

木下 浩三[†] 熊谷 泰幸[†] 岸 達也[‡][†](株)東芝 情報・社会システム社 [‡](株)東芝 研究開発センター

1. はじめに

我々は、現在研究開発に用いている FLAPW 法^[1]の電子状態計算プログラムをパラレルコンピュータ上で並列化し、大幅な実行時間短縮を実現したので報告する。この並列化により、これまで計算時間の制約で困難であった金属材料や磁性材料等の大規模な計算が実用上可能となった。なお、ここで用いた並列化手法は、FLAPW 法のみならず、広く第一原理電子状態計算に適用可能である。

2. 電子状態計算プログラムの概要

一般に、材料物性の第一原理による電子状態計算では、物質の性質は密度汎関数法に基づいて計算される。密度汎関数法は多数の粒子（電子）からなる系に対し、一粒子有効ポテンシャルを構成して系の性質を調べる方法であり、物質の基底状態の性質は、電子密度の汎関数として表される系の全体のエネルギーが最小となるような電子密度により決まる。

FLAPW 法は第一原理に基づいて物質の電子状態を精度良く計算する方法の一つである。結晶に対する電子状態計算では、結晶の持つ周期性により電子は Brillouin 域内の \mathbf{k} 点でラベル付けられる。電子の状態を決定する固有方程式は \mathbf{k} 点に関して独立であり、プログラムは \mathbf{k} 点に関して並列実行可能である。

図 1 に電子状態計算プログラムの流れを示す。

- (1) 与えられた価電子密度に対してポテンシャルエネルギーを計算して Hamiltonian を求める。
- (2) Kohn-Sham 方程式をある基底関数系に対する固有値問題として解き波動関数を求める。この計算は \mathbf{k} 点毎におこなわれる。

(3) 価電子密度を計算する。

(4) 核電子の電子密度を計算する。

(5) 価電子と核電子の電子密度をあわせて、全電子密度を求める。

(6) 全電子密度が収束判定を満たすまで(1)~(5)を繰り返す (SCF-cycle)。

ここで、(2)の部分が全体の計算時間の約 90 % を占め、(3)の部分が全体の約 10 % を占めている。従って(2)の並列化が最も大きな高速化につながる。

3. MPI による並列化

電子状態計算プログラムの \mathbf{k} 点に関する並列化は、メッセージ通信ライブラリ MPI を用いておこなった。(1)~(5)の計算部分はそれぞれ Fortran で記述された独立のプログラムであり、全体の SCF-cycle はシェルスクリプトにより制御されている。

一般に、計算のアルゴリズムが並列化可能でも、実際のプログラムではファイル入出力などの関係で依存関係が生じるため、矛盾無く並列処理をおこな

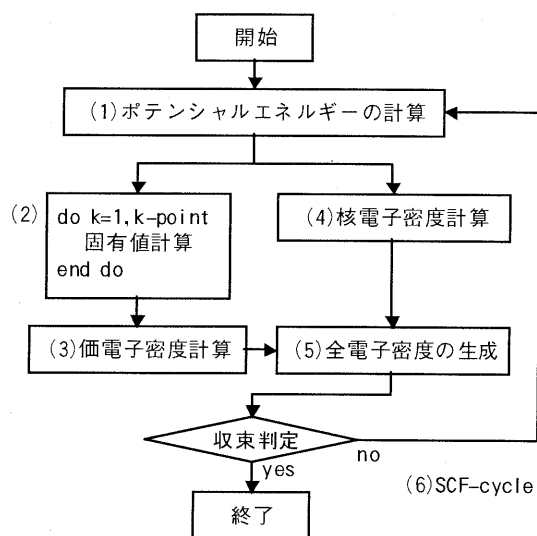


図 1 電子状態計算プログラムの流れ

Parallelization of Electronic Structure Calculation

[†]Kozo Kinoshita, Yasuyuki Kumagai, Information and Industrial Systems & Services Company, Toshiba Corp.

[‡]Tatsuya Kishi, R&D Center, Toshiba Corp.

