

半経験的分子軌道計算プログラム MOS-F の PC クラスタ向け並列化

稲田 由江[†] 小野寺 聡^{††} 安里 彰[†] 松浦 東[†]

[†](株)富士通研究所 ^{††}富士通(株)

1. はじめに

PC の高性能化とネットワーク技術の進歩によって、今まで高価な高性能計算機でしか実行できなかった科学技術計算プログラムを、PC を多数結合した PC クラスタシステムに適用する試みがなされてきている。MOS-F(semiempirical Molecular Orbital package for Spectroscopy, FUJITSU)¹ は、CIS/RPA 法に基づく励起状態の計算が可能な当社独自の半経験的分子軌道計算プログラムであり、今回これを PC クラスタ向けに並列化することにより、高速化と大容量化 (基底関数・配置状態関数の数の拡大) に取り組んだ。

2. 方法

(1) 並列処理による高速化

半経験的分子軌道計算により CIS/RPA 法に基づく励起状態を計算する場合、高コストの計算は、(a)Fock 行列および CIS/RPA 行列の対角化 (固有値・固有ベクトル計算) (b)積分変換、(c)行列積計算である。この内、オリジナルの MOS-F では固有ベクトルを求めるアルゴリズムとして逆反復法を用いているため、並列化によりノード間通信が大きくなるという問題点がある。そこで、本研究では並列性のある Divide and Conquer 法を採用した並列行列計算ライブラリ ScaLAPACK1.7² の PDSYEVD を用いて固有値・固有ベクトル計算の並列化を行った。行列積計算と積分変換はノード間通信を極力抑えて並列化を行った。

(2) データ分散による大容量化

MOS-F は三角行列を 1 次元配列として保持する。しかし 1 次元配列では並列処理においてノード間通信が頻繁に発生するため、2 次元の正方行列としてデータを保持するように修正した。その上で、サイズの大きいすべての 2 次元配列を各ノードに分割保持した。分割形式は、高頻度処理である対角化に適した分割形式(*,Block)分割または(*,Cyclic)分割とした。

3. 評価とまとめ

表 1 の環境で実行し、性能を評価した結果を表 2 に示す。16 ノードで約 7 倍の高速化を実現し、使用メモリ量も 1 ノード当たり 1/16 に低減することができた。これにより PC クラスタを用いた処理の高速化とデータの大容量化に成功した。

表 1 PC クラスタシステム

CPU	PentiumIII 700MHz
メモリ	384Mbytes/node
ネットワーク	100Base-TX
OS	Linux
コンパイラ	g77 -O3
並列化ライブラリ	LAM-MPI

表 2 性能 (データ:ポリアゾメチン C₁₅₃H₁₁₁N₂₁,原子数:285,基底

関数の数:807,計算手法:CNDO/S,RPA 法,RPA 法で考慮する配置状態関数の数:3600)

ノード数	全実行時間(秒)	処理の内訳(秒)				実行時間加 速率	1ノード当たりの使用 メモリ量(Mbytes)
		対角化	行列積	積分変換	その他		
1	10440.42	4944.63	4706.91	254.72	534.17	1.00	430.44
2	5007.56	2259.59	2414.37	129.05	204.54	2.08	215.55
4	2861.67	1302.85	1326.49	107.53	124.80	3.65	108.11
8	1827.73	849.97	748.46	111.86	117.45	5.71	54.48
16	1503.51	750.99	494.88	130.60	127.04	6.94	27.66

謝辞: 本研究の一部は新エネルギー・産業技術総合開発機構 基盤技術研究促進事業「高信頼・低消費電力サーバの研究開発」によって行われた。

¹<http://software.fujitsu.com/jp/mopac2002/>, ²<http://www.netlib.org/scalapack/>