

課題名 (タイトル) :

## 分子動力学計算プログラム MARBLE の並列化テスト

利用者氏名 : ○木寺 詔紀  
山根 努所属 : 社会知創成事業 次世代計算科学研究開発プログラム  
次世代生命体統合シミュレーション研究推進グループ 分子スケール研究開発チーム

## 1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

グランドチャレンジプログラムにおいて、生体高分子の分子動力学計算プログラム MARBLE の開発を進めているが、次世代スーパーコンピュータ「京」において、高並列環境における計算を目標としている。そこで、RICC の超並列 PC クラスター上での演算性能の評価、チューニングを行う。

## 2. 具体的な利用内容、計算方法

生体高分子用分子動力学計算プログラム MARBLE のコンパイルを行い、短時間で終了するベンチマークテストを行った。

## 3. 結果

現在、プログラム MARBLE では、「京」での高効率計算を想定し、OpenMP+MPI によるハイブリッド並列化を推し進めている。今回は、まず、現在、通常の分子動力学計算で使用している flat MPI 版について、RICC 上で正常に計算が実行可能であるかを中心にベンチマークを行った。インテルコンパイラおよび富士通コンパイラでのコンパイルにより計算を比較検討した。両コンパイラでの計算結果とも、正しい解を与えることが確認した。さらにコア数による計算時間の比較を行った。

コア数	コンパイラ	
	富士通	インテル
4	0.122963	0.115809
16	0.034213	0.032436

表 1. 使用コア数に対する計算時間 (秒)

表 1 は、2 万原子系での生体分子の分子動力学

シミュレーションの 1 ステップあたりのシミュレーション時間を示している。表よりわかるように、コア数の増加に対し高速化している。また、両コンパイラの結果を比較するとインテルコンパイラによる計算結果のほうが 5~6%程高速である。この傾向は、表 1 の結果とは別に行った 47 万原子系の 256 コアでの計算結果でも見られるが、この場合の計算速度の差は 2%程であり、コア数の増加により減少する傾向がある。

## 4. まとめ

簡易利用であるので、さほど大規模な計算はできなかったが、富士通コンパイラでも問題なくコンパイル実行ができるなど、重要な知見を得ることができた。

## 5. 今後の計画・展望

現在、簡易利用の 256 core 並列にとどまっているので、RICC の最大での 8192 core 並列までのスケールリングを目指す。(別なマシンでは 3000 超 core までの並列性能は確認している。)

今回は、flat MPI の計算であったが、現在 OpenMP も導入中である(池口の報告書を参照)。それが完成したら、RICC での性能評価を行いたい。その評価の際には、分子スケールチームでの共通のターゲットである、多剤排出トランスポーターでの計算を行うことを想定している。多剤排出トランスポーターの分子動力学計算は、次世代スパコン「京」での実証研究として行う必要がある。そのときの計算時間の見積もりなどを行う必要がある。

## 6. RICC の継続利用を希望の場合は、これまで利用した状況(どの程度研究が進んだか、研究におい

## 平成 22 年度 RICC 利用報告書

てどこまで計算出来て、何が出来ていないか) や、  
継続して利用する際に行う具体的な内容

今後の展望のところにも記述したが、来年度の作業としては、(1) OpenMP + MPI ハイブリッド並列化の性能評価, (2) 多剤排出トランスポーターの計算を考えている。池口のほうで、コーディングを行っている OpenMP + MPI のハイブリッド型のプログラムの速度を, 多剤排出トランスポーターでの計算速度を見積もる。まずは, 簡易利用の 256 コアで構わないと考えている。そのスケールリングが得られたところで, 8192 コアまでの性能評価を行う。その際には, 簡易利用から一般利用に変更しないといけないであろう。

### 7. 一般利用で演算時間を使い切れなかった理由

該当なし

### 8. 利用研究成果が無かった場合の理由

簡易利用にて, プログラムのコンパイルテスト, および, 短時間・小規模のベンチマークテスト実行を行ったためであるので, 利用研究成果を報告するまでに至っていない。