

課題名 (タイトル) :

大規模並列化に適した MD コアプログラム開発

利用者氏名 :

○大野 洋介*
小山 洋*
長谷川 亜樹*
舛本 現*
森本 元太郎**
似鳥 啓吾**
古石 貴裕***

理研での所属研究室名 :

- * 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
- ** 和光研究所 基幹研究所 先端計算科学研究領域
システム計算生物学研究グループ 高速分子シミュレーション研究チーム
- *** 本所 知的財産戦略センター
産業界との融合的連携研究プログラム 界面ナノ構造研究チーム

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

次世代生命体統合シミュレーション研究推進グループでは次世代スーパーコンピュータを活用するグランドチャレンジとして生命科学分野でのソフトウェア開発を行なっている。その中で生命体基盤ソフトウェア開発・高度化チームは他のチームのソフトウェアの開発支援や共通で利用できるソフトウェア基盤の開発を担当している。本課題の目的は開発中の基盤ソフトウェアの一つである分子動力学(MD)コアプログラムの性能評価、改良点の分析、並列性能改良である。

2. 具体的な利用内容、計算方法

本課題では分子動力学計算で最も計算負荷のかかる二体相互作用計算の性能評価を行なった。クーロン相互作用のような二体相互作用は直接計算では演算量が粒子数の二乗に比例して増加する。そのため、原子間相互作用が遠距離では弱いことに着目し、直接計算はカットオフ距離内のみで行うカットオフ法と、原子の物理量をメッシュ点に分配して空間メッシュで遠距離相互作用を計算する Particle Mesh (PM)法を組み合わせるのが主流であり、開発中の MD コアプログラムで

も採用した。カットオフ法では近距離粒子の探索の効率化のため空間座標で粒子を分割・グループ化するセルインデックス法を採用した。計算も空間分割の単位であるセルを単位として並列化する。セルインデックス法による並列効率を向上させるとともにカットオフ計算の効率化を図る。計算対象は水分子の系とした。水分子内の結合力による運動のタイムスケールは二体相互作用によるものより短いため、結合力として計算せず結合距離を固定する拘束条件として処理する SETTLE法を使用した。

並列化は MPI のみでスレッド並列は使用していない。

3. 結果

図 1 は 97 万原子の水の系をカットオフ計算で行なった場合の処理時間が並列数によってどのように減少するかを表示したものである。総処理時間(total)だけでなく、純粋な計算時間(Calculation)と通信時間(Communication)もプロットしてある。

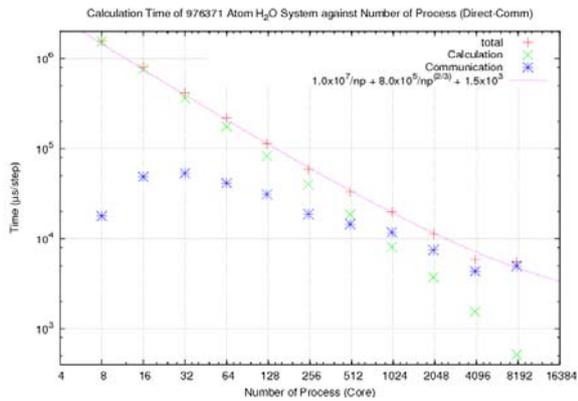


図 1

計算時間は並列数に反比例で減少しており計算部分の並列化は 8000 並列程度では問題ないことがわかる。通信時間は、おおよそ並列数の 2/3 乗に反比例で減少しており、空間分割で並列化した場合の通信コストが分割領域の表面積に比例するというモデルで説明できる。1000 並列以上では通信時間が支配的であることも確認できた。ただし、8000 並列に関しては通信時間が増加しており、4000 並列より性能が劣化している。これは、同時に行なわれる通信の増加による速度低下が顕在化したためだと考えられる。

このため、主にトーラス型ネットワークを想定して開発した、XYZ 軸方向に逐次転送することで同時通信の個数を減らした転送方法も評価した。もとの方式では各プロセスは隣接領域を担当する 13 プロセス(作用反作用を考慮して近接 26 方向のうちの半分)と通信していたが、斜め隣接領域との通信は軸方向隣接のプロセスを経由することで 5 個プロセスのみの通信に削減した。ただし、一回あたりの通信量は増加し、異なる軸方向は同時ではなく順次行なうため、RICC のようなスイッチによるネットワークでは効果は限定的だと予想していた。図 2 が軸方向逐次通信の場合の処理時間である。

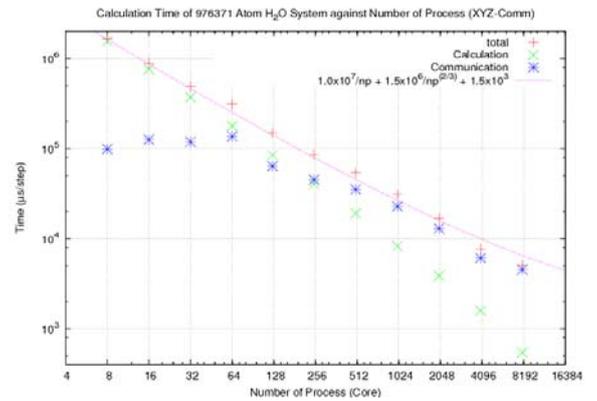


図 2

予想どおり、全般に全方向同時通信により通信時間は増加しているが、8000 並列での増加がなくなり、同時通信を減らした効果が現れたと考えられる。

4. まとめ

セルインデックス法によるカットオフ計算の計算自体は 8000 並列以上の並列性があるが、通信により大規模並列時の限界性能が制限されていることが確認できた。

通信性能は並列度によって最適な通信パターンが異なる場合があることを確認できた。

5. 今後の計画・展望

8000 並列までの並列性は確認できたが、通信による限界が見えているため、通信量の削減等の改良が必要である。スレッド並列によりノードあたりの通信負荷を減らす等の改善も行なう。また、計算性能も CPU 性能と比較して改善の余地がある。

平成 21 年度 RICC 利用研究成果リスト

【国際会議などの予稿集、proceeding】

Hiroshi Koyama , Gen Masumoto, Yousuke Ohno, Aki Hasegawa, Gentaro Morimoto, and Makoto Taiji, “Development of Highly parallelized Molecular Dynamics Simulation code”, SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing (PP10), Seattle, Washington (2010 Feb.)

Hiroshi Koyama, Gen Masumoto, Yousuke Ohno, Aki Hasegawa, Gentaro Morimoto, Makoto Taiji, “cppmd” current status and the future, The 2nd Biosupercomputing Symposium, Tokyo (2010 Mar.)