

分子科学計算推進室の設置のお知らせ

南部 伸孝*

概要 昨年承認された分子科学計算推進室の設置経緯、役割およびこの三ヶ月間の活動を紹介します。

1. 分子科学計算推進室の設置経緯と役割について

昨年4月に、大学共同利用機関法人 自然科学研究機構 分子科学研究所から情報基盤センターに赴任いたしました南部です。どうぞよろしくお願いたします。分子研時代は、もっぱら分子科学計算のためのスーパーコンピュータ環境の運用および関連した科学の研究を行って参りました。そこで、今まで培った経験を生かし活用する場として、様々な方の助言を頂き、本センター内に分子科学計算推進室の設置を行うことが出来ました。この場をお借りして、お礼を申し上げます。

さて、この分子科学計算推進室とは「何ぞや？」となるのですが、近年、利用者の多様化とともに計算環境も多様化しさらには、一人の研究者では把握しきれない分野と分野の境目のような境界領域に新たな科学が出現しています。生物と情報、物理と化学、生物と化学、生物と物理という境界領域です。あるいは、一対一ではなく、生物と情報と化学と物理という輪が、分子というキーワードで結びついているように感じられます。まるで、DNAのように、分子がらせん構造を持ちながら繋がっているように、複雑です。そのため、ある現象のメカニズムを把握するために突如、分子科学計算が必要になってしまっているような利用者が見受けられます。そこで、そのような研究をある意味、共同研究も含めて、専門分野の視点からサポートしようという試みを始めました。つまり、「分子科学」分野に関連するソフトウェアの開発及びアプリケーションプログラムの個別サポートを積極的に行うというのが主な趣旨です。

一方、九大の情報基盤センターの計算機利用者の統計を見ますと、高性能演算サーバーにおいて、全CPU時間の約24%程度を量子化学計算プログラムとして世界的に有名なGaussian社のソフトが費やしております。なぜこのように多いかですが、このソフトの優れているところである、比較的容易に「正確な答えを第一原理計算に基づき、得ることができる」という点が上げられます。つまり、得られる値は、物理定数さえ変えなければ、誰がやっても同じ答えにならなくてならず、信頼の高い結果を得ることができるからです。それは、同じ非経験的分子軌道法に基づいたプログラムを個人で作ったとしても、同様です。化学者のみならず様々な方が、実験的にその理論結果を再現し、そして、Gaussianプログラムの作者であるJohn Anthony Pople博士が1998年にノーベル賞を獲得しました。ちなみに、この分野において日本人は、実はパイオニアであり、福井謙一博士が既にノーベル賞を1981年に授与されております。

さて、この24%CPU時間は多いようで実は少ないかもしれません。昨年の秋、機会を得て、年に一度、米国で開催される「高性能計算、通信、データ保管および解析に関する国際会議(SC2005)」

*九州大学情報基盤センター学術情報メディア研究部門 nanbu@cc.kyushu-u.ac.jp

に参加することができました。大々的な参加者はもちろん米国の大企業であるマイクロソフト等の出展する巨大なブースなどですが、面白いのは米国のみならず日本、英、ドイツ、フランスの大学や研究所の方々が出展する「手作り」ブースでの意見交換の場があることです。英国で有名な Daresbury 研究所や米国イリノイ州にある Argonne 国立研究所も出展しております。Argonne 国立研究所は皆さんご存じである MPICH ライブラリーの開発もととなります。このような出展の中で、よく目立つのはやはり分子科学関連のパネルやポスターがかなりあることです。Texas A & M 大学のスーパーコンピュータ部門の責任者と話をすると、70%のジョブが Gaussian だということでした。ちなみにこのセンターのコンピュータの性能は合計で約 900GFLOPS です (2003 年に導入)。一方、



Daresbury 研究所の研究者と意見交換

日本での研究は、主に PC クラスタースを利用した研究が中心だと話すと、管理に無駄な能力を割いているのではないかな等の議論を出ておりました。確かに、科研費の傾斜配分が、このような事態を招いた感もあるように思えます。当の本人も PC クラスタースでの計算をよくやっています。理由は、うまく行くか分からない計算をすぐスーパーコンピュータ利用へ持って行くのは、あまりにもリスクが大きいためだと考えております。そこで、本推進室では、PC クラスタースで出来る計算は個々の研究者が所有する PC クラスタースで行って頂き、一方、明らかに計算が困難な巨大分子を、如何に戦略的に研究を行うかという視点に立って、分子科学計算のサポートを行いたいと考えております。後で示しますが、PC クラスタースは確かに速く、費用の面でも経済的なことも明白です。利用者はその時々に応じて使い分けるような目安の提示もしていこうと考えております。

