

分子動力学計算ソフトウェアMODYLASのメニーコアアーキテクチャ対応 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, およびウイ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。

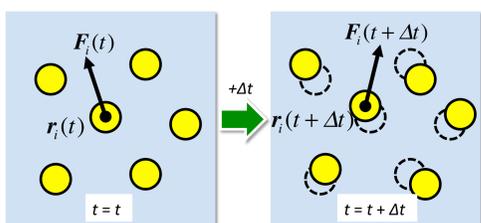
研究目的

- 「京」コンピュータおよびFX10上で稼働実績のある汎用分子動力学計算ソフトウェアMODYLAS^[1]に対して以下を行う。
- ・次世代のメニーコア計算機 (FX100 および Xeon-Phi) の性能を發揮させるためのOpenMP並列/SIMD並列チューニング
- ・Tofu2への最適化

本課題をステップとして将来エクサスケールマシンとMODYLASを用いることによって数億から10億原子系での実用的なMD計算を可能にする。



分子動力学(MD)計算



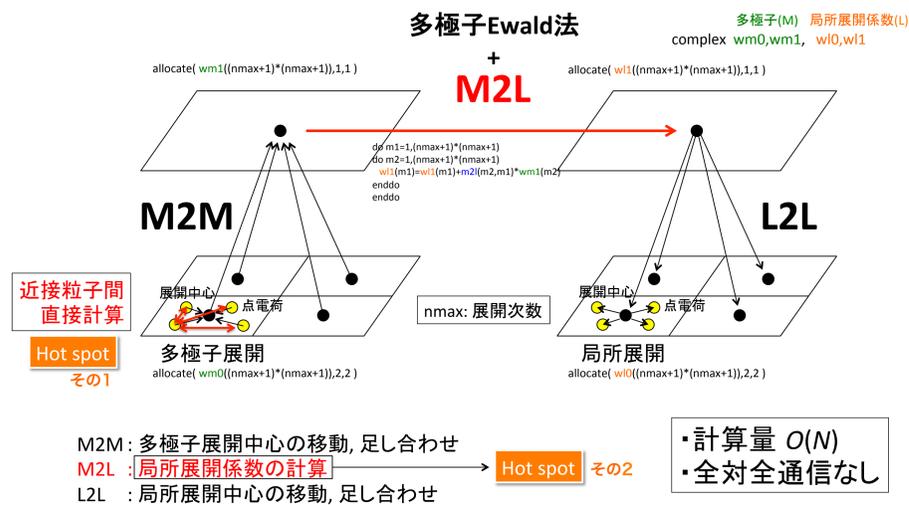
$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \mathbf{F}_i \quad \mathbf{F}_i = -\frac{\partial U_{tot}}{\partial \mathbf{r}_i}$$

力場関数

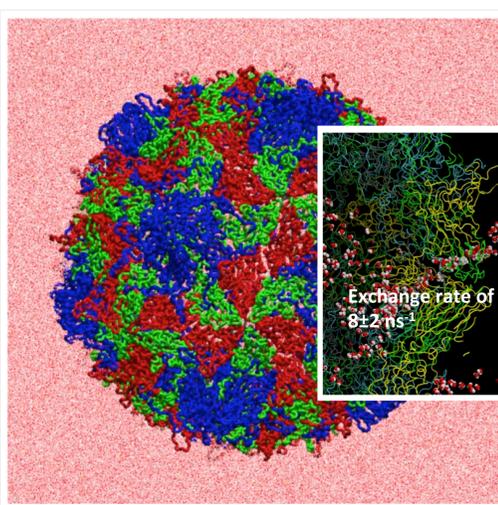
$$U_{tot} = \sum_{bonds} K_b (b - b_0)^2 + \sum_{angles} K_\theta (\theta - \theta_0)^2 + \sum_{ub} K_{ub} (s - s_0)^2 + \sum_{dihedrals} K_\phi [1 + \cos(n\phi - \delta)] + \sum_{impropers} K_\psi (\psi - \psi_0)^2 + \sum_{nonbonds} \epsilon_{ij} \left[\left(\frac{R_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - 2 \left(\frac{R_{ij}}{r_{ij}}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

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

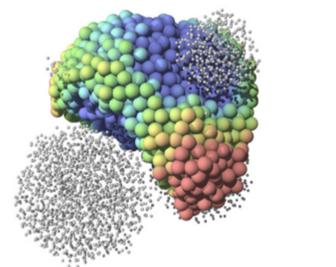
高速多重極展開法(FMM)



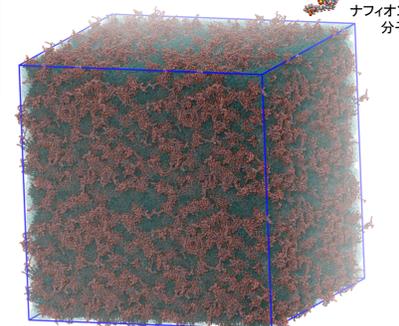
MD計算研究の対象



「京」コンピュータを使ったポリオウイルスの 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.

