

クラスタリングとマルチプロセスによる 高速化分子動力学計算プログラムの開発

○三浦隆治¹、鈴木 愛²、Riadh Sahnoun¹、古山通久¹、坪井秀行¹、畠山 望¹、
遠藤 明¹、高羽洋充¹、Carlos Del Carpio¹、久保百司³、宮本 明^{2,1}

¹東北大学大学院工学研究科応用化学専攻(〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-11-1302)

²東北大学未来科学技術共同研究センター(〒980-8579 宮城県仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-10)

³東北大学大学院工学研究科附属エネルギー安全科学国際研究センター
(〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-11-701)

【緒言】

分子動力学法は既存の分子シミュレーション手法の中でも比較的大規模な系を取り扱うことができるが、実験結果と直接比較できるような計算を行うためには、さらなる大規模化と高速化が重要である。一方、近年一般に使用されているパーソナルコンピュータでは、シリコン半導体の速度向上が頭打ちとなりつつあり、今後は複数のプロセッサコアを搭載して高速化を図る方向に進むものと思われる。そこで本研究では、従来の分子動力学計算プログラムに、複数のコアまたは複数のプロセッサを搭載したコンピュータを想定したマルチプロセス技術を導入したほか、ネットワークで接続した複数のコンピュータを用いて計算を行うクラスタリング技術も導入し、並列処理による計算速度の向上を図った。

【方法】

本研究では、これまで当研究室で開発してきた分子動力学計算プログラム「New-RYUDO」をベースに並列処理機能の組み込みを行った。ソースコードは全てC言語で記述し、ライブラリは通常のLinux (UNIX)環境にある標準的なものだけを使用した。

マルチプロセス化については、UNIXの伝統的な手法であるfork関数による子プロセス生成技術を用いた。プロセス間の通信には、各原子の座標や力などの大規模データに共有メモリを、プロセス間の進行制御などにパイプを用いた。

クラスタリングについては、全体をコントロールするMain側と、要求を受けて計算を行うServer側の、二種類のプログラムによるクライアント・サーバモデルとした。Main側とServer側のデータ通信には、一般的なソケットによるTCP通信技術を用いた。

【結果】

マルチプロセスについては、分子動力学法の計算過程のうち原子間相互作用のエネルギーと力を算出する部分のみを並列化することで、データ通信量を最小限にして高速化した。

クラスタリングについては、Server側プログラムを常時稼働とし、実際に計算を行う際にユーザ手元のコンピュータでMain側プログラムを起動して各Server側プログラムに接続することで、連続および多人数による共用を可能にした。

マルチプロセスおよびクラスタリングにおいて、特別なライブラリ等を使用しないことで、多くのLinux(UNIX)環境でそのまま動作する高い互換性を実現した。またクラスタリングのServer側プログラムは単一のコマンドであることから、他のソフトウェアの動作を阻害しないので、共用サーバや空いているコンピュータの一時利用などが容易になった。さらにServer側プログラムをMS-Windows(Visual C++)対応とすることで、一般のWindowsマシンをクラスタリングに利用することが可能になった。

本プログラムの動作確認として、Pt 4000 原子による熱伝導計算モデル(図1)を用いた10,000stepの計算を行った(図2)。その結果、2プロセス並列化または2台クラスタリングで約1.8倍、2プロセス2台クラスタリングの計4プロセス並列化で約3倍の高速化を確認できた。

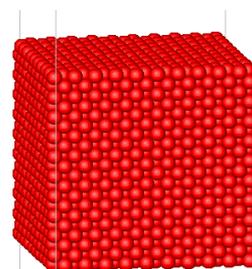


図1. Pt 4000 原子モデル

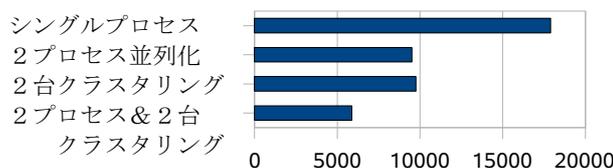


図2. Pt 4000 原子モデルの計算時間 (秒)