

# 分子動力学計算ソフトウェアMODYLASのメニーコアおよびワイドSIMD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

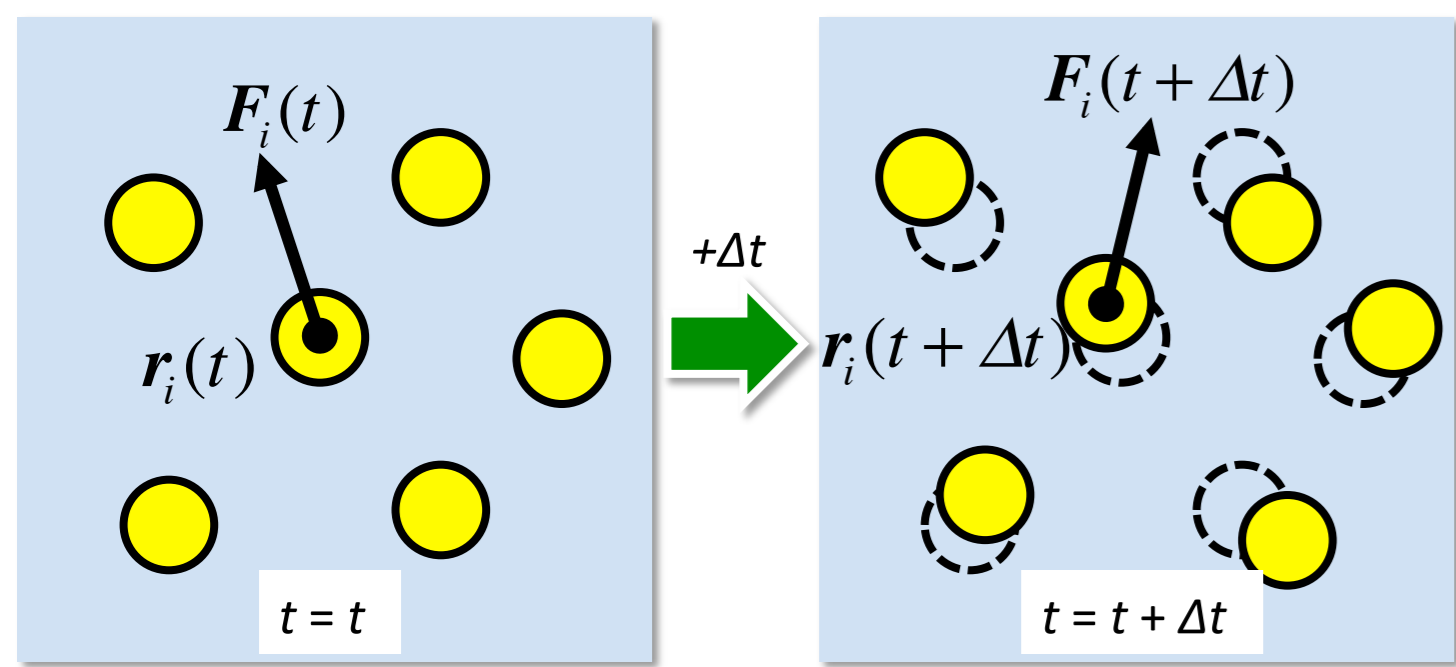
汎用分子動力学計算ソフトウェアMODYLAS<sup>[1]</sup>に対して, 昨年度に引き続き, メニーコア計算機 (FX100 および Xeon-Phi) の性能を發揮させるため以下チューニングを行う。

