

2P04

グリッド技術を用いた 大規模Fock行列計算プログラムの開発

○梅田宏明^{1,2*}、稲富雄一³、渡邊寿雄^{1,2}、八木徹^{1,2}、石元孝佳^{1,2}、長嶋雲兵^{1,2}

¹ 科学技術振興機構 CREST、² 産業技術総合研究所 計算科学研究部門、

³ 九州先端科学技術研究所、*E-mail address: h-umeda@aist.go.jp

生体分子のような大規模系の分子軌道計算では Fock 行列の生成に全計算時間の 9 割以上の時間を費やすことが知られている。これまでに我々は行列の分散共有などにより、PC クラスタ並列計算システム上での大規模 Fock 行列の生成を可能にしてきた。しかし、さらに大きな分子軌道計算を実行するには、より多くの計算機リソースを長時間利用する必要がある。Ninf-G による GridRPC/MPI ハイブリッド並列化はグリッド上にある多数の計算機リソースを効果的に利用できる手法であり、我々はこれを利用した並列プログラムも開発してきた。これまで複数の PC クラスタシステムを効率良く利用する並列 Fock 行列計算プログラムを開発してきたが、実際の複数 PC クラスタを用いた長時間計算を考えると、多数の PC クラスタを同時に占有できるケースは限られており、より柔軟な計算機利用が必要となってくる。今回我々は、現実的な PC クラスタの利用状況を考慮した、ある程度の耐障害性を持つグリッド版並列 Fock 行列計算プログラムを開発したのでこれを紹介する。

開発したプログラムのテストとして、リガンド分子(53 残基、824 原子)と結合した epidermal growth factor 受容体(EGFR、512 残基、7,837 原子)の FMO-MO 計算(FMO-HF/STO-3G、26,461 基底)を産総研の AIST スーパークラスタ(ASC)上で実行した。Fock 行列計算は手元の Linux PC (dual Xeon 3.60GHz, 8GB memory, Gigabit ethernet)から ASC の F32 部(32bit dual Xeon 3.06GHz, 4GB memory/node, fast ethernet) 228PU と P32 部(dual Opteron 246 2GHz, 6GB memory/node, Myrinet/Gigabit ethernet) 128PU を利用し、そのうち P32 部については 64PU ごとの二つの MPI プロセスに分割して扱っている。特に P32 部のキューの設定として経過時間 3 時間の制限を課すことで、長時間実行で発生しうる問題を再現するようにした。Fig. 1 に GridRPC についてのタイミングチャートを示す。赤で示された部分が Fock 行列を計算している時間である。すぐに実行されない MPI プロセスがあっても、他の MPI プロセスだけで計算が進行している。また 3 時間経過により強制的にプロセスを止められた場合でも計算は進行している。得られた Fock 行列は以前のプログラムで生成した行列と一致しており、今回のプログラムが長時間実行に耐えうるものになっていることがわかる。

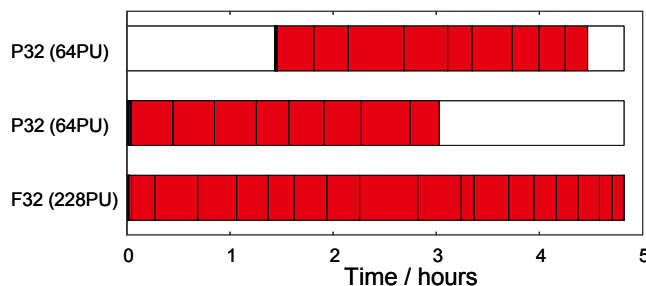


Fig. 1 GridRPC timing chart with several heterogeneous PC cluster systems.

謝辞 本研究の一部は、科学技術振興機構、CREST プロジェクト「グリッド技術を用いた大規模分子シミュレーションプログラムの開発」(研究展示 EX01)によるものである。