

高並列対応汎用分子動力学シミュレーションソフト

MODYLAS による大規模分子動力学計算

安藤嘉倫[†], 吉井範行^{†,‡}, 藤本和士[‡], 小嶋秀和[‡], 山田篤志[‡],
岩橋建輔[§], 水谷文保[§], 岡崎進[‡]

A highly parallelized general-purpose molecular dynamics program, MODYLAS, and its application to large-scale systems

YOSHIMICHI ANDOH, NORIYUKI YOSHII, KAZUSHI FUJIMOTO, HIDEKAZU KOJIMA,
ATSUSHI YAMADA, KENSUKE IWAHASHI, FUMIYASU MIZUTANI, SUSUMU OKAZAKI

分子動力学 (MD) 計算は, 化学, 物理, 生物, およびウイルス学といった様々な学問分野において実験とならぶ解析ツールとして広く普及している。加えて工業分野においても分子の特性を活かしたナノ機能性材料や高分子材料を設計する際に MD 計算により得られる知見が不可欠になりつつある。

当グループでは「京」コンピュータ上において汎用分子動力学計算ソフトウェア MODYLAS^[1]を開発してきた (www.modylas.org で公開)。特徴には、

- ・様々な分子内, 分子間相互作用 (力場), およびアンサンブルを扱える汎用性
- ・周期境界条件下静電相互作用を高速多重極展開法 (FMM) と多極子の Ewald 法により厳密に計算
- ・空間領域分割による MPI 並列化, および 3D トーラスに最適化した隣接バケツリレー型 MPI 通信
- ・通信前後のデータコピーおよび並べ替えを排したデータ構造
- ・ホットスポットでの低キャッシュミス率演算がある。実際に「京」コンピュータ 65,536 (=2¹⁶) ノードを用いた計測ではタンパク質, 水およびイオンを含む 1,000 万原子系について良好な並列化効率 (対 64 ノード 40%) を実現している^[1]。

これまでに MODYLAS と「京」コンピュータを用いたポリオウィルスカプシド全体を扱った全原子 MD 計算^[2,3] (図 1), メタンハイドレートの融解過程の全原子 MD 計算^[4]が行われ, 従来アクセスの難しかった空間スケールおよび時間スケールでの研究が日常的に行えるようになった。

当日は, MPI プロセス数 2ⁿ*3^m への拡張, 直方体

基本セルへの FMM 対応など, 文献[1]以降の最近の開発成果についても報告する。

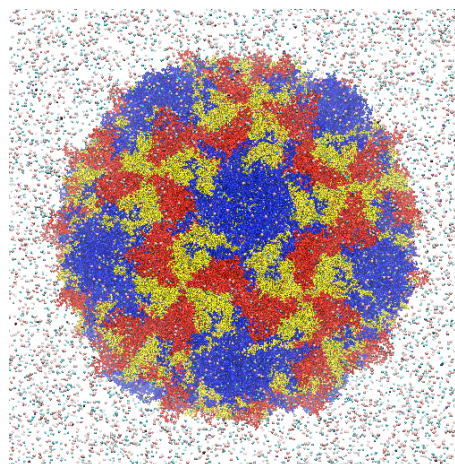


Fig.1 All-atom MD calculation of entire poliovirus empty capsids in solution^[2,3]. Atom number: 6.5M, simulated time: 200ns.

参考文献

- [1] Y. Andoh, N. Yoshii et al., J. Chem. Theory Comput., 9, 3201-3209 (2013).
- [2] 安藤嘉倫, 岡崎進, スーパーコンピュータ「京」の利用: 3. ウィルスの全原子分子動力学シミュレーション, 情報処理, 55, 798-803 (2014).
- [3] Y. Andoh, N. Yoshii et al., J. Chem. Phys., 141, 165101 (2014).
- [4] T. Yagasaki, M. Matsumoto, et al., J. Phys. Chem. B, 118, 1900 (2014); 118, 11797 (2014).

[†]名古屋大学工学研究科附属計算科学連携教育センター Center for Computational Science, Nagoya University; [‡]名古屋大学工学研究科化学・生物工学専攻 Department of Applied Chemistry, Nagoya University; [†]CRPP-CNRS, University of Bordeaux; [§]分子科学研究所 Institute for Molecular Science