- ・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。



## 分子動力学(MD)計算



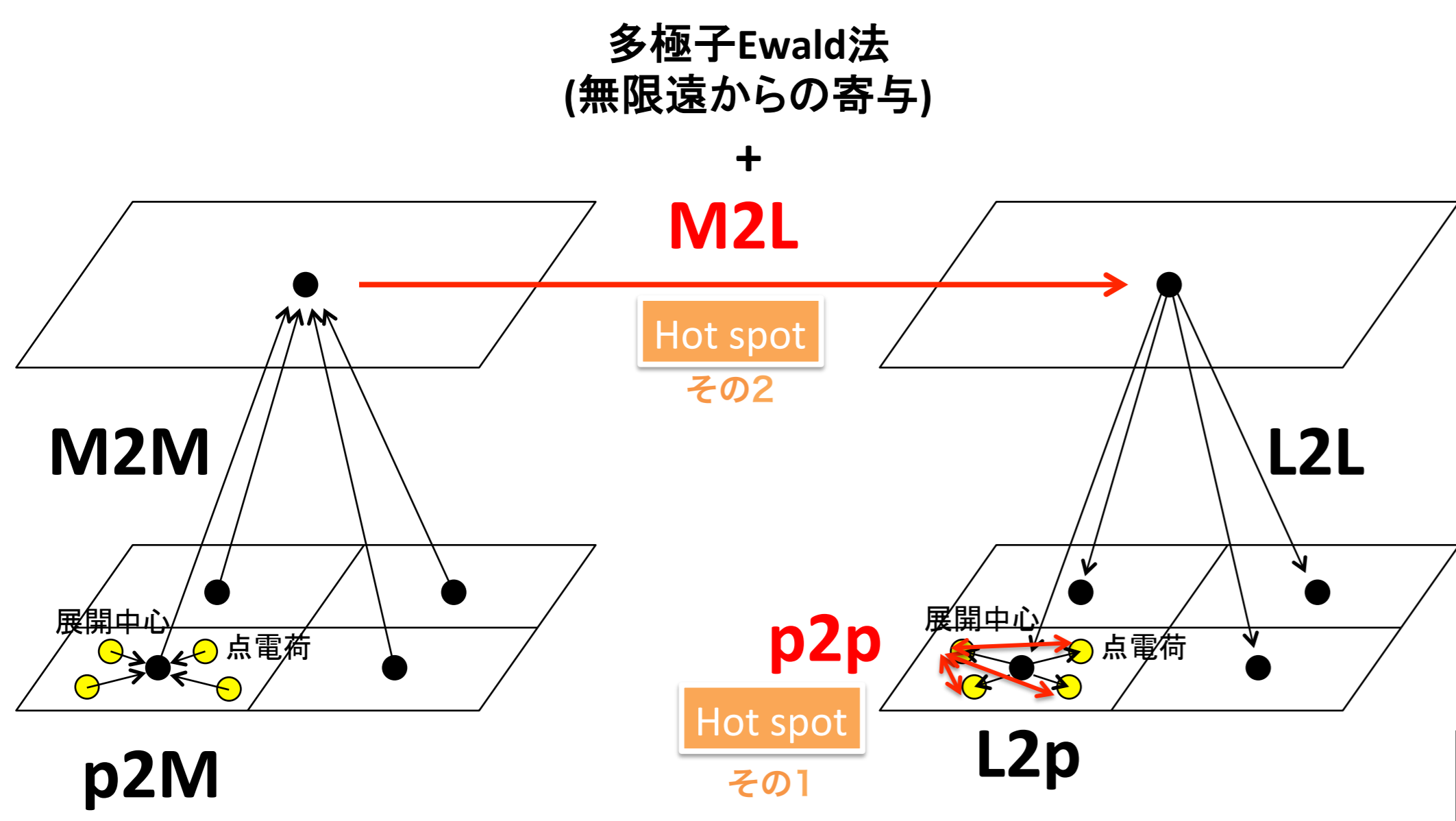
$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \mathbf{F}_i \quad \mathbf{F}_i = -\frac{\partial U_{tot}}{\partial \mathbf{r}_i}$$

