

# 1Pa039 GAMESS の並列化ベンチマーク

(産総研<sup>1</sup>,大阪府立大<sup>2</sup>) 梅田 宏明<sup>1</sup>, 小関 史朗<sup>2</sup>, 長嶋 雲兵<sup>1</sup>

## 序

並列計算の普及に代表される近年の計算機速度の向上によって、タンパク質などの非常に大きな分子に対する非経験的な分子軌道計算が現実的なものとなってきた。例えば代表的な分子軌道計算プログラムの一つである GAMESS では、Distributed Data Interface(DDI)と呼ばれる独自の通信ライブラリを用いて効果的に並列化が行なわれており、多くの研究者が手軽に並列計算を行なうことが可能である。小規模の PC クラスタは手軽に構築が可能である一方で計算能力に限界があり、そのため数百台規模の PC クラスタの利用も求められている。今回比較的大きい 128 ノードの PC クラスタシステムにおいて GAMESS の並列性能を評価する機会を得たので、その結果を発表する。特に近年我々が取り組んできた多参照摂動計算(MRMP2)の高速化を中心に、GAMESS の並列性能の向上を実現したのでそれも報告する。

## PC クラスタ

PC クラスタの各ノードは Pentium3 1GHz, メモリ 512MB, ハードディスク 40GB の Linux(kernel 2.4.9)で構成されており、24ポートのスイッチングハブを通して 100Base-TX で接続されている(図 1)。128 台の PC を 24 ポートのスイ

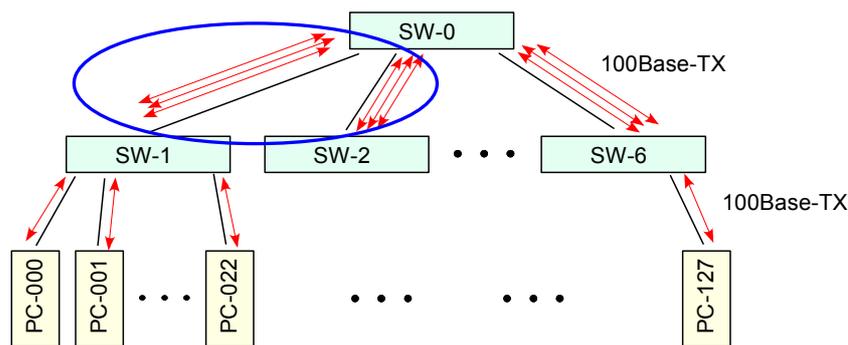


図 1 ネットワーク構成

チングハブを接続するため、多段のカスケード接続が必要となっている。24 ノード以上の並列計算を行なう場合、PC-スイッチ間(PC-000 $\leftrightarrow$  SW-1)に比べスイッチ間(SW-0  $\leftrightarrow$  SW-1)の通信量が大きくなると考えられ、この部分が並列性能のボトルネックになることが予想される。並列性能の評価は GAMESS 附属の socket 版の DDI ライブラリを用いて実行した。

## ベンチマーク計算

ベンチマーク計算として二原子分子 NbH の MRMP2/SBKJC(f,p)計算を行なった(図 2)。図の上部の実線はマスターノードにおける経過時間の速度向上比を示し、下部の棒グラフは実際の経過時間を示している。ネットワークボトルネックの存在する 24 ノード以上では、CAS CI 計算の性能が急激に悪化することがわかる。また最も時間を費やす 2 次の有効ハミルトニアンの評価ルーチンについても比較的小さいクラスタの段階で並列性能が飽和しており、全体の並列性能も低く抑えられている。これらのルーチンは DDI ライブラリに含まれる global sum 操作によって並列化されており、この global sum 操作の並列性能がネットワークボトルネックにより悪化したと考えられる。実際 global sum 操作は同期的通信であるため、多くのデータ転送が同時に発生する。

