

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

理研での所属研究室名 :

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、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、昨年のサンプル計算のシステムよりも巨大な多剤排出トランスポーターAcrB についてのベンチマークを行った。計算は、富士通コンパイラで最適化オプション (-middle) を用いてコンパイルしたプログラムを用いて行った。

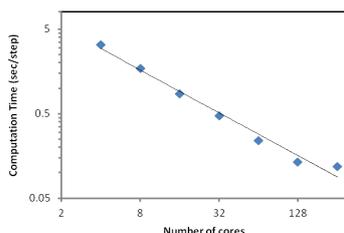


図 1. 使用コア数に対する計算時間

図 1 は、AcrB の水および脂質二重膜を含んだ全原子系 (約 470,000 原子) についての結果である。この図で示されるように、ほぼニアに計算速度

が増加していることが分かる。

## 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

これまで、簡易利用の 256 core 並列までの利用で、「京」を利用することを念頭に置いたプログラムの動作チェックを行ってきたが、今後「京」上での 8000 core 並列程度までのスケールリングを目指す。

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  
該当なし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だけであり、利用研究成果を報告するまでに至っていない。