

## FMO 法の超並列化への取り組み

(九大情基セ\*、九州先端研\*\*) ○稲富雄一\*、眞木淳\*\*、本田宏明\*\*、西田晃\*、高見利也\*、  
小林泰三\*、青柳睦\*

【はじめに】フラグメント分子軌道(FMO)法[1-3]は、たんぱく質などの巨大分子に対する第一原理電子状態計算を行うために開発された計算手法である。FMO 法では、巨大な分子を小さなフラグメントに分割して、各フラグメント (モノマー) とフラグメントペア (ダイマー) に対する電子状態計算を行うことで、分子全体の電子状態を近似する。各モノマー (ダイマー) の電子状態計算を独立に行うことができるため、FMO 法は並列処理向きの計算手法であり、1000 並列規模であれば高い並列化効率で計算できることが示されている。しかし、現在のプログラムで数万～数 10 万並列の FMO 計算を効率よく行うことは、非常に難しいと考えられる (後述)。現在稼働中のスーパーコンピュータ(スパコン)には 10 万並列を超えるような並列計算機も存在しており、日本で開発中の次世代スパコン[4]も 64 万並列を超えることが発表されている。このような現状を考慮すると、近い将来に、大学の大型計算機センターでも数万並列の計算を日常的に行えるようになることが予想される。そのような中で、量子化学計算を行う研究者がそのような大規模計算機を活用するためには、効率的な超並列処理が可能な量子化学計算プログラムの開発が急務である。我々は、並列 FMO 計算に特化したプログラム OpenFMO の開発をこれまで行ってきており、MPI を用いた並列化も行った。そこで今回、FMO 法の効率的な超並列実行を行うために、OpenFMO を改良して、数万プロセッサを用いた超並列処理を効率的に行うことのできるプログラム (超並列 OpenFMO) を開発することを研究の目的とした。本ポスターでは、超並列化の現状を報告する。

【超並列化における課題】  $n$  プロセッサを用いた並列処理を行った場合、 $n$  倍速くなること (linear-scaling) が理想であるが、一般の並列処理では、それよりも速度が低下する。このように、並列処理の効率 (並列化効率) が低下するのは、アルゴリズムにおいて逐次処理が存在したり、各プロセッサへのジョブ割り当てが均等にできなかったりして、並列処理できない (していない) 部分が存在することが大きな原因としてあげられる。処理全体における

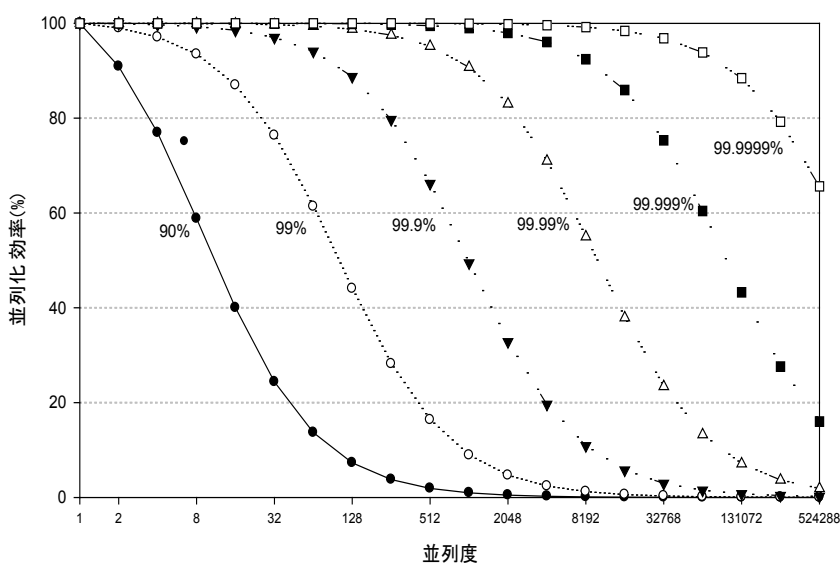


図 1 : いくつかの並列化率での並列化効率の並列度に対する変化  
(グラフ内の数値は並列化率(%))

