jh170024-NAH

安藤 嘉倫（名古屋大学工学研究科附属計算科学連携教育研究センター）

分子動力学計算ソフトウェアMODYLASの大規模メニーコア・ワイドSIMDクラスター対応並列化に関する研究

研究背景

分子動力学 (MD) 計算

・化学，物理，生物，およびウィルス学といった様々な学問分野において実験とならぶ解析ツールとして広く普及
・工業分野においても，分子の特性を活かしたナノ機能性材料や高分子材料を設計するツールとして普及しつつある.

長距離静電相互作用の計算を含めた大規模かつ長時間なMD計算を行うことにより,学問上のブレークスルーが期待できるだけでなく, より高精度高効率な材料設計が可能になる.

研究目的

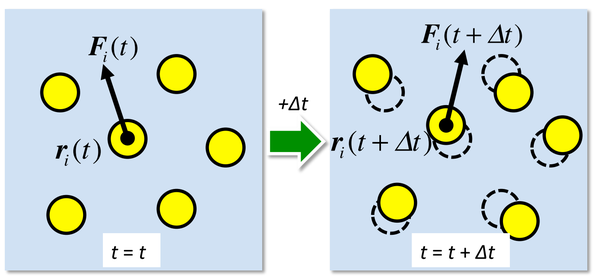
汎用分子動力学計算ソフトウェアMODYLAS[1] に対しH27およびH28年度に引き続きメニーコア・ワイドSIMD型計算機 (FX100 および Xeon Phi) の性能を発揮させるため以下チューニングを行う.

・OpenMP並列性能チューニング
・ワイドSIMD並列性能チューニング
・Tofu2への最適化

将来のエクサスケールマシン上において数億から10億原子系での実用的なMD計算を可能にする.

www.modylas.org

分子動力学(MD)計算



ベルレ法: $r(t+\Delta t) = 2r(t) - r(t-\Delta t) + \Delta t^2 \frac{F(t)}{m}$

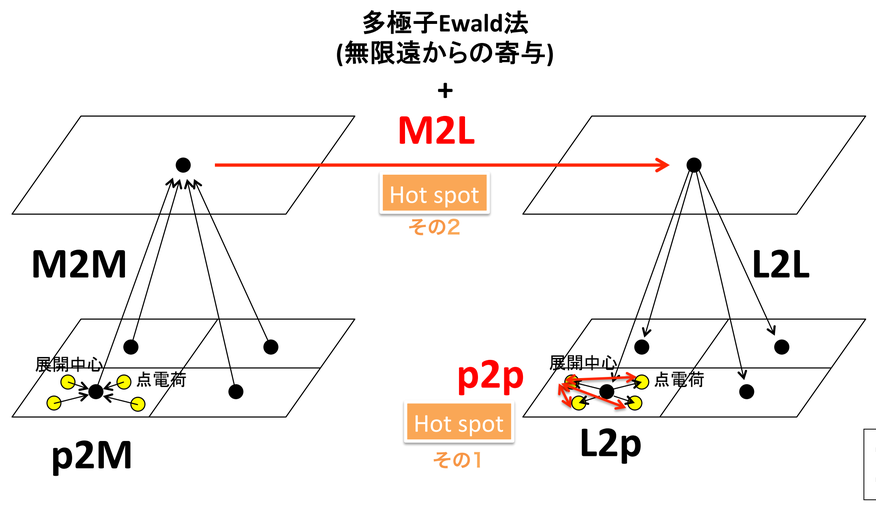
$$m_i \frac{d^2 \boldsymbol{r}_i}{dt^2} = \boldsymbol{F}_i \qquad \boldsymbol{F}_i = -\frac{\partial U_{tot}}{\partial \boldsymbol{r}_i}$$

