

jh210035-NAH課題
GPUの高速並列計算で実現する
交差禁止制御可能な
高分子シミュレータの開発

防衛大 萩田

2021.7.8-9

JHPCN: 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点
第13回 シンポジウム

本課題のねらい

- サイエンス的には、

鎖の交差禁止をON/OFFできるモデルの高速コード開発
(ON/OFFで、熱力学的状態を維持する条件で)

– 本格計算は、来年度以降を想定。

- 技術的には、

– CPUコードの最適化の追求

- コードの一般公開に向けて必要な作業

– GPU (A100, NVswitch) の活用

- GPU演算の最適化
- GPU Direct (NVswitch) の活用
- GPUのシステム側の機能の理解と活用
- OpenACCの効率的な利用方法

高分子のモデル／MP-SRP法の説明

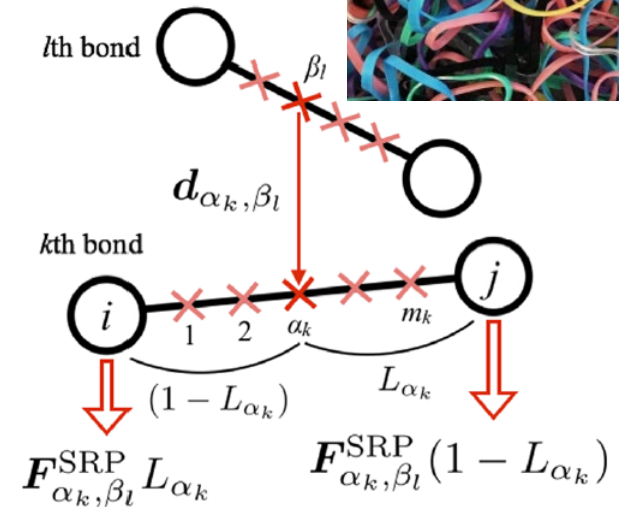
- 鎖の交差の禁止： 環状鎖の問題
 - 交差のON/OFFで物性が変わる。



- 計算モデルは？

– DPD法のMP-SRP法で可能。

- 多数の斥力中間点を挿入。
- 但し、計算コスト大
 - GPUで解決を期待。



– 計算特性は？

- 4粒子間の力の計算の問題になる。
 - 正確には、2粒子間と、その隣の2粒子の合わせて4粒子。
- 斥力中間点の計算は、SIMD向き。
- 幾何学的条件で、計算不要を判定可能。

