

サブタスク分割による分子動力学シミュレーションの並列化

3 L - 8

— サブタスク間の依存関係を考慮した並列計算方式 —

村田 達也 関嶋 政和 正木 宏和 宮田 忠明 中村 周吾 池口 満徳 清水 謙多郎

東京大学大学院 農学生命科学研究科 応用生命工学専攻*

1 はじめに

分子動力学法 (MD) に基づくシミュレーションは様々な分野で用いられており、生物分野ではとくにタンパク質、核酸などの生体高分子の構造予測、物理化学特性の解析に用いられている。より規模の大きな分子に対する、より長時間のシミュレーションの必要性から並列計算による高速化が望まれている。しかしながら現実の生体高分子及び生体内の環境は不均一系であるため、シミュレーションの計算を部分問題に分けたとき各々の実行時間にばらつきが生じ、静的な負荷分散が行えず高速化が困難となる。一方、従来の動的負荷分散を行うシステムは主に分散システムを対象とし、しかもプロセスレベルでの負荷分散しか行わないため、きめの細かい資源管理が行えないという問題がある。

そこで我々は、「部分問題間の依存関係に基づくタスクプール方式」という並列計算方式を構築し、これを並列計算機用を実現するシステム（並列プログラミング環境）を開発した。この方式では、ユーザはアプリケーションプログラムをサブタスクと呼ばれる処理単位の集合として定義し、それらサブタスク間の依存関係を記述しておく。システムはその依存関係に基づき、サブタスクをプロセッサの負荷に応じて自動的に割り当てる。本システムを用いて、生体高分子シミュレーションの並列プログラミングを行ない、並列計算機日立 SR-2201 上で実行した。

2 並列プログラミング環境の構築

2.1 システムの基本構成

我々が開発したシステムは図1のような階層構造によって構成される。プロセス間通信や計算機アーキテクチャの相違隠蔽など、低レベルの並列プログラミング環境を実現するシステムとして MPI (Message Passing Interface) を利用している。本システムの特徴である動的資源管理機能は MPI の上に実現

*Parallelization of molecular dynamics simulation using subtask division, Tatsuya Murata Masakazu Sekijima Hirokazu Masaki Tadaaki Miyata Shugo Nakamura Mitsunori Ikeguchi Kentaro Shimizu, Department of Biotechnology, The University of Tokyo

し、MPIでは行なえないきめの細かい資源割当てを制御する。RMS (Resource Management Service) は基本的な資源管理を行うモジュールである。TMS (Task Management Service) はプロセスの割当てを制御するモジュールである。SMS (Subtask Management Service) は SPMD 形態に基づく並列処理において利用されるもので、サブタスク割当て方針やタスクプール機構などをつかさどる。現在、生体高分子シミュレーションなど、様々な計算化学のアプリケーションを上記システム上に実現している。

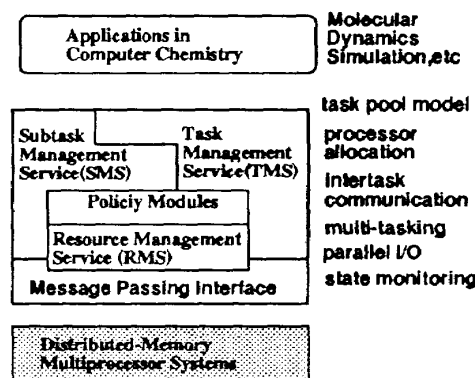


図1: 並列計算のためのシステム構造

2.2 サブタスク間の依存関係の記述

アプリケーションプログラムは並列処理可能な処理の単位であるサブタスクの集合として構成される。サブタスク間に実行順序の制約（一方の結果を受けて他方が実行されるなど）が存在する場合には、ユーザはその制約を依存関係として記述する。各サブタスクは次のような情報を持つ。

1. サブタスク識別子
2. サブタスクとして実行する処理内容
3. PL(predecessor list): 当サブタスクに先行して実行が終了しているべきサブタスクのリスト
4. SL(successor list): 当サブタスク実行が終了した後でないと実行できないサブタスクのリスト