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

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

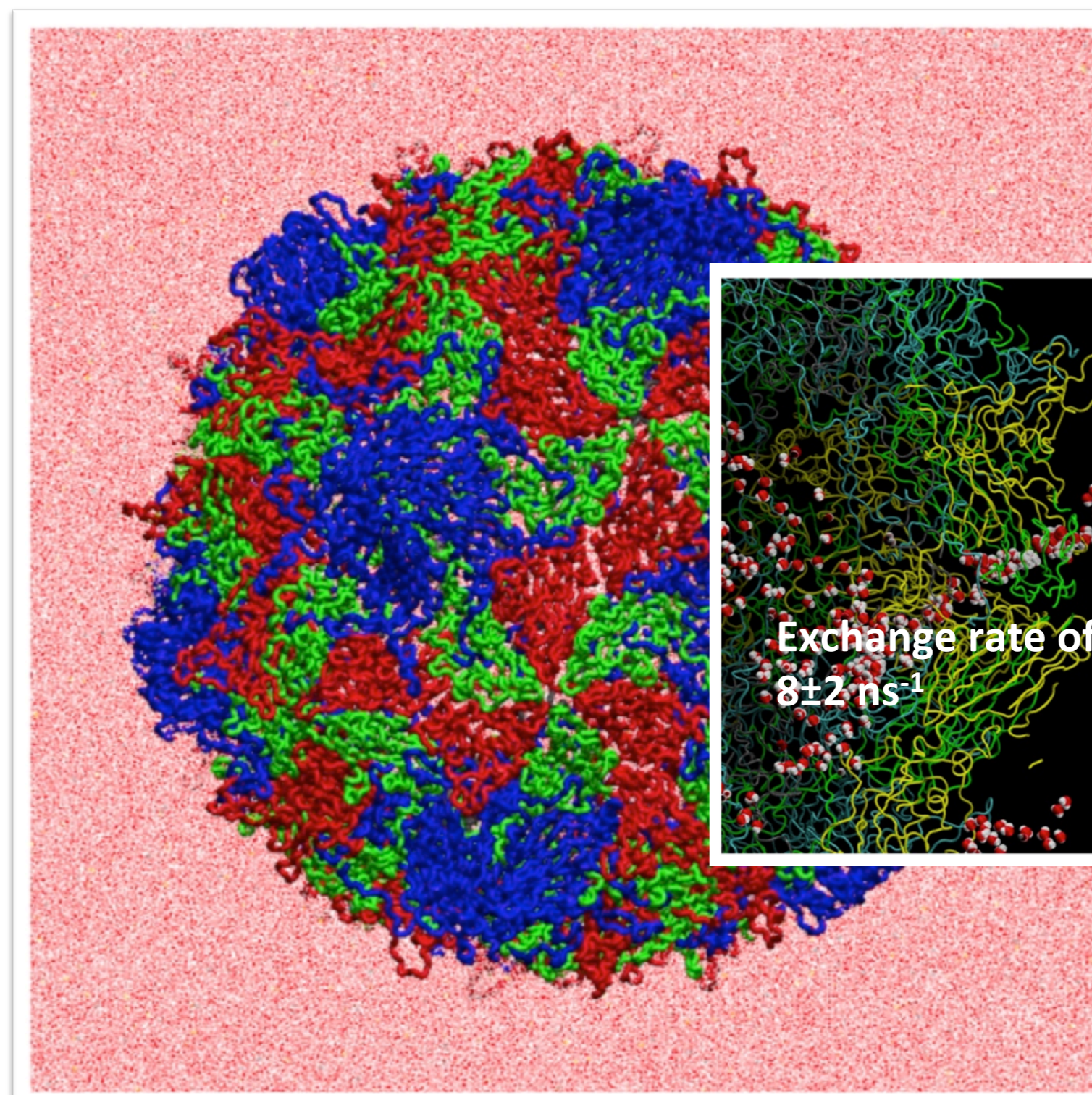
### 高速多重極展開法(FMM)

