

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

理研での所属研究室名 : 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、GrandChallenge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 クラスター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 は「京」上での計算を想定したプログラム開発を行っている。以前のバージョンでは入力ファイルをそれぞれのプロセスから独立に読み込むようになっていた。しかし、「京」にて、数千コア以上を用いた高並列での計算を実行する際には、すべてのプロセスからのファイルを同時に読み込むことがパフォーマンスの低下の要因となっていた。この問題を解決するために、新しいバージョンでは入力データの読み込みをマスタープロセスからのみにし、マスタープロセスから各プロセスへ入力データを MPI 通信する方法を導入した。今回は、この方法を導入したプログラムが正常に実行されるかのチェックについて、ローカルファイル方式をとっている RICC 上で行った。

以下に、計算実行の際のジョブ投入に用いたスクリプトのなかで、各ノードへのファイルの転送を制御する記述 (FLT) の個所を示す

#—— FTL file information ——#

#BEFORE:MASTER: \$MJS_CWD/bench.in

#BEFORE:MASTER: \$MJS_CWD/5dfr-vel.crd

#BEFORE:MASTER: \$MJS_CWD/5dfr-molx.mdat

#AFTER:MASTER: \$MJS_CWD/bench.out

#BEFORE:*: \$MJS_CWD/marble.0.5.3-RICC

このスクリプトでは、入力ファイル (bench.in, 5dfr-vel.crd, 5dfr-molx.mdat) をマスターノードのみに転送し (#BEFORE:MASTER:と記述)、プログラムファイルを各ノードに転送している (#BEFORE:*ö記述)。このスクリプトを用いて、異なるコア数での計算 (16, 32, 64, 128 コア) を行い、計算が正常に実行されることを確認することができた。

4. まとめ

今回、RICC による計算を通して、MARBLE の新ファイル入力方式が正常に動作することが確認できた。

5. 今後の計画・展望

京にて、高効率の計算可能になるように、パフォーマンスチューニングを進めていく。

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
該当なし

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ためであるので、利用研究成果を報告するまでに至っていない