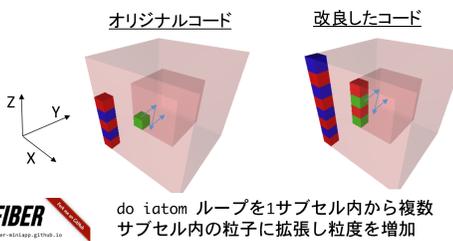
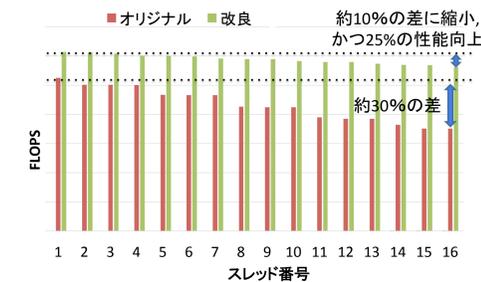


将来の計算対象候補: 燃料電池ナフィオン高分子膜の全原子MD計算

スレッド並列の事前評価

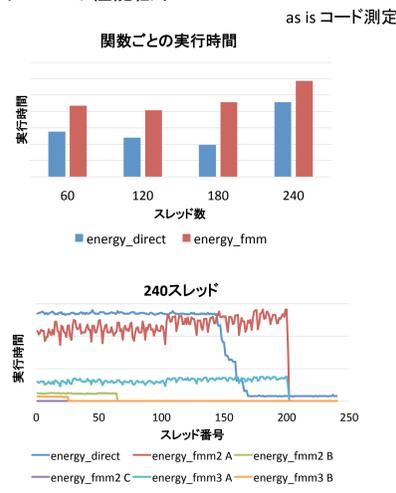
FX10 oakleaf

- ・粒子間直接計算について1サブセル内の粒子数が少ない(粒度<50)ため16コア並列でスレッド間ロードインバランスが顕在化



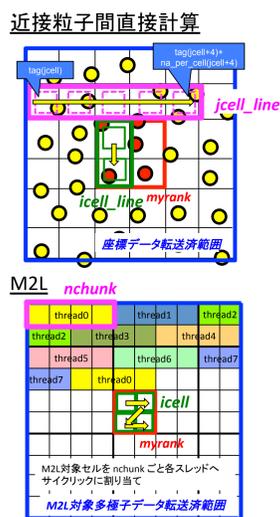
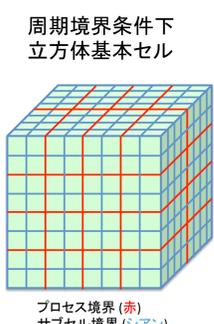
Xeon Phi 5110P 60コア/1MIC

- ・粒子間直接計算は180スレッドまでスケール
- ・上位階層のM2Lにおいて粒度の枯渇が顕著になりFMMの性能低下



今後, 更なる精査の上ループ構造変更を実施するなどして性能向上を図る

MPI/OpenMP ハイブリッド並列化



```

!$omp parallel
do icell_line
do icell(myrank)
!$omp do
do iatom=tag(cell), tag(cell)+na_per_cell(icell)-1
do jatom=tag(cell), tag(cell)+na_per_cell(icell+4)-1
ポテンシャル, 力の計算
enddo
enddo
!$omp end do
enddo
!$omp end parallel

!$omp parallel
!$omp do schedule(static,nchunk)
do load=1,nload
icx=lddir(1,load); icy=lddir(2,load)
do icell(myrank)
if(icx,icyが近接2セル以遠の領域にあれば)
do m1=1,(nmax+1)^2; do m2=1,(nmax+1)^2
w1_local=w1_local+m2*wm_local
enddo; enddo
endif
enddo
enddo
!$omp end do
!$omp end parallel
  
```

「京」での8スレッド並列に最適化

粗度 < 50

OpenMP 粗度 < 50

粗度 ~ 1200

OpenMP 粗度 ~ 1200 (階層依存)

研究計画

- 1年目: 基礎評価とメニーコア対応コード作成
- 第一期(4月~6月) スレッド並列の事前評価 FX10 (16コア), Xeon Phi
 - 第二期(7月~9月) スレッド並列の事前評価 FX100 (32コア), およびコード改良
 - 第三期(10~12月) コード評価と高度化Ⅰ FX10, Xeon Phi
 - 第四期(1月~3月) コード評価と高度化Ⅱ FX100, Xeon Phi
- 2年目: SIMD対応(最適化)コード作成と最終性能評価【予定】
- 自動性能チューニング技術によるチューニングパラメータ最適化も並行して実施

研究体制

- 名古屋大学 安藤嘉倫 (代表), 荻野正雄 (副代表), 岡崎進, 篠田渉, 吉井範行, 藤本和士, 遠藤裕太
- 東京大学 片桐孝洋, 大島聡史
- 理研AICS 小村幸浩, 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).