← 厳密・高速に計算

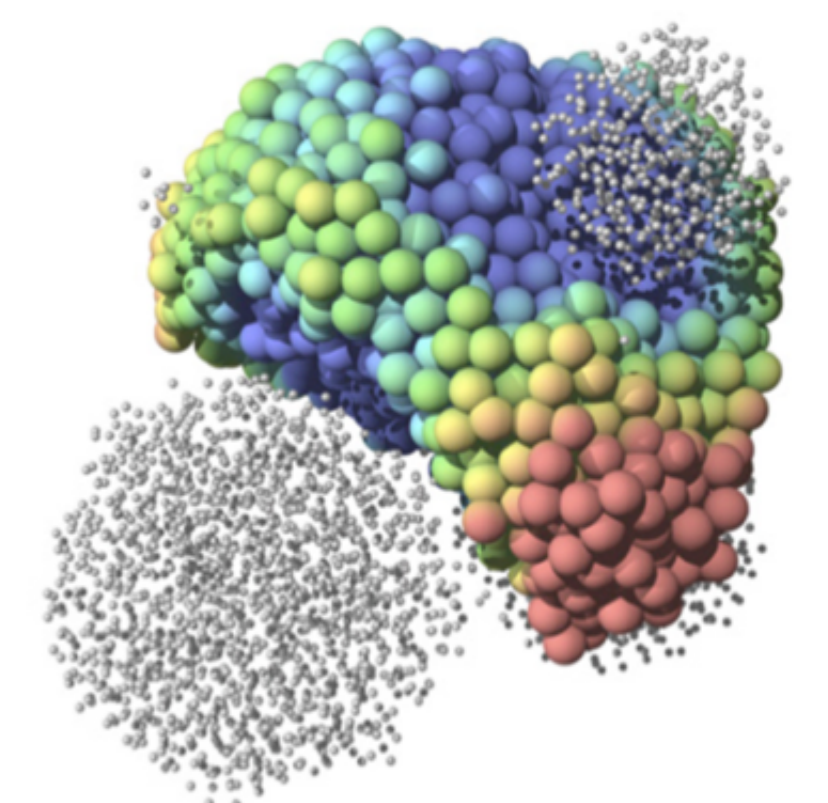


- ・計算量  $O(N)$
- ・全対全通信なし

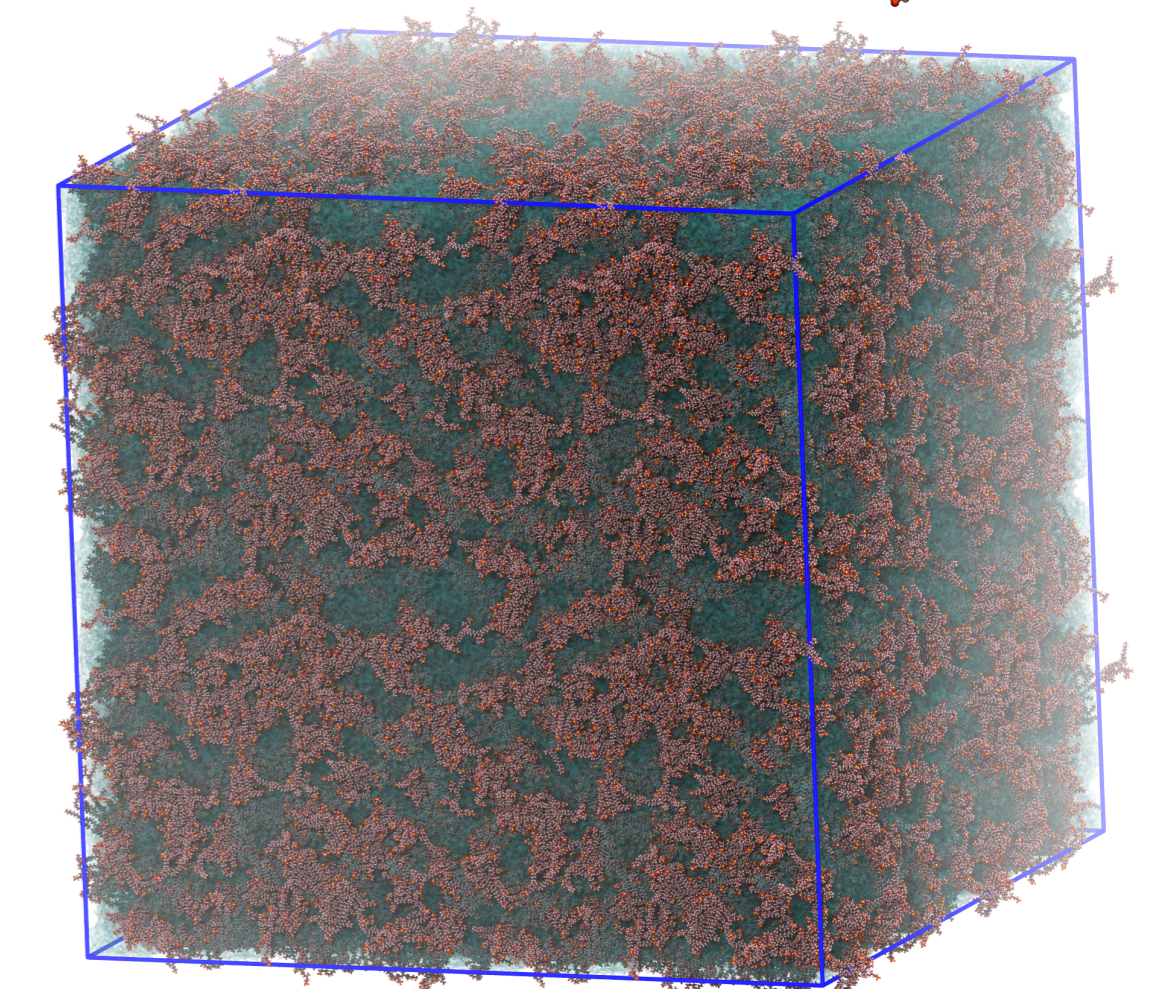
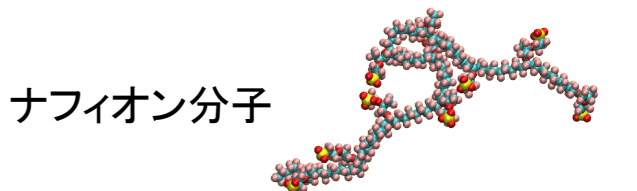
## MD計算研究の対象



「京」コンピューターを使ったポリオウイルスの MD 計算<sup>[2]</sup>. カプシドタンパク質, イオン, 水, 合計650万原子系, 200 ns. J. Chem. Phys., 141, 165101 (2014)<sup>[2]</sup> 情報処理学会誌「情報処理」, 55, 798 (2014)

