

jh180050-NAJ

安藤 嘉倫 (自然科学研究機構 分子科学研究所)

# 分子動力学計算ソフトウェアMODYLASのストロングスケールラビリティ向上のための演算および通信性能最適化



## 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

H27, H28およびH29年度に引き続き, 汎用分子動力学計算ソフトウェア **MODYLAS**<sup>[1]</sup> に対し, メニーコア・ワイドSIMD型計算機 (FX100, ITO および Xeon Phi) 上でのコード最適化を行う。

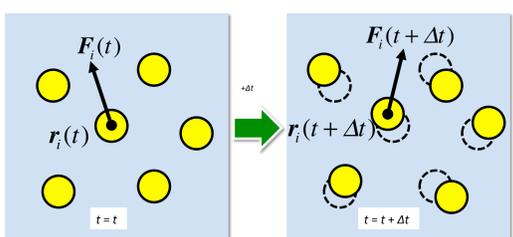
- ・OpenMP 並列性能の向上
- ・512bit SIMD 演算性能の向上
- ・アシスタントコアを利用したMPI並列性能向上

により, 将来のエクサスケールマシン上において数億~10億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



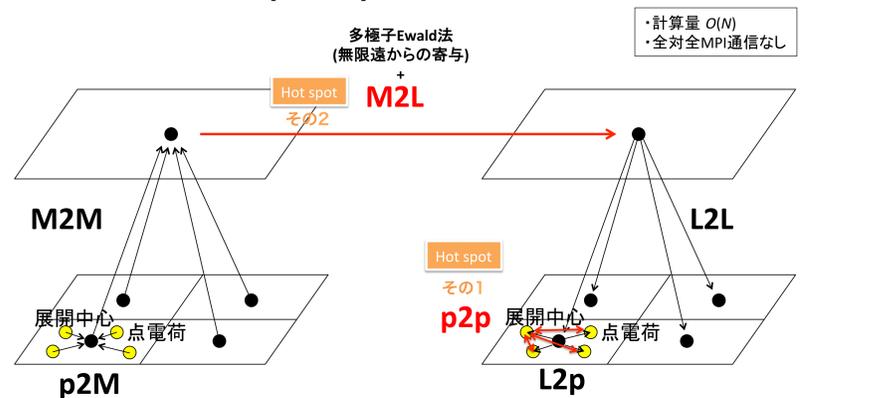
$$m_i \frac{d^2 r_i}{dt^2} = F_i \quad F_i = -\frac{\partial U_{tot}}{\partial r_i}$$

力場関数

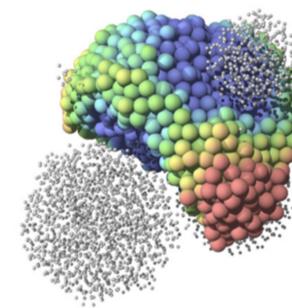
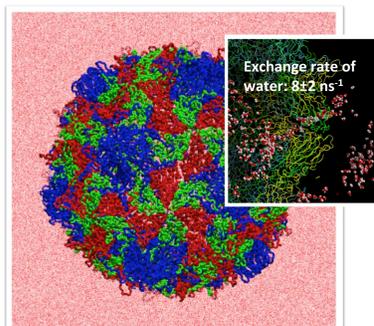
$$U_{tot} = \sum_{bonds} K_b (b - b_0)^2 + \sum_{angles} K_\theta (\theta - \theta_0)^2 + \sum_{nb} K_{nb} (s - s_0)^2 + \sum_{dihedrals} K_\phi [1 + \cos(n\phi - \delta)] + \sum_{impropers} K_\psi (\psi - \psi_0)^2 + \sum_{nonbonds} \left[ \frac{R_{ij}}{r_{ij}} - 2 \left( \frac{R_{ij}}{r_{ij}} \right)^2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

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

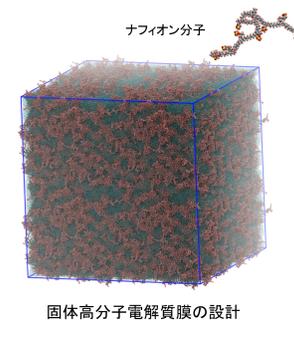
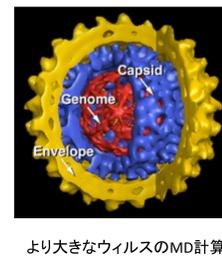
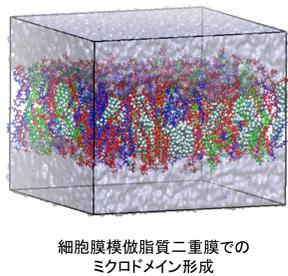
### 高速多重極展開法(FMM)



