

「京」を利用した高並列汎用分子動力学シミュレーションソフト Modylas の開発

安藤 嘉倫†

「京」スーパーコンピュータ上での運用を前提に開発を進めている汎用分子動力学シミュレーションソフト Modylas (MOlecular DYnamics simulation software for LArge System) の内容を紹介する.

Development of general-purpose molecular dynamics simulation software—Modylas on the K supercomputer

YOSHIMICHI ANDOH

Content of our development of a general-purpose molecular dynamics simulation software—Modylas (MOlecular DYnamics simulation software for LArge System) on the K supercomputer is briefly introduced.

1. 開発の背景

「京」は 1 ノード 1CPU (8 コア), 合計 82,944 台の計算ノードが Tofu インターコネクトによって接続された計算機システムである. その構成上ハードウェアの性能を引き出すためには,

- MPI/OpenMP のハイブリッド並列化
- 高 MPI 並列に対応した演算アルゴリズム
- 全体通信の隣接通信への置換

が求められる.

一方、分子動力学 (MD) 計算は生体・バイオ系の研究手法として広く用いられている. MD 計算においてタンパク質や生体膜の物性を正しく再現する際鍵となるのが電荷間の長距離静電相互作用である. NAMD[1], GROMACS[2]などの従来の MD ソフトでは PME (Particle Mesh Ewald) 法によってこの静電相互作用を計算しているが, その内部で FFT を利用しているために, 数百コア並列でスケラビリティが飽和していた[3]. 当グループでは高速多重極展開法 (FMM)[4] の実装によりこの問題を回避し, 「京」利用時に想定される数万 MPI

並列であっても並列化効率を維持しえる MD 計算ソフトの開発を目指している.

2. 開発の内容

2.1 仕様 表 1 に Modylas 開発計画の概要を示した. 生体・バイオ系を対象とした MD 計算を前提としているため, 短距離 LJ 相互作用, Coulomb 相互作用に加え CHARMM 等の様々な汎用ポテンシャル関数の計算に対応する. 統計力学的アンサンブルは *NVE*, *NVT* (能勢-Hoover チェイン), *NPT* (能勢-Hoover-Anderson) および *NPT* パリネローランを選択でき RESPA 法に従い運動方程式の数値積分を行う. 化学結合間に距離拘束条件を導入し時間刻み Δt を稼ぐ SHAKE/RATTLE/ROLL 法についても実装する.

2.2 MPI 並列 MD 計算の基本セル全体を各辺 2 のベキ乗個のサブセルに分割し, プロセス数に応じた均等な個数のサブセルを各プロセスに担当させる (領域分割セルブロック). 数値積分および SHAKE は各プロセスが担当したセルブロック内の原子についてのみ行う.

† 名古屋大学 工学研究科 化学・生物工学専攻
Department of Applied Chemistry, Nagoya University

表 1 Modylas 開発計画の概要

| | |
|---------|---|
| コンパイラ対応 | 富士通 <i>frt</i> , インテル <i>ifort</i> , PGI <i>pgf90</i> |
| 並列方式 | MPI/OpenMP のハイブリッド並列, SIMD |
| 力場 | CHARMM (with CMAP), AMBER, OPLS |
| アンサンブル | <i>NVE</i> , <i>NVT</i> , <i>NPT</i> , <i>NPT</i> パリネローラン |
| 数値積分 | RESPA |
| 拘束動力学 | SHAKE/ROLL, RATTLE/ROLL |
| 静電相互作用 | Ewald, Particle Mesh Ewald (PME), 高速多重極展開法 (FMM) |

*Input は入力支援ソフト Nano-Ignition[5]にて作成

2.3 相互作用計算 分子内相互作用, LJ 相互作用および Coulomb 相互作用の粒子対部分は各軸方向に近接 2 サブセル, 計 125 サブセル内の該当相手原子と計算する. FMM 部分については各階層自プロセス担当スーパーセルと近接 875 スーパーセル間とで相互作用を計算する. ここでスーパーセルとは一つ下の階層の 2*2*2 個のサブセルもしくはスーパーセルが結合されたもので多重極子の展開中心をその中心に持つ.

2.4 通信 2.3 節で述べた相互作用対象の粒子座標および多重極子情報はすべて相互作用範囲内での *send/recv* 型隣接通信で取得する. その際トラス型ネットワークを考慮しホップ数最小かつ通信の相互衝突が起らないようなコーディングを行った. さらに通信バッファ配列とのコピーを最小限にしかつデータへの連続アクセスを実現する手法 (メタデータ法と呼称) を実装した.

3. 性能計測結果

インプットとして PYP タンパク質 64 分子, カウンターイオン 320 個, 水 375744 分子の計 1249984 原子 (サブセル数 32768 個, 平均 38 原子/サブセル) の実際的な系を用い「京」にて測定した結果の例を図 1 とした. ここでは LJ 相互作用および Coulomb 相互作用の粒子対部分のみを演算部/通信部別に示してある. 高 MPI 並列時に懸念される通信部は演算部 (ms オーダー) に対して無視できるほど小さい (100 μ s オーダー). 結果粒子対計算部全体がほぼ理想的にスケールしている. 当日は可能な範囲でその他の部分についても議論する.

謝辞

本開発は文部科学省「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用プロジェクト 次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発」

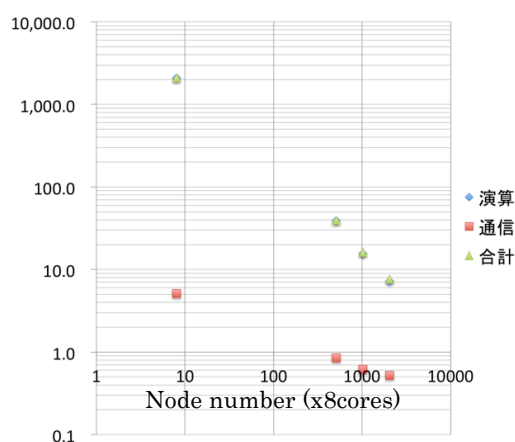


図 1 LJ 相互作用および Coulomb 相互作用の粒子対部分の経過時間 (ms). ただし整備中のシステムによる暫定的な数値.

および理化学研究所が実施している京速コンピュータ「京」の試験利用によるものです.

参考文献

- [1] J.C. Phillips et al., "Scalable molecular dynamics with NAMD" *J. Comput. Chem.*, Vol.26, pp.1781-1802, 2005.
- [2] B. Hess et al., "GROMACS 4: Algorithms for highly efficient, load-balanced, and scalable molecular simulation" *J. Chem. Theory Comput.*, Vol.4, pp.435-447, 2008.
- [3] C.C. Gruber and J. Pleiss, "Systematic benchmarking of large molecular dynamics simulations employing GROMACS on massive multiprocessing facilities" *J. Compt. Chem.*, Vol.32, pp.600-606, 2011.
- [4] L.F. Greengard, "The rapid evaluation of potential fields in particle systems", MIT Press, 1982.
- [5] Nano-Ignition web site: <http://nano-ignition.ims.ac.jp/>