並列処理可能部分の割合（並列化率）と並列化効率の関係を図 1 に示すが、これを見て分かる通り、並列計算に使用するプロセッサ数（並列度）が大きくなるに従って、並列化率の影響が大きくなるのが分かる。したがって、効率のよい超並列実行を行うためには各プロセッサに均等に計算を割り当て、並列処理していない時間をできるだけ削減することが必要である。また、数～数 10 プロセッサを搭載した小規模メモリ共有型（SMP）並列計算機（ノード）を高速ネットワークで接続した大型計算機が主流となっているが、ノード間とノード内の通信速度には大きな差があるため、その通信性能差を意識したプログラム開発も、並列性能向上には必須である。

**【超並列化に向けた方針】** OpenFMO の並列化効率を向上させるために、我々は、各モノマー（ダイマー）の電子状態計算部分に対して、MPI を用いたプロセス並列化と OpenMP を用いたスレッド並列化との組み合わせによるハイブリッド並列化を行う方針にした。このハイブリッド並列化は、ノード間の通信速度とノード内の通信速度の違いを考慮したプログラム開発を比較的容易に行うことができるため、最近の大型並列計算機向けのプログラム手法である。また、ノード内に比べると遅いノード間通信の回数が削減でき、それに伴って、通信資源の競合も抑えることが可能となるため、その点からも並列性能向上に有効であると考えられる。HF 法をベースとした FMO 計算で負荷の大きな部分の 1 つである 2 電子積分プログラムを、MPI だけを用いて（フラット MPI）並列化した場合とハイブリッド並列化した場合との並列性能の違いを図 2 に示す。ノード当たり 8 プロセッサの計算機 2 台を GbE で結合した並列計算機を用いて 2 電子積分計算を行った場合の結果である。通信が 1 つのノード内で済む 8 並列までは、どちらの並列化手法でも性能に大きな差が見られない。ところが、2 つのノード間での通信が必要となる 16 並列になると、フラット MPI では速度向上率が理想的な場合（linear-scaling）に比べて低下しているのに対して、ハイブリッド並列化ではほぼ理想的な速度向上がみられていることが分かり、ハイブリッド並列化の有効性が示された。

FMO 計算では、2 電子積分の他にもフラグメント間クーロン相互作用を求めするために、いくつかの分子積分が存在し、計算負荷も高いため、その部分についてもハイブリッド並列化を行う予定である。

**【謝辞】** 本研究は九州大学と理化学研究所との共同研究「次世代スーパーコンピュータシステム向け OpenFMO 計算性能最適化に向けた基本設計」の支援による。また、九州大学情報基盤研究開発センターの計算機を使用して計算を行った。

**参考文献:** [1] K. Kitaura et al., Chem. Phys. Lett., Vol.312, pp.319-324 (1999) [2] K. Kitaura et al., Chem. Phys. Lett., Vol.313, pp.701-706 (1999) [3] T. Nakano et al., Chem. Phys. Lett., Vol.318, pp.614-618 (2000) [4]  
URL : [http://www.nsc.riken.jp/index\\_j.html](http://www.nsc.riken.jp/index_j.html)

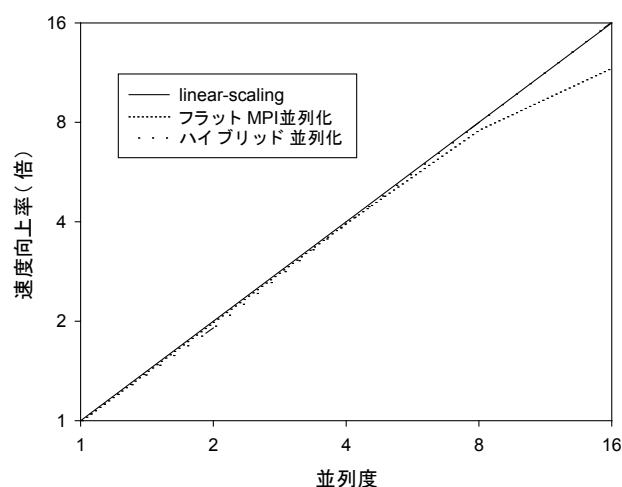


図 2 : 2 電子積分プログラムにおけるフラット MPI 並列化とハイブリッド並列化の性能比

計算対象 : (Gly)<sub>5</sub> (6-31G\*, 38 原子, 349 関数)

計算機 : (quad-core Xeon × 2/node, 2nodes, network=GbE)