

HPCS2016 オーガナイズド・セッション (OS_3)

OS タイトル	分子動力学計算ソフトウェア MODYLAS のメニーコアアーキテクチャ対応 並列化に関する研究		
OS 提案者氏名	安藤 嘉倫	所属	名古屋大学 大学院 工学研究科 計算科学連携教育研究センター
OS 概要	<p>分子動力学(MD)計算は、化学・物理・生物・ウィルス学といった分野の基礎研究および工学分野での応用研究の両面において、実験とならぶ解析ツールとして広く普及している。「京」コンピュータなどのスーパーコンピュータ演算性能の向上により、長距離静電相互作用を正確に計算した上での MD 計算において扱える原子数は 1000 万原子以上、シミュレーション可能な時間はマイクロ秒オーダーに到達している。今後の計算機のさらなる伸展によりこれら原子数制限および計算時間の制限はさらに緩和され、より大規模な MD 計算を行うことで、基礎研究および応用研究でのブレークスルーを起こすことが期待される。</p> <p>一方、現在の計算機の演算性能の伸展は、コア数の増加および SIMD 幅の増大に頼るところが大きい。この傾向は今後も継続すると考えられ、ソフトウェアが最新のハードウェア性能を活用するためには、メニーコアに対応したスレッド並列化、および SIMD 幅に対応したベクトル並列化に対応したコーディングが不可欠である。</p> <p>本提案では、「京」コンピュータ上で稼働実績のある汎用分子動力学計算ソフトウェア MODYLAS に対して、メニーコアアーキテクチャ(FX100 および Xeon Phi) 上での、特にスレッド並列計算性能向上を目的とした研究成果を発表する。</p>		
開催趣旨 の説明 (HPCS2016 の テーマとの 関連性)	<p>講演者らは、JHPCN 課題を通じて分子動力学計算による実際の研究者と計算機科学分野の研究者との共同研究により、計算アルゴリズム・並列化コーディングの両面からソフトウェア MODYLAS の性能向上に取り組んである。最新のハードウェアアーキテクチャはますます複雑さを増しており、前者のみの努力ではソフトウェアの迅速な性能向上は望めない。計算機科学分野の研究者との共同研究が不可欠であり、本提案ではその成果を報告する。</p>		

講演者 1	
タイトル	分子動力学計算による研究の現状と課題
講演者氏名(所属)	安藤 嘉倫 (名古屋大学 計算科学連携教育研究センター)
<p>概要</p> <p>分子動力学計算ソフト MODYLAS と「京」コンピュータなどの最新スーパーコンピュータを用いた、実際の研究例を紹介する。例えば、原子数 1000 万個オーダーの分子動力学計算により直径 30nm のポリオウィルスカプシドを一個まるごと扱えるようになり、従来のカプシドの断片のみを扱った分子動力学計算では扱えなかったさまざまなサイエンスを議論できるようになった。その一方原子数 1000 万個規模での、現実的に計算可能な時間スケールは数マイクロ秒程度であり、また統計サンプル数を増やせないなどの課題がある。メニーコアアーキテクチャ上での現状の MODYLAS の並列性能ボトルネックについて解説する。</p>	
講演者 2	
タイトル	粒子対計算部分のメニーコア間スレッド並列の効率化
講演者氏名(所属)	鈴木 惣一郎 (理研 AICS)
<p>概要</p> <p>分子動力学計算において最も演算量が多いのは、粒子対ごとの相互作用計算である。ノード内に 8 コアを持つ「京」コンピュータに最適化された MODYLAS では、粒子対相互作用の直接計算部分のノード内並列化として、サブセル内の原子に対してスレッド分割を行っている。サブセル内の原子数は 40 程度なため、メニーコアアーキテクチャ上では、この部分の実効性能低下が予想される。我々は、粒子対相互作用直接計算部分に対して、オリジナル MODYLAS の長所を活かした、複数の新たなスレッド並列化方法を提案した。これらのスレッド並列化方法の詳細、および、ノード内に 32 コアを持つ富士通 FX100 上での性能評価について報告する。</p>	
講演者 3	
タイトル	Xeon Phi による分子動力学計算の高速化
講演者氏名(所属)	大島 聡史 (東京大学情報基盤センター)
<p>概要</p> <p>既存のマルチコア CPU よりも多数の計算コアを搭載したハードウェアとして、Intel 社の Xeon Phi の普及が進んでいる。Xeon Phi 向けのプログラム作成には MPI や OpenMP を用いることができるため、既存のマルチコア CPU 向けに作成したプログラム(ソースコード)をそのまま利用することが可能である。しかし Xeon Phi には 60 程度の計算コアが存在し、最大で 200 を超えるスレッドを使用することができる一方、各計算コア単体の性能は同世代のマルチコア CPU と比べて低い。そのため、十分に高い並列度を持つループを並列化せねば Xeon Phi の性能を十分に発揮することができず、また最も高い性能を得ることができる計算方法、例えばキャッシュを用いた高速化などの手法や最適化パラメタが異なる可能性がある。本発表では Xeon Phi を対象として実施した MODYALS の最適化の内容と結果や、他のプロセッサとの比較結果について紹介する。</p>	