うための工夫が必要である。ここでは **k** 点の順番を保つため、**k** 点毎の計算をおこなう DO ループをブロック分割し、各 CPU の並列領域における出力結果をシェルスクリプトの部分でまとめるスタイルを採用した。そのため CPU 間の通信はほとんど発生せず、また、CPU 間で同期を取る必要も無いため、スケラビリティの高い並列化が可能になった。さらに、MPI を用いたことで、分散メモリ型や共有メモリ型のパラレルコンピュータ、PC クラスタなどでも並列実行が可能であり、ポータビリティも高い。

4. 並列化の効果

MPI で並列化したプログラムを用いて二酸化チタン(TiO₂)の電子状態を計算し、並列化の効果を確認した。実行時間の測定に使用したマシンは SGI Origin2000 (R12000/400MHz)である。**k** 点を 825 個とした場合の測定結果を図 2 に示す。SCF-cycle 全体の計算では、1CPU での実行時間が 79276 秒（オリジナルのプログラムで測定）であったのに対し、128CPU での並列実行では 7816 秒まで短縮（約 10 倍に高速化）されている。一方、(2)の固有値計算部分のみに注目すると、1CPU で 72243 秒であったのが 128CPU で 1618 秒まで短縮（約 44 倍に高速化）されている。

各 CPU 数での実行時間、台数効果、並列化率を表 1 に示す。ここで、台数効果とは 1CPU の実行時間に対し何倍高速化されたかを意味し、並列化率は並列化された部分の全体における割合（Amdahl の法

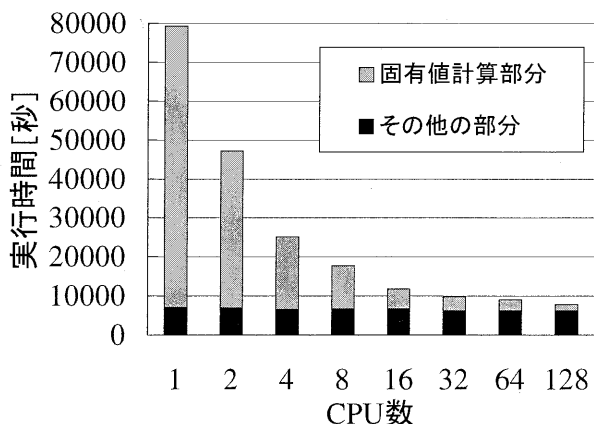


図 2 プログラムの実行時間測定結果

表 1 固有値計算部分(2)の並列性能

CPU 数	実行時間[秒]	台数効果*	並列化率**
1	72243	1	-
2	40217	1.80	0.796
4	18514	3.90	0.992
8	10958	6.60	0.970
16	5126	14.09	0.991
32	3478	20.77	0.983
64	2758	26.19	0.977
128***	1618	44.65	0.985

*台数効果=1CPU の実行時間/nCPU の実行時間.

**並列化率=(1-1/台数効果)/(1-1/CPU 数).

***128CPU での測定は日本 SGI によるものである.

則より求めた)を意味する。128CPU においても並列化による高速化の効果が現れており、**k** 点に関する並列化は十分成功したといえる。並列性能の測定は他のマシンでもおこなっており、PC クラスタにおいても良好な並列性能が得られている^[2]。

5. まとめ

我々は、FLAPW 法電子状態計算プログラムを **k** 点に関して並列化し、全体の計算時間の約 90% を占める固有値計算部分において、128CPU で約 44 倍の高速化を実現した。これにより、多くの **k** 点を必要とする金属材料や磁性材料等の大規模な計算が実用上可能となった。この並列化は、広く第一原理電子状態計算に適用可能であり、スケラビリティやポータビリティも高い。我々は現在、さらなる高速化を目指して、価電子密度計算部分の並列化を検討している。

参考文献

- [1] P. Blaha, K. Schwarz, P. Sorantin, and S. B. Trickey: Full-potential Linearized Augmented Plane Wave Programs for Crystalline Systems, *Compt. Phys. Comm.* Vol.59, pp.399-415 (1990).
- [2] T. Kishi, T. Sasaki, K. Kinoshita, and S. Itoh: A commodity parallel programming environment and its application, SNA2000.
- [3] 熊谷泰幸, 木下浩三, 岸達也: 電子状態計算プログラム(FLAPW 法)の並列化, 日本応用数理学会 2000 年度年会.