力場関数

$$U_{tot} = \sum_{bonds} K_b(b-b_0)^2 + \sum_{angles} K_\theta(\theta-\theta_0)^2 + \sum_{ub} K_{ub}(s-s_0)^2 + \sum_{dihedrals} K_\phi[1+\cos(n\phi-\delta)] + \sum_{impropers} K_\psi(\psi-\psi_0)^2 + \sum_{nonbonds} \varepsilon_{ij}\left[\left(\frac{R_{ij}}{r_{ij}}\right)^{12} - 2\left(\frac{R_{ij}}{r_{ij}}\right)^{6}\right] + \frac{q_i q_j}{r_{ij}}$$

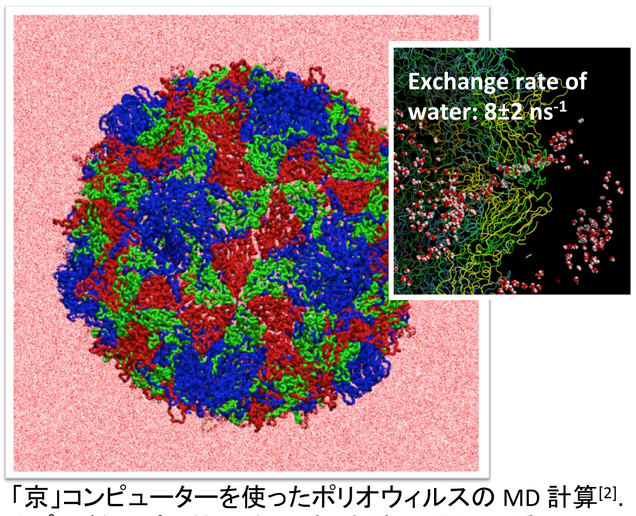
厳密・高速に計算

高速多重極展開法(FMM)

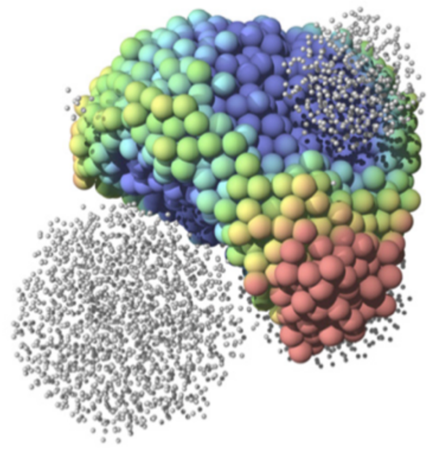


・計算量 $O(N)$
・全対全通信なし

MD計算研究の対象

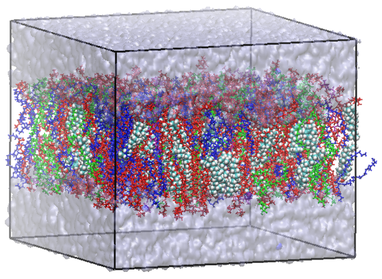


「京」コンピューターを使ったポリオウィルスの MD 計算[2].
カプシドタンパク質, イオン, 水, 合計650万原子系, 200 ns.

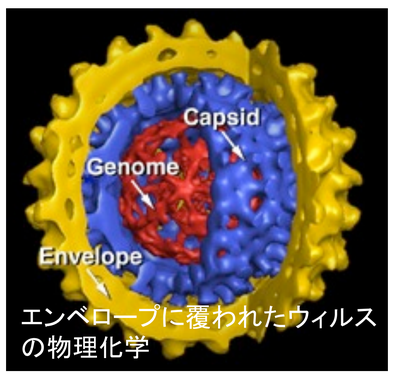


メタンハイドレート融解過程のMD計算[3].
25万原子系, 100 ns.

