

課題名 (タイトル) :

高並列アプリケーションプログラムの研究開発

利用者氏名 : 杉原崇憲

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

生命体基盤ソフトウェア開発・高度化チーム

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

理化学研究所において開発中の次世代スーパーコンピュータでは、科学技術的に重要なアプリケーションプログラムを用いて、ペタフロップスの性能を実証することが要求されている。特に、プロジェクトのグランドチャレンジであるライフサイエンスの分野では、科学的な意味でブレークスルーを成し遂げるペタフロップス級のアプリケーションプログラムの開発が要求されている。以上の目的のため、本研究開発では、タンパク質フォールディングの超並列計算を実現するアプリケーションプログラムを新しく開発する。また、作成したプログラムの実証を行うために、プロダクションランを行い、研究開発成果を論文の形にまとめる。

2. 具体的な利用内容、計算方法

マルチカノニカル法に基づいたモンテカルロ計算の高並列化を行う。マスタースレーブ方式の並列化を行う。計算対象はタンパク質などの高分子系である。高分子系がどのようなフォールディングを示すかを超並列計算により明らかにしたり、自由エネルギー等の統計量を求めたりすることが目的である。本研究開発では、マスタースレーブ方式により並列化を行うため、通信量は演算量にくらべてかなり少ない。場合によっては、ほとんど Embarrassingly 並列と言ってよいくらいである。ただし、並列数が数十万以上の場合は、通信あるいは計算方法が問題になる可能性があるため、その場合に備えて分析を行っているところである。

3. 結果

テスト計算の結果、予想した通りの計算結果が得られた。

4. まとめ

得られたデータをもとに論文を作成する。次は実際のタンパク質についての計算を行う予定である。

5. 今後の計画・展望

簡単なモデルでの検証は完了したので、来年度以降は、より現実的な問題に取り組みたい。