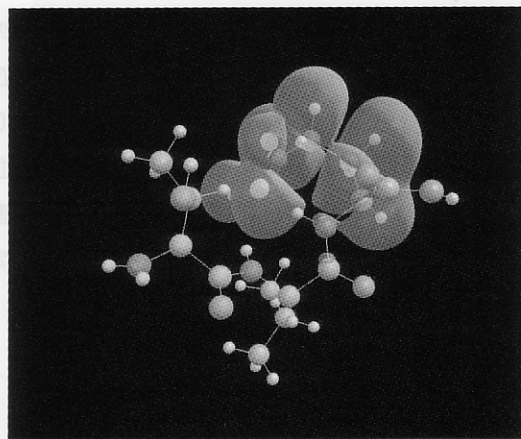


文部科学省ITプログラム「戦略的基盤ソフトウェアの開発」
次世代量子化学計算システム「ProteinDF」
—階層並列擬カノニカル局在化軌道法プログラム—
IT program of MEXT "Frontier Simulation Software for Industrial Science"
Quantum Chemical Simulation: The Next Generation, "ProteinDF"
—Hierarchical Parallel Processing of Quasi-Canonical Localized Orbital Method—
東京大学生産技術研究所 計算科学技術連携研究センター

分類	量子化学計算
キーワード	QCLO、階層並列処理、密度汎関数法
開発者	上野哲哉、柏木 浩、西川宜孝、佐藤文俊
作成年月	2004年5月
コード名	ProteinDF-QCLO
使用言語	C++

◇擬カノニカル局在化軌道 (QCLO) を用いたタンパク質全電子計算

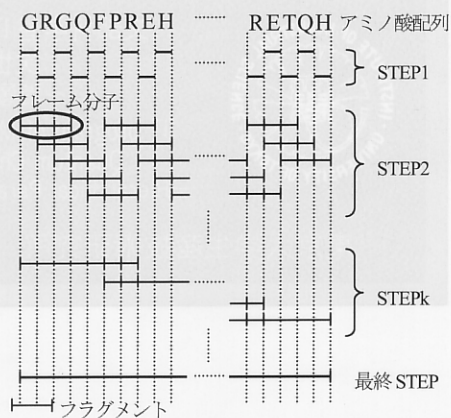
分子軌道計算では、自己無撞着 (SCF) 法による繰り返し計算によって解を求める。解の収束の良し悪しは初期値に大きく依存する。特にタンパク質のような巨大な系で計算を行うには十分に良い初期値から出発させる必要がある。この良い初期値を作成する方法として、擬カノニカル局在化軌道 (Quasi-Canonical Localized Orbital: QCLO) を用いたタンパク質全電子計算収束過程法を構築した。タンパク質全電子収束過程法では、タンパク質を1残基ずつのアミノ酸分子に分けて計算を始め、次にその結果を組み合わせて初期値とし、3残基の計算を行う。次のステップでは3残基の計算結果を組み合わせて初期値を作成し、数残基の計算を行う。これを繰り返して徐々に計算単位 (フレーム分子と呼ぶ) を大きくしていくことで、常に良い初期値を作りながら安全に計算を実行できる。次のステップへ移る際、前のステップの結果を切り貼りして繋げるが、この際つなぎ目での誤差を少なくするため、QCLOを利用して切り貼りをすることで誤差を小さくしている。切り貼りに用いるQCLOを計算する単位をフラグメントと呼ぶ。このタンパク質全電子計算収束過程法を効率よく並列処理するため3種類の並列処理を実装し、さらにそれらを組み合わせた階層的な並列処理を実装する事でより効率を高めたプログラムを開発した。バイナリ、技術資料、および基本的な計算結果などの資料を公開する。



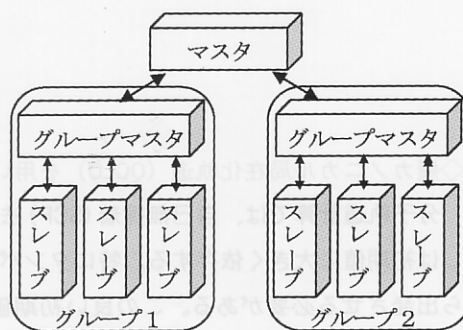
ペプチド鎖のQCLOの例

◇コードの概要

QCLO を用いたタンパク質全電子収束過程 [1] を並列計算する。タンパク質全電子収束過程では、アミノ酸分子から計算を始めて、最終的には大きな分子の計算を行う。この計算スケールの変化のため、単純な並列処理では高い並列化効率を得ることができない。本プログラムでは3種類の並列処理を実装し、収束過程の各ステップで効率の良い方法を用いた。1つ目はフレーム並行化で、これは各ステップで計算されるフレーム分子を各プロセッサに割り当て、並列処理を行うものである。2つ目はフラグメント並行化で、これは1つのフレーム分子内のフラグメント計算を各プロセッサに割り当てる方法である。3つ目はフラグメント並列化で、これは1つのフラグメントの計算で実行される行列積や対角化の処理を複数のプロセッサで分担して行うものであり、ProteinDF [2] の並列処理機能 [3] を応用した。また、本プログラムではさらなる効率の向上のために、これらを組み合わせた階層的な並列処理も実装した。階層並列では、従来のマスタ・スレーブモデルを拡張した、階層型マスタ・スレーブモデルを構築し、処理を行った。



タンパク質全電子収束過程



階層型マスタ・スレーブモデル

◇計算例

フレーム並行化：28残基ペプチド鎖の Step1 (1残基、28フレーム分子) と Step2 (3残基、26フレーム分子) について、100Base-T で接続されたワークステーション 8 台を用いて並行計算を行った結果、Step1 では89.7%、Step2では99.4%の並列化効率を得られた。

階層並列化：フラグメント並行化とフラグメント並列化を組み合わせた階層並列化で、10,000軌道のフレーム分子のモデルで並列計算を行った。計算機は同ネットワークのワークステーション 8 台を用いた。4 フラグメント (2,500軌道のフラグメント 4つ) の場合、単純な並列処理 (フラグメント並列処理) では並列化効率が77.8%であるのに対し、階層並列処理では96.7%の効率を得られた。大きさの異なる 3 フラグメント (2,500軌道のフラグメント 2つ、5,000軌道のフラグメント 1つ) の場合、単純な並列処理では並列化効率が82.0%であるのに対し、階層並列処理では91.1%の効率を得られた。

本ソフトウェアは文科省 IT プログラム「戦略的基盤ソフトウェアの開発」プロジェクト (<http://www.fsis.iis.u-tokyo.ac.jp/>) より2004年6月に公開を予定している。

◇関連論文

- [1] Kashiwagi, H. et al, *Mol. Phys.* **101** (2003) 81-86.
- [2] Sato, F. et al, *Int. J. Quant. Chem.* **63** (1997) 245-256.
- [3] Yoshihiro, T. et al, *Chem. Phys. Lett.*, **346** (2001) 313-321.