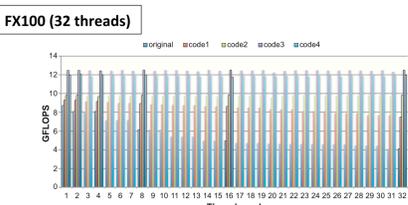
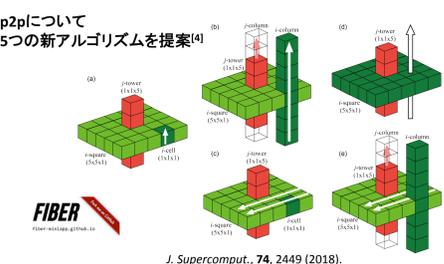
## MD計算研究の対象



### エクサスケール時代の計算対象:

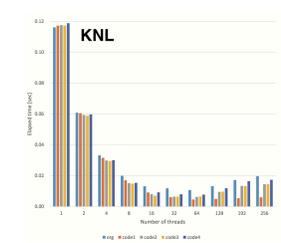


## メニーコア対応並列化



### Xeon Phi KNL (256threads)

独自タイマー挿入による経過時間測定

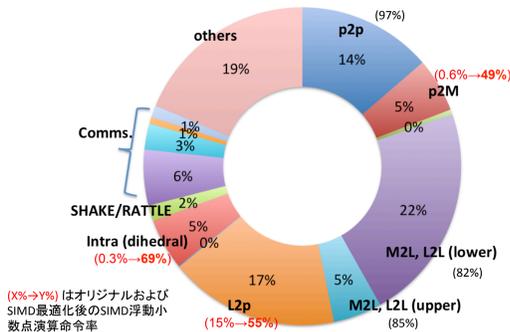


・実行時間 (1 ms) の10倍程度のスパイク状の遅延が不規則に観測  
 ・256スレッドまでの負荷均等化を達成したにも関わらず, スレッドあたりの計算時間は増加  
 → 原因究明のため vtune 以外での詳細なプロファイル情報取得を試行中

## SIMD最適化

### FX100 (256bit SIMD)

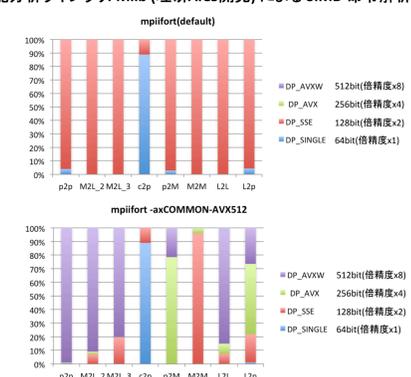
典型的なインプットでの計算時間構成



・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%を削減

### ITO (512bit SIMD)

性能分析ライブラリPMIib (理研AICS開発) による SIMD 命令解析



・ディレクティブ IOOMP SIMD SIMDLENの挿入によるSIMD命令発行制御により, AVXW命令を活用した実行時間削減に成功 (M2L, p2M, L2p)

## 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 (Oakforest-PACS) 対応コード作成
- 4年目(平成30年度): ストロングスケールラビリティ向上のための演算・通信コードの最適化
- 第一期(4月~6月) Xeon Skylake-SP, FX100 上でのコード事前評価
- 第二期(7月~9月) アシスタントコアを利用した MPI 並列に関するコード改良
- 第三期(10~12月) 512bit SIMD, MPI 並列に関するコード性能評価
- 第四期(1~3月) Oakforest-PACSでの性能テスト, および更なる高度化

## 研究体制

安藤嘉倫 (代表) 分子科学研究所  
 中島大地, 藤本和士, 吉井範行, 篠田渉, 岡崎進 名古屋大学  
 荻野正雄 (副代表), 片桐孝洋 名古屋大学 情報基盤センター  
 大島聡史 (副代表) 九州大学 情報基盤研究開発センター  
 坂下達哉 玉川大学  
 鈴木惣一郎 理研 R-CCS



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). [4] Y. Andoh, S. Suzuki, et al., J. Supercomput., 74, 2449 (2018).