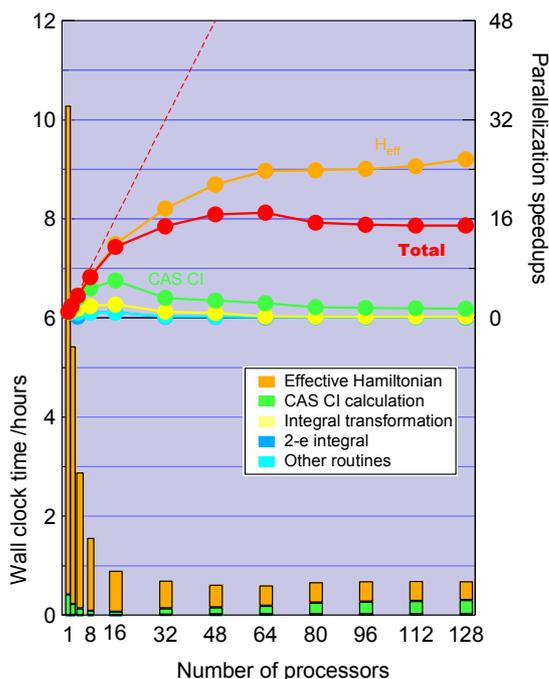


図2 ベンチマーク結果

高い性能の向上を見せ続けている。128 ノードで比較すると、経過時間がおよそ半分に短縮されており、global sum ルーチンの改良が並列性能を大きく改善したことをはっきりと示している。

Global sum ルーチンの改良により、MCQDPT2 計算以外の分子軌道計算ルーチンについてもその並列性能を向上させることが期待できる。一例として密度汎関数法(DFT)の計算を行なった(図4)。Global sum ルーチンの改良前は経過時間と CPU 時間間に大きな差(通信による遅延)が見られており、並列性能を阻害していた。Global sum ルーチンの改良によりこの差はノード数によらずほぼ一定に抑えられており、高い並列性能を記録している。

global sum 操作は GAMESS のほとんど全ての分子軌道計算ルーチンを並列化するのに広く利用されており、このベンチマーク計算に見られる並列性能の低下は GAMESS における並列計算では一般的に起こりうる現象である。

このような並列性能の悪化を防ぐために socket 版 DDI ライブラリの global sum ルーチンの改良を行なった。元の global sum で問題であった通信の局所性を回避することで個々のネットワークボトルネックにおける瞬間的な通信量の削減を実現し、より効果的な並列計算を可能にした。

この改良により並列性能は図3のように著しく向上した。CAS CI ルーチンの速度低下が抑えられ、有効ハミルトニアン計算についても

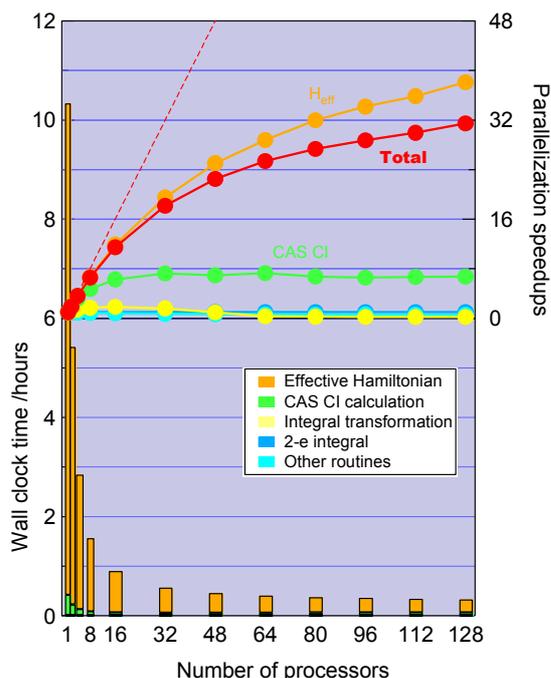


図3 ベンチマーク結果(改良後)

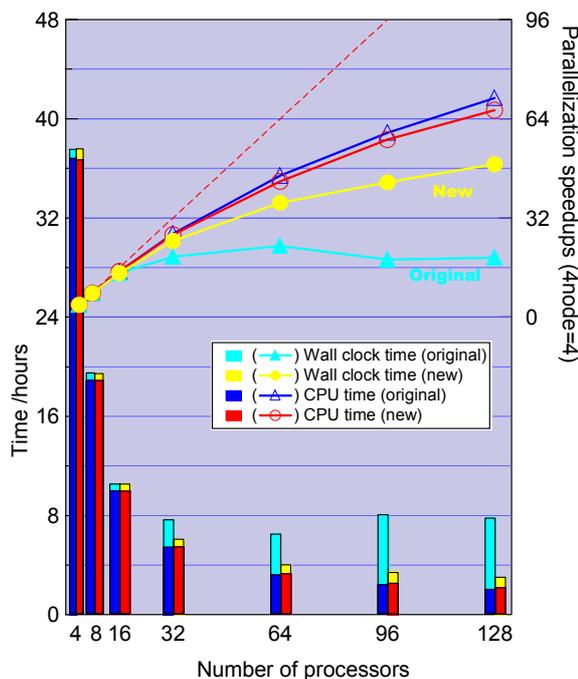


図4 DFT 計算のベンチマーク