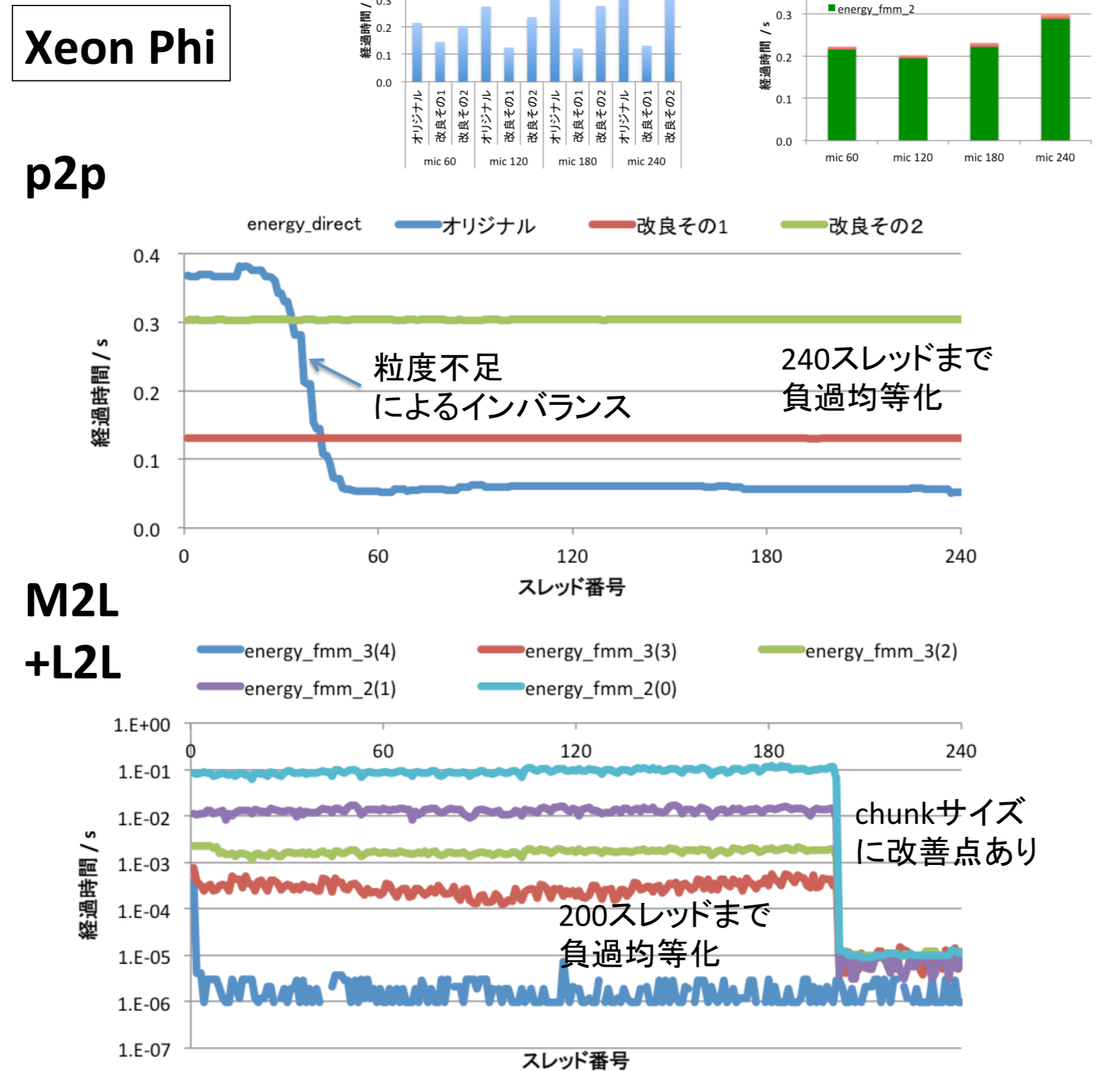
