

演 題	小規模クラスタシステムによる分子シミュレーション	
発 表 者	林 治尚 ・ 山名一成 ・ 中野英彦 ( 姫路工大 ・ 工 )	
連 絡 先	〒 671-2201 姫路市書写 2167 姫路工業大学大学院工学研究科物質系工学専攻	
キ ー ワ ー ド	molecular simulation, 並列化, Omni OpenMP	
開 発 意 図 適 用 分 野 期 待 効 果 特 徴 な ど	分子シミュレーションの計算効率の向上を目的とし、M <sup>2</sup> COTSの観点から、専用ハードウェアを必要とせず、安価なパーソナルコンピュータを要素とし、フリーに提供されているライブラリなどを利用し、クラスタシステムの構築と効率の検討を試みた	
環 境	適 応 機 種 名	ワークステーション、DOS/ V(AT 互換) 機
	O S 名	UNIX
	ソ ー ス 言 語	Fortran, C, MPI, OpenMP, SCore
	周 辺 機 器	
流 通 形 態  ( 右 の い ず れ か に を つ け て く だ さ い )	<ul style="list-style-type: none"> <li>・化学ソフトウェア学会の無償利用ソフトとする</li> <li>・独自に頒布する</li> <li>・ソフトハウス、出版社等から市販</li> <li>・ソフトの頒布は行なわない</li> <li>・その他</li> </ul>	具 体 的 方 法

## 1. はじめに

近年のコンピュータの性能向上と安価化、さらにネットワークの発達により、従来にない計算機の利用法が可能となった。それは、膨大な計算を行なうためには、専用ハードウェアによるスーパーコンピュータ等を利用するという選択肢だけでなく、個々のCPUとメモリを複数個結合した、分散メモリ型並列計算機(MIMD型)を構築することにより、安価により効率的な計算が期待できる、という可能性である。

分子シミュレーションでは基本的に、粒子間の相互作用の計算に最も多くの時間を費やしており、高分子や界面など大規模系への適用では、対象が大きな系になればなるほど、計算量は極端に増大する。そのため様々な計算方法の改良や短縮化、近似などが試みられている。

そこで、特に相互作用の計算部の並列化とネットワークを利用した計算の分散化を試みることで、本研究では、M<sup>2</sup>COTSの観点から研究室レベルでも可能な、一般的なパーソナルコンピュータを要素とするクラスタ計算機システムと、元のプログラム自体に大幅な改変を必要と

しない並列ライブラリを利用することで、計算効率の改善を目指した。

## 2. 方法など

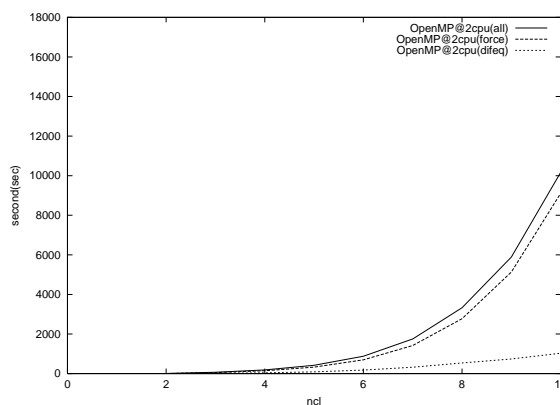
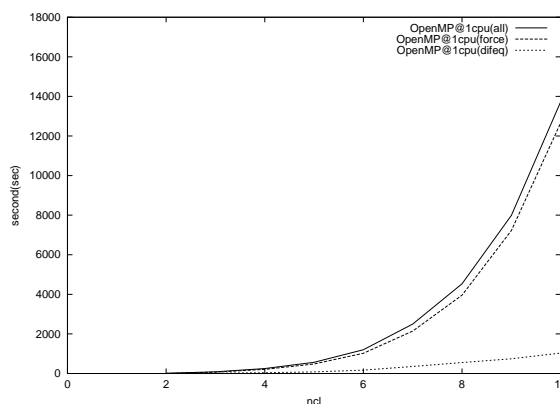
本研究では、マルチスレッドプログラミング API であり、移植性が高くシンプルなインターフェースを持つ OpenMP の仕様に従った、PC Cluster Consortium の “Omni OpenMP” (version 1.6) と、“SCore” クラスタシステムソフトウェア (version 5.4) を用いた。これは、ソフトウェア分散共有メモリシステムを実現する “SCASH” により、OpenMP プログラムをクラスタ上で実行可能とする言語処理系であり、ユーザ側はシームレスに OpenMP でコーディングが可能となる。

これらを用いることにより、シングル CPU を持つパーソナルコンピュータを要素とするクラスタシステムと、典型的な UMA (Uniformed Memory Access) である SMP を要素とするクラスタシステムなど、研究室レベルでの安価な並列システムを構築し、分散型計算システムの可能性、プログラムの簡便な並列化について、分子シミュレーション計算の結果から、プログラム手法、CPU 数、分子シミュレーションの系のサイズなどについて、計算効率を比較検討する。

基本プログラムは Fortran もしくは C でコーディングし、PC Cluster Consortium の Omni OpenMP Compiler などを使用し、実行にあたっては PC-UNIX マシン (Pentium4/ 2.4GHz, Pentium3/ 800MHz&1GHz ~ (Single/ DualCPU)、Athlon、OS は RedHat-7.3 他) などを用いた。

## 参考文献

- [1] M.P.Allen and D.J.Tildesley, “Computer Simulation of Liquids”, Oxford (1987).
- [2] P.S.Pacheco, “Parallel Programming with MPI”, Morgan Kaufmann Pub. (1997).
- [3] B. Wilkinson and M.Allen, “Parallel Programming”, Prentice-Hall (1999).
- [4] 「はじめての並列プログラミング」湯浅太一 他編 共立出版 (1999).
- [5] T.L.Sterling, D.J.Becker et al; “How to Build a Beowulf”, MIT Press (1999).
- [6] OpenMP...<http://www.openmp.org/>
- [7] Omni OpenMP Compiler & SCore...<http://www.pccluster.org/>



系のサイズと計算効率