 中村 春木**, 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

**大阪大学蛋白質研究所

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/MM 連成計算プログラム Platypus-QM/MM および、量子化学計算プログラム Platypus-QM における高並列化と高機能化を進めており、本課題では、これらプログラムの並列性能と演算性能を測定・分析し、超並列クラスタにおける高速化・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

量子化学計算においてコストの大部分を占める積分計算のうち、エネルギー計算での 2 電子積分、力の計算での 2 電子積分の一次微分について、ハイブリッド並列化および SIMD 化を実施した。そして、これらの有効性を確かめるために、Platypus-QM 内のスレッド単位での時間計測機能 (omp_get_wtime を使用) および、プロファイラを用いて、実行時間の測定・分析を実施した。

3. 結果

Platypus-QM の RHF 計算による、スレッド並列での speedup 性能を表 1 に示した。

表 1 スレッド並列 Speedup

MPI プロセス数	32	32
OpenMP スレッド数	1	8
コア数	32	256
2 電子積分	1	8.61
2 電子積分一次微分	1	8.58

(注 : Fock 行列や力の項への足し込みを含む)

測定データは、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 30904)、基底関数系 6-31G** (原子軌道数 2728) を用い、

MPI プロセス数 32 に対し OpenMP スレッド数 1 と 8 で実行時間を測定した。speedup は、8 コアに対し 8 倍を超える高い値が得られ、OpenMP 化による十分な性能が得られていることが分かった。また、Platypus-QM 内でのスレッド単位の時間測定機能の検証のために、プロファイラによる測定結果との比較を実施したところ、プロファイラ側にスレッド並列実行時に発生する不具合があることが分かった。これに対する修正の適応後、両者の結果が一致し、スレッド単位での時間測定機能の正当性を確認できた。

4. まとめ

コストの大部分を占める積分計算に、ハイブリッド並列化を実施し、OpenMP スレッド数 1 と 8 の測定によって、speedup が 8 倍を超える高い並列性能を有していることが分かった。

5. 今後の計画・展望

引き続き、高並列化と高機能化を進め、並列性能と演算性能の測定・分析を実施する。