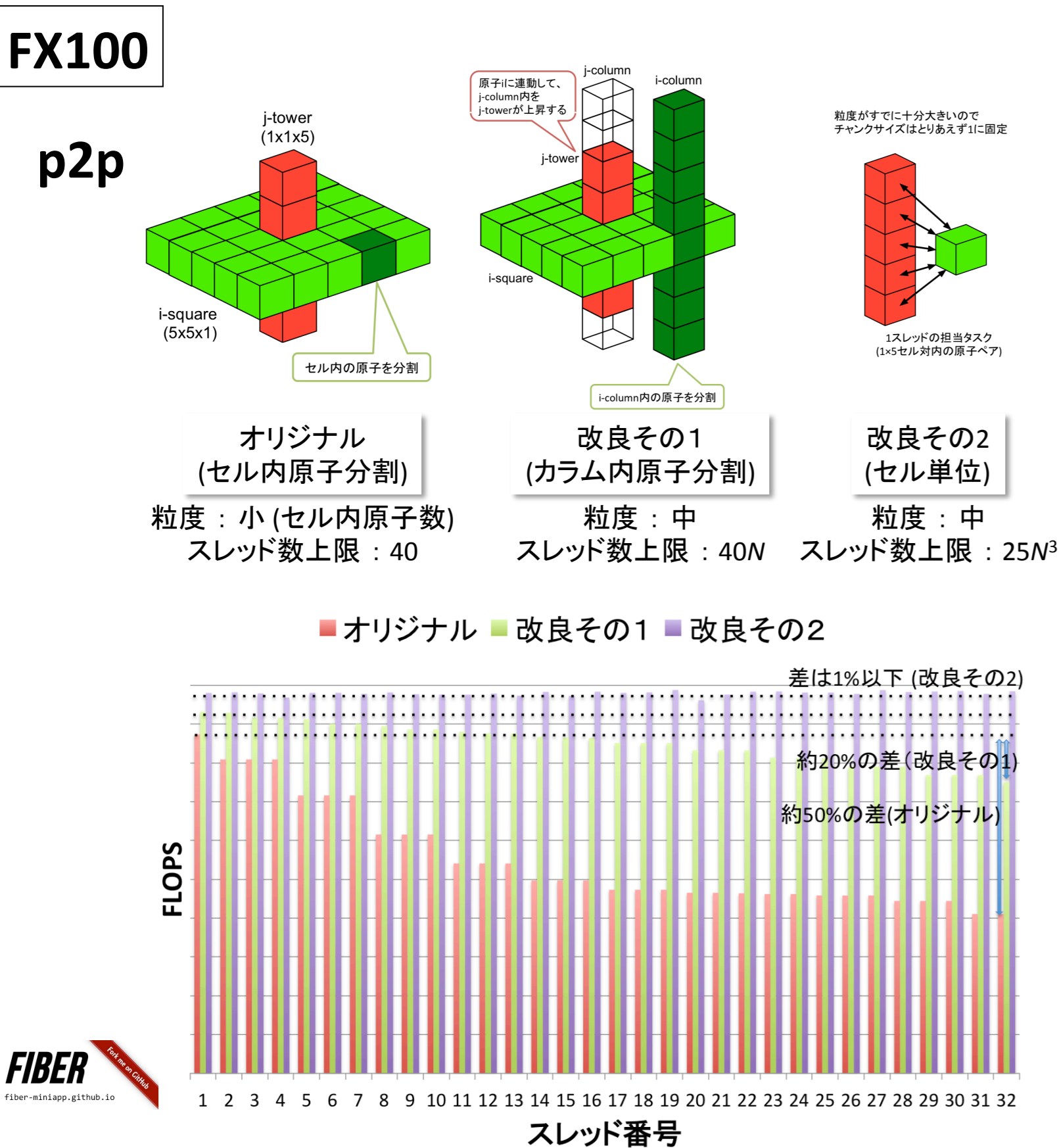