検討アイテムと、研究参画者

代表
防衛大・萩田

• メインアイテム

MP-SRP法のGPUコードの作成

副代表
東大・芝先生

東大
下川辺先生

• サブアイテム

– 最新GPU利用技術の獲得

HPCプログラミング

CUDA

OpenACC

日本ゼオン
本田博士

名大
片桐先生

産総研
青柳先生

CUDA-aware-MPI

ブリヂストン
大熊博士

名大
畝山先生

システム利用技術

Gromacs

TensorFlow

阪大
伊達先生

LAMMPS

HooMD-bule

– 既存CPUコード(LAMMPSベース)の改良

東北大
村島先生

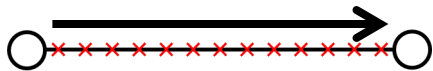
東北大
川勝先生

既存CPUコードの改良

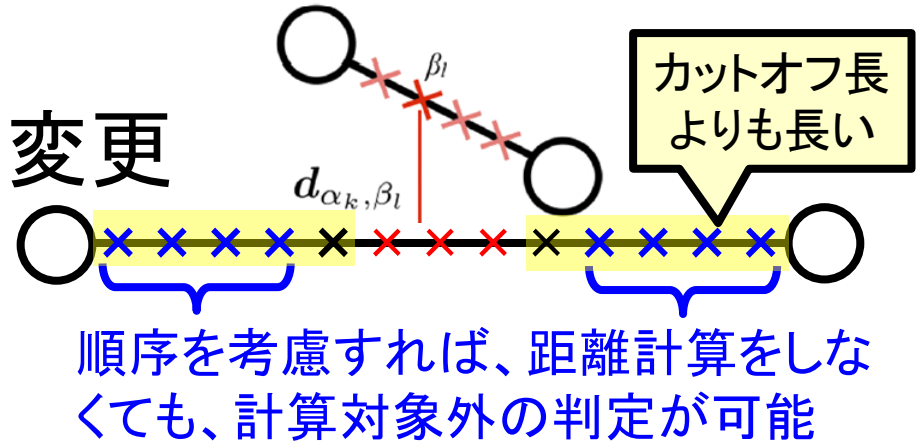
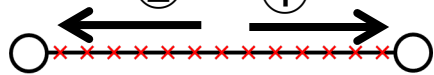
- 公開用に、USER-MPSRP パッケージ化
- 中間斥力点には、カットオフ長が存在。

- 改良実装：計算順序を変更

- これまで



- 改良 ② ①

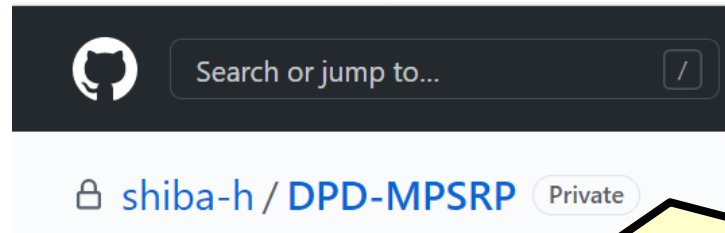


- 効果

- 全体の75%程度のPair計算が、約2割高速化。
 - 約25.5秒→約20.5秒

MP-SRP法のGPUコードの作成

- 芝先生の粒子系超並列GPUコードに、ボンドを追加の方針。



- 改良作業

- ポリマーへの拡張

- ボンドデータの分散での取扱

- DPD法への拡張

- 分散並列下での粒子ペア用の乱数

- MP-SRP法の実装

- 粒子Pair計算を拡張する

- データ記録の工夫

- Multi-trackでの時系列記録
 - Sz圧縮ライブラリ

3次元MDの並列コードをベースに開発

1. 3次元MDのデータレイアウト変更
2. 力計算のCUDA kernel 実装
3. GPU上で近接リスト構築

MP-SRP法のGPUコードの作成

- 粒子ペアで、同一の乱数値の生成方法の検討
 - DPDでは、粒子ペア毎にユニークな必要がある。
 - 領域分割では、工夫が必要。
 - HooMD-blueの実装： cryptographic hash 2つの粒子ID基づく、暗号論的乱数を利用。・・・多分悪くないはず。
 - C.L. Phillips, J.A. Anderson, S.C. Glotzer, Pseudo-random number generation for Brownian dynamics and dissipative particle dynamics simulations on GPU devices, J. Comput. Phys. 230 (2011) 7191–7201.
 - 我々の検討の方向性：
 - MT (19937bit状態空間, 周期 $2^{19937}-1$) : 時間方向
 - » F2-線形疑似乱数生成器として有名。(デファクトSTD)
 - » jump計算で、高速に状態を時間発展できる。
 - TinyMT (127bit状態空間, 周期 $2^{127}-1$) : 粒子番号方向
 - » 非 F2-線形出力関数の採用により BigCrush を通る。
 - » 状態遷移関数(パラメータ)が大量(2.6億個)に公開
 - » <https://github.com/jj1bdx/tinymtdc-longbatch>

最新GPU利用技術の獲得

- Multi-nodes, Multi-GPUs
 - Gromacsのマルチノード利用 ※知見をHPCI課題で活用
 - 名大 V100
 - 東大 A100
- Single-node, Multi-GPUs
 - OpenACCプログラミング
 - 東大 A100
 - TensorFlowのノード内並列学習
 - 東大 A100
 - LAMMPSのKokkos(GPU)活用
 - 阪大 A100 (+東北大金研 V100)

東大（講習会）
[6/22,29] 第3回
GPUミニキャンプ
[6/23,30] 第4回
GPUミニキャンプ