サブタスク間の依存関係は PL と SL として記述さ

れる。

2.3 タスクプール方式の実現

システムは図2のように、SPMD形態のマスター/スレーブ方式に基づいており、マスターがスレーブに依頼する形でサブタスクが実行されていく。実行されるべきサブタスク群はマスターでタスクプールを構成しており、依存関係を満たしたものから実行可能となり、さらにその中からスレーブの空きプロセッサに順次割り当てられる。今後はサブタスクの実行時間や通信の高速化などを考慮し、通信し合うサブタスク間の依存関係もユーザが指定できるようなきめの細かいプロセッサ割当て方針を実現していく予定である。各スレーブはマスターから要求及び入力データを与えられることで処理を開始し、計算が終了するとそれをマスターに知らせて処理を終了する。このような機構により、サブタスクは使用するデータが整い次第実行される。

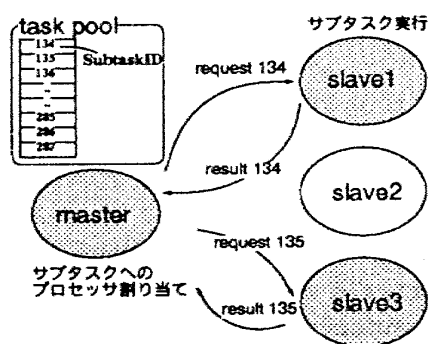


図2: サブタスクの実行形態

3 MD シミュレーションの実現

MDによる生体高分子シミュレーションを上記システムの上に実現した。MDシミュレーションではタイムステップごとに原子間に働く力の計算及び原子座標の更新を行う。並列計算に際しては、原子を空間分割の手法 [2] によりグループ化して、グループ内の原子に関する計算をサブタスクとして定義する。

本稿では特に、MDシミュレーションにおいて大きな実行時間を必要とする遠距離力の計算の並列処理方式について述べる。遠距離力の計算法としては、FMM(Fast Multipole Method)法 [1] という計算方法が近年よく用いられているが、以下ではこの方法を例に説明する。

3.1 FMMの概要

生体高分子のシミュレーションのような大規模系の遠距離力の計算量は、pair by pairによるカットオフなしの計算では、原子数を N とすると $O(N^2)$ となってしまう、 N が大きいと現実的に実行不可能になる。FMMはこの計算時間を $O(N)$ に減少させる

方法である。この方法では分子の占める空間を階層的なセルに空間分割してセルごとに計算を行う。サブタスクへの処理分割はセルの単位で行なうことができ、しかもセル間の依存関係は明確である。このため本システムにおける並列計算が有効であると考えられる。

3.2 サブタスク分割および依存関係の記述

FMMの並列計算は図3のように行なわれる。1セル内の計算が1サブタスクに対応する。サブタスクの種類は大まかに述べると次のようになる。

- (1) 最小セルについてセル内の原子の電荷を多重極子 (MP) によって近似する。
- (2) 子セルのMPを基に親セルへ階層的にMPを求めていく。
- (3) 最大セルについてMPを局所的な電場 (LF) に変換する。
- (4) 親セルのLF及び自階層セルのMPを基に子セルへ階層的にLFを求めていく。

各原子に働く遠距離力は(4)で求めた最小セルのLFを基に求められる。

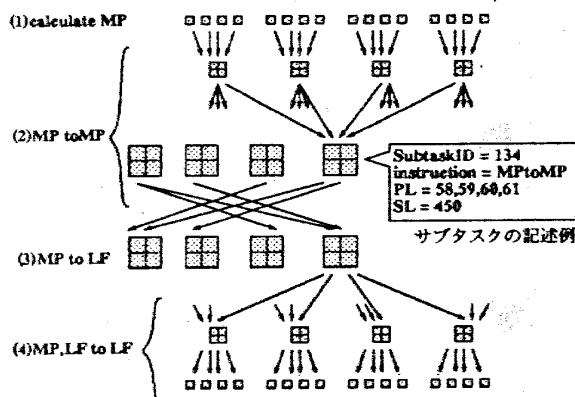


図3: FMMにおけるサブタスク間の依存関係

4 結論及び課題

サブタスク間の依存関係に基づくタスクプール方式による並列計算法を開発し、生体高分子シミュレーションに適用して、その有効性を示した。現在、大規模分子の結合エネルギーの計算 [3] やマルチタイムステップMDなどへの適用を検討している。

参考文献

- [1] L.Greenard and V.I.Rokhlin, *J.Comp.Phys.*, 73, 325 (1987).
- [2] P.Ballestrero, P.Baglietto, and C.Ruggiero, *J.Comp.Chem.*, 17, 469 (1996).
- [3] 中村周吾, 池口満徳, 廣瀬仁, 清水謙多郎, *生物物理*, 37, S37 (1997).