メタンハイドレート融解過程のMD計算<sup>[3]</sup>. 25万原子系, 100 ns. J. Phys. Chem. B, 118, 1900 (2014); 118, 11797 (2014)

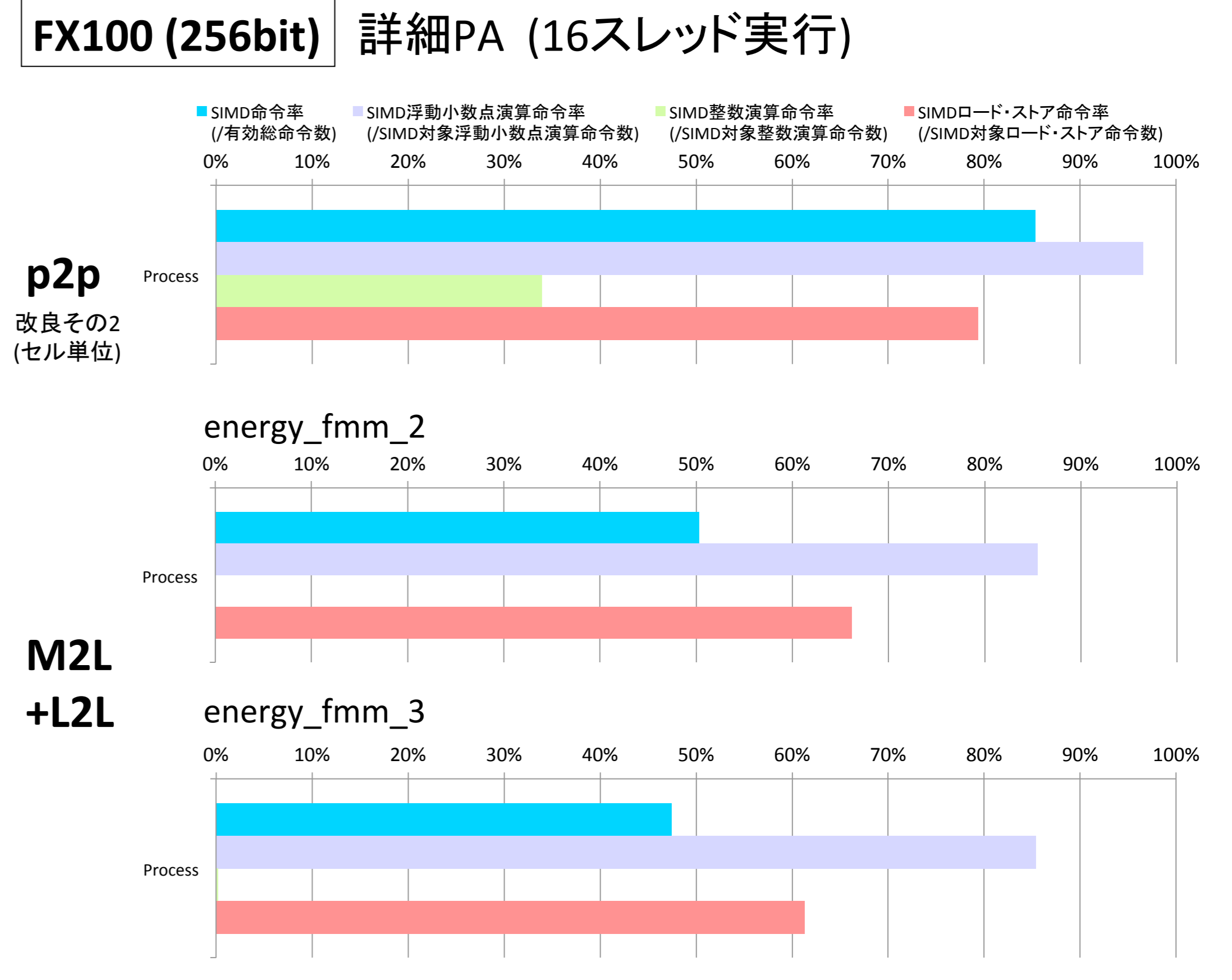


将来の計算対象候補: 燃料電池ナフィオン高分子膜の全原子MD計算

## メニーコア対応並列化



## SIMDの事前評価



## 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
  - 第一期 (4月~6月) SIMD事前評価 FX10 (128bit), FX100 (256bit), Xeon Phi (512bit)
  - 第二期 (7月~9月) コード改良 FX100 (256bit), Xeon Phi (512bit)
  - 第三期 (10~12月) 更なる高度化, および数億原子系での実際のMD計算テスト
  - 第四期 (1~3月) FX100上でのコード最終性能評価
- 3年目 (平成29年度): 大規模Xeon phiクラスター対応コード作成と性能評価 (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), 坂下達哉, 浅野優太, 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
- 東京大学 情報基盤センター 大島聡史 (副代表)
- 理研AICS 鈴木惣一郎



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).