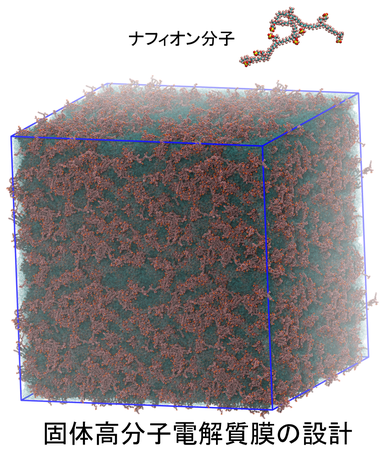
エクサスケール時代の計算対象：



細胞膜模倣脂質二重膜での
ミクロドメイン形成



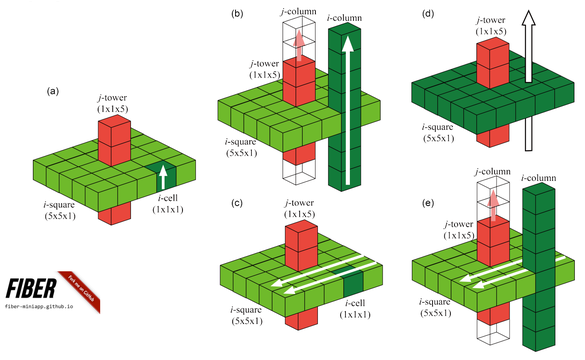
エンベロープに覆われたウィルスの物理化学



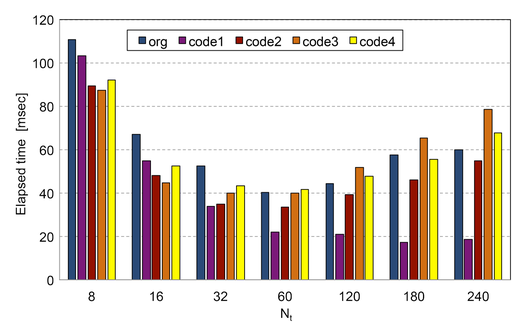
固体高分子電解質膜の設計

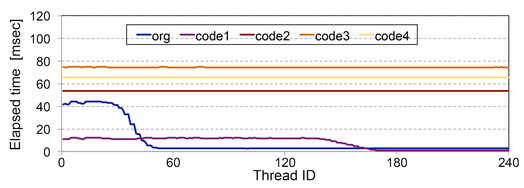
メニーコア対応並列化

p2p について5つの新アルゴリズムを提案

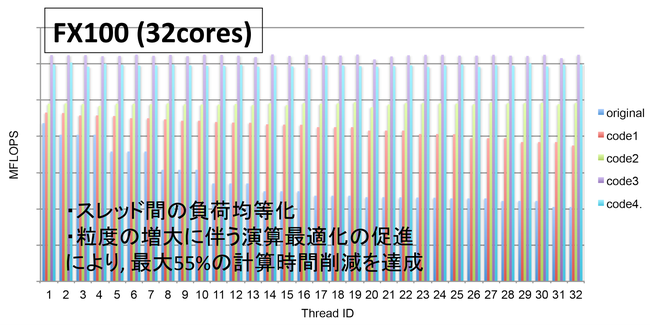


Xeon Phi (240threads, KNC)





FX100 (32cores)

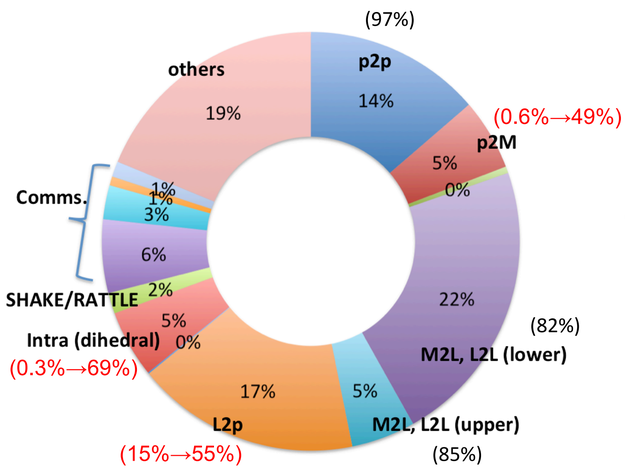


・スレッド間の負荷均等化
・粒度の増大に伴う演算最適化の促進
により, 最大55%の計算時間削減を達成

・240スレッドまでの負荷均等化を達成したにも関わらず, スレッドあたりの計算時間は増加
→ KNLにおいて原因を調査し, 最適化を実施予定

SIMD最適化

FX100 (256bit)



