

(筑波大) 梅田宏明, 佐藤三久

Parallelization of GAMESS for Large-scale FMO calculation

(Univ. Tsukuba) Hiroaki Umeda, Mitsuhsisa Sato序

メニーコアプロセッサなどに象徴される計算機技術の発展に伴い、数万コアを越えるような超並列計算機が現実的なものとなってきている。このような大規模並列計算機を有効に利用するために、スレッドレベルの並列化とプロセスレベルの並列化を組み合わせたハイブリッドな並列化が求められている。大規模並列計算に適した分子軌道計算手法の一つとしてフラグメント分子軌道法(FMO 法)[1]がある。FMO 法は巨大なターゲット分子を比較的小さなフラグメントに分割して考え、フラグメント及びフラグメントペアの計算から全系の分子特性を求める手法であり、個々のフラグメントの計算には大域的な通信があまり必要ないことから、超並列計算機においても効果的な並列計算が可能であると考えられている。これまで我々は最新の超並列計算機である京コンピュータ上で GAMESS [2]の FMO 計算を高速に実行させるための開発を行ってきた。本発表ではこの開発の現状を紹介する。

GAMESS の並列化

GAMESS では独自の通信レイヤーである Distributed Data Interface (DDI)を用いたプロセスレベルの並列化が行なわれている[3]。一方最近のマルチコア計算機では通信に依るメモリ量の増大や通信速度の低下等を避けるため 1 ノードあたり 1 MPI ランクでの並列計算が推奨されている。このため現状 GAMESS に実装されている DDI ではコア数の半分しか計算に使うことができない。我々は ARMCI ライブラリ[4]を利用する DDI 実装を採用し、またノード内並列には OpenMP によるスレッドレベル並列化を行なうことにより、このようなマルチコア並列計算機での実行を可能とした。OpenMP 化に際しては GAMESS 本体のコードに OpenMP の指示文を挿入することで実現し、スレッド並列計算専用サブルーチン等を新たに作成することはできるだけ避けている。なお、GAMESS の HF 計算等の OpenMP 化については石村らによる発表があり非常に良い成果をあげている[5]。しかしながら彼等のコードは公開を前提としたものではないため、独自に OpenMP 化を実行している。

高並列計算による速度向上に伴い並列化や高速化が不十分なコードへの対応も求められるようになってきている。例えば SCF サイクルごとに実行される波動関数の直交化は、Fock 行列の生成が並列計算により高速化していくために、SCF の中でボトルネックになってきていた。これについてはブロック化して BLAS の行列積ルーチンを利用することで、ある程度の高速化を図っている。

テスト計算および結果

大規模 FMO 計算のベンチマークテストとして、15,719 原子のモデルタンパクについての FMO/RI-MP2/6-31G(d)+cc-pVDZ 計算を行なった。計算は T2K 筑波システム(4 Quad-core Opteron プロセッサ, 32GB メモリ/ノード, 640 ノード)の全ノード(10,240 コア)を用いて行ない、改良版 GAMESS を flat MPI モデルと OpenMP/MPI ハイブリッドモデルで実行し、性能を比較した。Fig.1

に全体および各計算段階に対する経過時間を示した。OpenMP/MPI ハイブリッド並列化により大規模計算で問題となる通信や I/O への負荷が低くなり、全体として性能が向上していることがわかる。また FMO/MP2 計算の各部分についても性能が向上しており、我々の行なった OpenMP/MPI ハイブリッド並列化がこれら全てのルーチンで有効に機能していることがわかる。

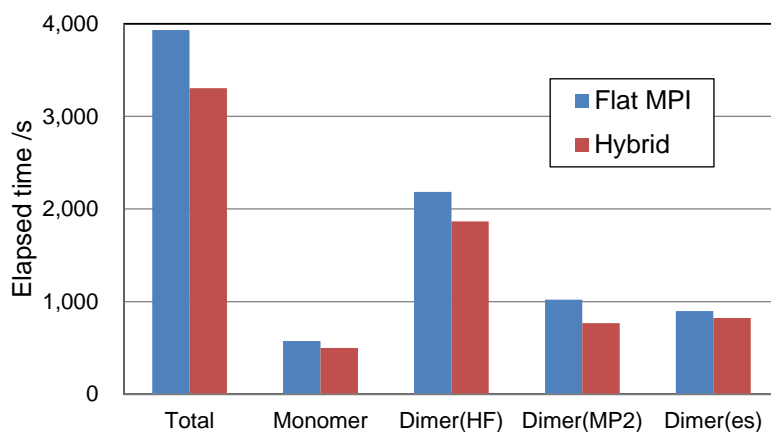


Fig.1. Elapsed time for FMO/MP2 calculation using 10k core of T2K-Tsukuba system. Blue and red bar represents flat MPI execution model (16 process/node) and OpenMP/MPI hybrid execution model (4thread*4process/node), respectively. Here, relaxed convergence thresholds are applied for SCF and SCC calculations to reduce benchmark time.

- [1] Kitaura, K.; Sawai, T.; Asada, T.; Nakano, T.; Uebayasi, M. *Chem Phys Lett* 1999, **312**, 319.
- [2] GAMESS (General Atomic and Molecular Electronic Structure System),
<http://www.msg.chem.iastate.edu/gamess/>
- [3] Fedorov, D. G.; Olson, R. M.; Kitaura, K.; Gordon, M. S.; Koseki, S. *J Comput Chem* 2004, **25**, 872.
- [4] Aggregate Remote Memory Copy Interface (ARMCI),
<http://www.emsl.pnl.gov/docs/parsoft/armci/index.html>
- [5] Ishimura, K.; Kuramoto, K.; Ikuta, Y.; Hyodo, S.-a. *J Chem Theory Comput* 2010, **6**, 1075.