以上が分子科学計算推進室の設置経緯と役割となります。最後に蛇足ですが、SC2005 で得た情報に、次世代計算である Field Programmable Gate Array (FPGA) 基盤技術の紹介がありました。これは、プログラムすることができる LSI のことで、皆さんご存じの東工大に導入された ClearSpeed 等がその例です。この ClearSpeed (<http://www.clearspeed.com/>) はあるソフトを介して、LSI のアルゴリズムをプログラムし直して様々なライブラリー、例えばフーリエ変換などの擬専用ボードを作ることが可能になります。一方、このような技術の登場は、別に新しいことではありません。実は我々世代より上の方々は身をもって実感されているはずです。それは、ベクトルプロセッサの出現に対応し、日本のコンピュータが世界を席卷した時代と類似する可能性を秘めています。ベクトルの時代は、速いメモリーを使い比較的少数の演算器を高速で回したのが日本の技術だったと思われませんが、今は、膨大な量の遅いメモリーと沢山の演算器を並列に一度に計算する方向へ進んでいるとのこと。そしてその代表が FPGA 基盤技術となります。仮にこの技術が、ベクトル演算器が世界を席卷したときのような可能性を秘めているのであれば、分子科学計算の分野もそこへ向かって進むべきと思われる今日この頃です。

2. 三ヶ月間の活動報告

前置きが長くなりましたが、10月末に分子科学計算推進室が設置された後、最初の活動として昨年11月25日に上記でも有名なプログラムに関し、「Gaussian 03 講習会（サポート編）」というタイトルにて講習会を実施しました。目標は利用者のスキルアップです。今までの本センターの講習会は、企業の方がされていたようですが、一步踏み込んだ講習会を行いました。そのため利用者から講習会の約一ヶ月前までに以下の二つの項目に関し、事前に電子メールにて提出をお願い致しました。

1. 研究されている系の説明と入力ファイル、また、その入力の問題点を明記してください。
2. どのような講習会を希望するかを率直にお知らせください。

このアンケートで分かったことは、Gaussian利用者の研究領域の広さを再認識させられたことと、量子化学計算の理論に対する理解度にかかなり広がりがあることでした。当日の状況は、約9名の参加があり、内訳は、九大所属の方が8名、福大所属の方が1名となりました。そして、これらの方々は、大別すると二つのグループが存在するように思われました。一つのグループは、使い込んでいる方々で、溶液中での反応や安定構造の計算において予想もしないような計算エラーを生じ、それをどのように対処すべきか？という問題に對峙している方々です。もう一つのグループは、Gaussian というよりは、量子化学計算の理論に対する理解度がまだ不十分な感じ



の方々です。そこで、前者の方々に後者の方々に引っ張っていただくような講習会ができないかと思いました。これは、小生が大学生の時に研究室の先輩方に、輪講等でいつも牽引して頂いた経験から、そのような雰囲気を作りたいと思ったからです。現在は、電子メールで意見等のやりとりすることが増えてきましたが、顔突き合わせた議論の良さを取り戻したく、思っております。馬鹿な質問を先輩に投げかけ、「アホだなあ、こうやるんだよ。」と教わる楽しさを知って頂きたいです。一方、面白い現象が、量子化学計算の理論に対する理解度がまだ不十分な感じの方々に現れました。それはまず、ほとどの方も Gaussian03 の Windows 版を利用していました。そして、その方々の研究テーマに限って、とてもパソコンでは計算の出来ないような系でありさらに、小生から見てもとても魅力的なテーマをお持ちだったことです。長く量子化学計算に携わっておりますと、自ずと計算可能な枠を作り、分子の大きさを制限しているようなところがあったのでしょう。今回参加された方々は多分そのような色眼鏡がないため、そのままの研究対象だったのでしょう。そこが実に印象深く、勉強になり、まだまだ勉強中となっています。一方、理解度の不十分な方々もじきに使い込んだ方々と同様な問題に出くわし、Gaussian は手軽に出来るように思われがちですが、実は大変難しいことを認識されると思われま。さて、このような利用者に対し、

理解度の不十分な方には、原子軌道線形結合の話や水素分子の HF 計算およびポスト HF 計算である CI 計算等を簡単に説明致しました。多分、普通の 4 年の学生が 1 年近く輪講等を行い、学ぶものですが、利用のみという視点に立った計算上の留意点を（不十分になるとは分かっていたのですが、）説明したつもりです。9 名の内、8 名が入力データを持参し、2 名の問題は、ほぼ解決し、残り 6 名は、継続してサポートをしております。その後もほぼ全員と連絡を取り、ずっとサポートしている状態です。一方、問題点としては一人でのサポートですので、遅れ気味な状態があるかもしれません、お許してください。これ以上増える可能性がありますと、サポート側の増員が不可欠になると思われます。

今後の活動は、以下の通りです。

- ▶ 扱う化学物質によっては、プログラムコードを他の GAMESS (一般化学)、MOLPRO (物理化学)、VASP (結晶、工学)、Amber (生物学) などのコードへ変えるべき系も見受けられる。そこで、これらのプログラムの新規導入と講習会を検討する。
- ▶ 分子科学計算に特化したフォーラムを 2006 年 3 月中に行う。特に、新発足に伴うパイロット的な意味合いの研究会とし、皆様のご意見、ご要望を伺うことを目的とする。

3. 謝辞

分子科学推進室設置においては、情報基盤センターの職員の方々から多大な助言を頂き、ありがとうございました。この場をお借りして感謝いたします。今後ともがんばりますので、よろしく願いいたします。