

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 : 和光研究所 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

- | | |
|--|--|
| <p>1. 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。</p> <p>2. 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。</p> <p>3. コードの開発および検証は完了した。テスト計算の結果、予想した通りの計算結果が得られたので、プロダクションランを行った。</p> | <p>4. 現在、プロダクションランを行っているところである。必要なデータがそろってきたので、論文作成の準備をしているところである。</p> <p>5. 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。</p> <p>6. 全 CPU 時間の 10%程度を消化したところである。新年度以降は、実際のタンパク質を用いた計算を始める予定である。</p> <p>7. 申請から 1 年間で使いきる予定。</p> |
|--|--|

平成 21 年度 RICC 利用研究成果リスト

【論文、学会報告・雑誌などの論文発表】

- T. Sugihara, J. Higo, and H. Nakamura, "Parallelization of Markov chain generation and its application to the multicanonical method", J. Phys. Soc. Jpn. 78, 074003 (2009).
- J. Higo, N. Kamiya, T. Sugihara, Y. Yonezawa, and H. Nakamura, "Verifying trivial parallelization of multicanonical molecular dynamics for conformational sampling of a polypeptide in explicit water", Chem. Phys. Lett. 473, 326 (2009).