

課題名 (タイトル) :

分子動力学計算プログラム MARBLE のチューニング

利用者氏名 : 池口満徳

所属 : 本所 情報基盤センター

1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

我々のグループでは、グランドチャレンジプログラムにおいて、生体高分子の分子動力学計算プログラム MARBLE の開発を進めており、次世代スーパーコンピュータ「京」において、高並列環境における、高効率な計算を目標としている。そこで、RICC の超並列 PC クラスタ上での演算性能の評価、チューニングを行う。

2. 具体的な利用内容、計算方法

生体高分子用分子動力学計算プログラム MARBLE のコンパイルを行い、短時間で終了するベンチマークテストを行った。

3. 結果

現在、プログラム MARBLE では、「京」での高効率計算を想定し、OpenMP+MPI によるハイブリッド並列化を推し進めている。RICC では 1 ノードあたり、8 core をスレッド並列で利用できるので、ハイブリッド並列化のテストには適当である。

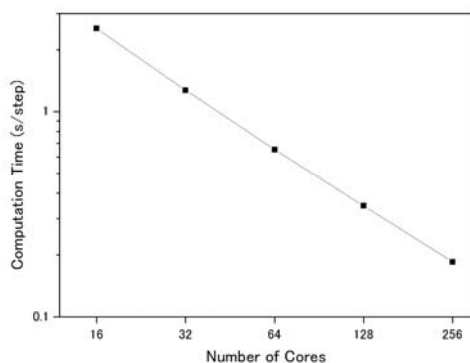


図 1. 使用コア数に対する計算時間

図 1 のグラフは、166 万原子系での生体高分子の分子動力学シミュレーションの計算結果である。この計算では、8 core を OpenMP でスレッド並列

して使用している。簡易利用の上限の 256 コアまで順調に計算スピードが伸びていることがわかる。

4. まとめ

簡易利用であるので、さほど大規模な計算はできなかったが、富士通コンパイラでのコンパイルが問題ない、OpenMP でも問題なくコンパイル実行ができるなど、重要な知見を得ることができた。

5. 今後の計画・展望

現在、簡易利用の 256 core 並列にとどまっているので、RICC の最大での 8192 core 並列までのスケールリングを目指す。(別なマシンでは 3000 超 core までの並列性能は確認している。)

また、今年は、計算のプロファイリングの取り方の講習会が、グランドチャレンジの研究会と重なっており、出席することができなかったが、その情報を得て、関数ごとの経過時間などの情報を取得し、プログラムの最適化を行う。

今回は、近距離力のみでの計算であったが、現在長距離力の計算も導入するようにコーディング中である。それが完成したら、RICC での性能評価を行いたい。

6. RICC の継続利用を希望の場合は、これまで利用した状況 (どの程度研究が進んだか、研究においてどこまで計算出来て、何が出来ていないか) や、継続して利用する際に行う具体的な内容

今後の展望のところにも記述したが、来年度の作業としては、(1) 遠距離力の導入、(2) 8192 core までの並列性能評価、(3) プロファイリングによるボトルネック同定とその部位の最適化を考えている。まずは、遠距離力の導入を行う。すでに前のバージョンでは、コーディング済みなので、それを今回のバージョンに合わせた形で導

平成 22 年度 RICC 利用報告書

入する。RICC では、そのバージョンができたところで、性能評価を行う。この際には、まずは、簡易利用の 256 コアで構わないと考えている。そのスケーリングが得られたところで、8192 コアまでのスケーリングを目指す。その際には、簡易利用から一般利用に変更しないといけないであろう。さらに計算時間のプロファイルをとり、並列性能の向上を目指す。

7. 一般利用で演算時間を使い切れなかった理由

該当なし

8. 利用研究成果が無かった場合の理由

簡易利用にて、プログラムのコンパイルテスト、および、短時間・小規模のベンチマークテスト実行を行っただけであるので、利用研究成果を報告するまでに至っていない。