典型的なインプットでの計算時間構成

(X%→Y%) はオリジナルおよびSIMD最適化後のSIMD浮動小数点演算命令率

・p2MおよびL2pでの処理構造 (オリジナル)

```
do ii=1,lxdiv*lydiv*lzdiv          プロセス所持サブセル数
!$omp do
    do i0=tag(icz0,icy0,icx0),
&       tag(icz0,icy0,icx0)+na_per_cell(icz0,icy0,icx0)-1   サブセル内原子数
    call cart2angle(xta,yta,zta,rad,the,csthe,phi)
    do j0=0,nmax   [典型的にはnmax=4]                  degree j0, oeder k0
    do k0=-j0,j0
        球面調和関数演算
          zphi=dcmplx(0.d0,k*phi)
          g=f*pre(j,iabs(k))*algndr(j,iabs(k),csthe)
        force, potential
    enddo ! k0
    enddo ! j0
    enddo ! i0
!$omp end do nowait
enddo ! ii
```

・SIMDループ長不足
・関数参照pre, algndr
・if分岐

$$Y_\ell^m(\theta,\phi) = (-1)^{(m+|m|)/2}\sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}\frac{(\ell-|m|)!}{(\ell+|m|)!}}\,P_\ell^{|m|}(\cos\theta)\,e^{im\phi}$$

・p2MおよびL2pでの処理構造 (SIMD最適化後)

```
!$omp do
do ii=1,lxdiv*lydiv*lzdiv
    do i0=tag(icz0,icy0,icx0),
&       tag(icz0,icy0,icx0)+na_per_cell(icz0,icy0,icx0)-1
        call cart2angle(xta,yta,zta,rad,the,csthe,phi)
        → rad,the,csthe,phi 配列
    enddo
    do j0=0,nmax   [典型的にはnmax=4]
    do k0=-j0,j0
    do i0=tag(icz0,icy0,icx0),
&       tag(icz0,icy0,icx0)+na_per_cell(icz0,icy0,icx0)-1
        rad,the,csthe,phi 配列に対する球面調和関数演算
        force, potential
    enddo
    enddo ! k0
    enddo ! j0
    enddo ! i0
enddo ! ii
!$omp end do nowait
```

・SIMDループ長 ~セル内原子数
・pre, algndr をテーブル化

p2M, L2pおよびdihedralルーチンのSIMD最適化により全体計算時間の25% 削減を達成

研究計画

1年目：基礎評価とメニーコア対応コード作成
2年目：SIMD対応 (最適化) コード作成と最終性能評価
3年目：大規模 Xeon Phi クラスター（Oakforest-PACS）対応コード作成
第一期(4月~6月) Oakforest-PACS 上でのコード事前評価 (スレッド並列, SIMD)
第二期(7月~9月) スレッド並列に関するコード改良
第三期(10~12月) SIMDに関するコード改良
第四期(1~3月)　Oakforest-PACS 上でのコード性能評価
4年目(平成30年度)：Oakforest-PACS へのさらなる最適化と実証計算（予定）

研究体制

名古屋大学 安藤嘉倫 (代表), 坂下達哉, 藤本和士, 吉井範行,篠田渉, 岡崎進
名古屋大学 情報基盤センター 荻野正雄(副代表), 片桐孝洋
九州大学　情報基盤研究開発センター 大島聡史 (副代表)
理研AICS　鈴木惣一朗

参考文献 [1] Y.Andoh, N. Yoshii, et al., J. Chem. Theory Comput., **9**, 3201 (2013). [2] Y. Andoh, N. Yoshii, et al., J. Chem. Phys., **141**, 165101 (2014). [3] T. Yagasaki, M. Matsumoto, et al., J. Phys. Chem. B, **118**, 1900 (2014); **118**, 11797 (2014).