

課題名 (タイトル) :

分子動力学計算プログラムの開発と性能評価

利用者氏名 : ○笠原 浩太、小川 (土屋) 裕子、Neetha Mohan

所属 : 情報基盤センター 和光ユニット

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

当研究室は産総研 MolProf と共同で、分子シミュレーションパッケージ myPresto の開発を長年に渡って実施してきた。この一部として、より効率的な分子動力学(MD)計算を実現するため、GPGPU を用いた超並列演算に対応した計算プログラム myPresto/Psygene-G を開発[1]し、種々の系に応用してきた(例えば[2])。本プログラムの特徴は第一に独自の MD 理論に特化した実装であること、第二に MPI 並列によって複数の GPGPU での並列計算を実現したことが挙げられる。我々の研究室では Zero-multipole summation 法 [3,4] や Virtual system-coupled Multicanonical MD 法[5]、Virtual system-coupled adaptive umbrella sampling 法[6] など、多様な独自の方法論を開発している。これらを始めとする先端的な方法論を実装し、速やかに応用計算を実施するためのプラットフォームとして myPresto/Psygene-G が開発・維持されてきた。演算の特徴としてはノード間並列による超大規模系の演算に適したプログラム構成となっており、100 万原子を超える大規模系へと応用されている[7]。現時点での課題は、単 GPU あたりの性能の向上である。myPresto/Psygene-G は Fermi 世代の NVIDIA アーキテクチャを基本として開発されており、Kepler 世代の機能を最大限引き出すための工夫が為されていない。これを解決することで大幅な性能向上が期待できる。そこで当研究室では myPresto/Psygene-G に基づいて新たな MD 計算プログラム (名称未定) を開発した。

本プロジェクトにおいては開発過程における種々のテスト計算、性能テストなどを実施した。また本格的なベンチマークに向けて、実用的な系を構築し、まずは標準的な MD 計算プログラムである Gromacs による演算性能のテストを実施した。

2. 具体的な利用内容、計算方法

myPresto/Psygene-G をベースに、新たなプログラムをスクラッチから構築した。NVIDIA Kepler アーキテクチャの性能を引き出すために、Pall らのアルゴリズム[8]と Anthopoulos らのアルゴリズム[9]を参考に、独自の実装を施した。ここでは 20 アミノ酸からなる Trp-cage を含む系について、全原子 MD 計算を 1,000,000 ステップ実施した。静電相互作用には Zero-dipole summation 法[10,11]を用いた。

また、Gromacs を用いて異なるリガンドが結合した 400 残基程度の蛋白質のシミュレーションを実行した。実行条件は以下の通りである：力場 amber99sb, 溶媒 tip3p, 温度 300k, エネルギー極小化 (50,000 ステップ), 平衡化 (NVT, NPT 各々 500,000 ステップ), プロダクション (現在約 200ns まで終了)。

3. 結果

新規計算プログラムによる Trp-cage を含む系の全原子計算の結果を (HOKUSAI と同じ K20X でのテスト計算結果であるが) 図 1 に示す。このように、単 GPU での性能では従来プログラムの約 5 倍の高速化を実現した。

Gromacs による 3 個の異なるリガンド複合体構造のシミュレーションは、これまでのところ複合体間で顕著な違いは観察されていない。来年度も継続して計算を実行する。

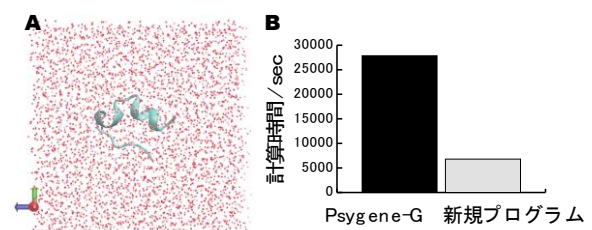


図 1. テスト計算の参考データ A) テスト系 (Trpcage 13,277 原子) B) 10^6 step の計算に要した時間

4. まとめ

今年度は種々の独自理論に基づいた計算を実行するための、MD 計算プログラムの開発を行った。単 GPU での性能に関しては我々の従来のプログラムを大きく上回る結果を得ることができた。

現時点では、新規計算プログラムでは MPI 並列を実装しておらず、myPresto/Psygene-G の様に大規模系への適用は難しい。しかしながら、我々の開発した TTP 法[12]に基づいて小規模な系を単純並列で複数計算し、拡張アンサンブル系でのサンプリングを行う目的に対しては既に実用段階に達していると言って良い。

5. 今後の計画・展望

今回は 20 残基の小規模な蛋白質についてベンチマークを実施したが、今後はより実践的な系での検証を行う事が課題となる。世界的に標準となりつつある MD 計算ソフトウェア Gromacs との比較を目的として、まずは Gromacs による系の構築と MD 計算を実施した。Gromacs による計算は来年度も継続し、演算性能の比較テストを行う。

6. 文献

1. Mashimo et al., J Chem Theory Comput. 2013;9: 5599–5609.
2. Kasahara et al., PLoS ONE. 2014;9: e112419.
3. Fukuda, J Chem Phys. 2013;139: 174107.
4. Fukuda et al, J Chem Phys. 2014;140: 194307.
5. Higo et al., J Chem Phys. 2013;138: 184106.
6. Higo et al., J Comput Chem. 2015;36: 1489–1501.
7. Nishikawa Y et al., J Mol Biol. 2014;426: 3232–3245.
8. Páll and Hess. Computer Physics Communications. 2013;184: 2641–2650.
9. Anthopoulos et al., J Comput Chem. 2013;34: 2249–2260.
10. Fukuda et al., J Chem Phys. 2011;134: 164107.
11. Fukuda et al., J Chem Phys. 2012;137: 054314–054314–15.
12. Ikebe et al. J Comput Chem. 2010;32: 1286–1297.