

並列 FMO プログラム OpenFMO の性能最適化

稲富雄一¹、眞木淳²、高見利也^{1,2}、小林泰三¹、青柳睦^{1,2}、南一生³

1; 九州大学 2; 九州先端科学技術研究所 3; 理化学研究所

【はじめに】 フラグメント分子軌道 (FMO) 法は、タンパクや糖鎖、DNA などの大規模生体分子に対する量子力学に基づいた電子状態計算を、高精度、かつ、高速に行うために開発された計算手法である。巨大な分子を 20~40 原子程度の小さなフラグメントに分割して、各フラグメント (モノマー)、および、フラグメントペア (ダイマー) に対する小規模電子状態計算を行うことで、巨大分子全体の電子状態を近似する。複数のモノマー、ダイマーに対する小規模電子状態計算を並列に処理 (粗粒度並列処理) できること、また、各小規模電子状態計算自身も更に並列処理 (細粒度並列処理) が可能であることから、大規模並列処理向きのアルゴリズムである。京コンピュータを始めとして、近年の大型計算機は数万~数 10 万コアを搭載した超並列計算機であるため、これらを用いて FMO 計算による生体分子の電子状態計算を短時間で行うことができれば、創薬におけるスクリーニングなどへの応用が期待される。そこで、本研究では、まず、我々が開発している並列 FMO プログラム、OpenFMO、を用いて、FMO 法の効率的な超並列実行を目的とした最適化を行った。また、最適化を通じて、FMO プログラムの超並列化を行う上で必要な通信機構についての考察を行った。

【FMO プログラムについて】 FMO プログラムを並列化する場合、マスタプロセスが小規模電子状態計算を行う複数のワーカーグループにジョブを割り当てる、マスタ-ワーカー型の実行形態を採る (図 1)。ただし、ワーカーグループで行う小規模電子状態計算を行うために、別のワーカーグループで計算された結果 (モノマー密度行列データ) を利用するため、ワーカーグループ間のデータのやり取りが必要となる、という特徴がある。今回は、各ワーカーグループでの小規模電子状態における負荷均等化と、モノマー密度行列データに対するアクセスの効率化に注目して、最適化を行った。

【結果と考察】 小規模電子状態計算のカーネルコードは、分子積分と呼ばれる数値計算部分であり、小規模電子状態計算の 9 割以上を占めている。この分子積分の負荷を均等化するために、**global counter** を導入した。本実装では、ワーカーグループ内の 1 つのスレッドを **global counter** のマスタスレッドとして利用する方法で行った。また、分子積分の多くの部分は通信の必要がない静的負荷分散を用い、一部に **global counter** を用いた動的負荷分散を適用することで、**global counter** へのアクセスに伴う通信コストを削減しつつ負荷均等化を図り、高い並列性能を達成した。

複数のプロセスに分散保存されたモノマー密度行列データへのアクセス (参照、更新) 手段については、1 種類のコードで計算とデータ操作の両方に対応できるように、MPI-2 の受動的片側通信を用いた実装を行った。その結果、MPI-2 における片側通信の実装によっては、密度行列データへのアクセス性能が大きく低下することが分かった (図 2)。片側通信機能があるとプログラム記述が容易になることもあるため、高性能な片側通信の実装が望まれる。

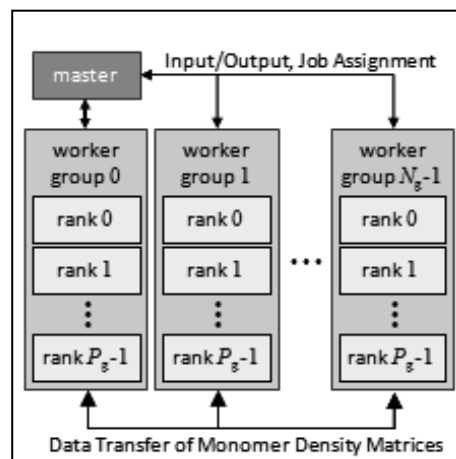


図 1 : FMO プログラムの構造

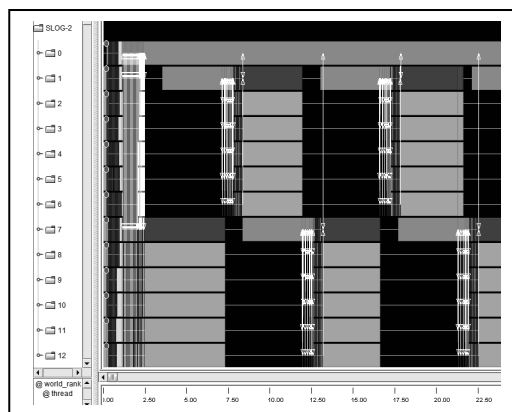


図 2 : 片側通信を用いた場合の実行プロファイル