

課題名 (タイトル) :

全電子計算に基づくタンパク質反応シミュレーションの研究

利用者氏名 : ○木寺 詔紀\*, 佐藤 俊\*, 平野 敏行\*\*, 恒川 直樹\*\*, 上村 典子\*\*, 松田 潤一\*\*  
理研での所属研究室名 :

\*社会知創成事業 次世代計算科学研究開発プログラム

次世代生命体統合シミュレーション研究推進グループ 分子スケール研究開発チーム

\*\*東京大学生産技術研究所

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

本課題は「次世代生命体統合シミュレーションソフトウェアの研究開発」プロジェクト、分子スケール研究開発チームに参画中の、全電子計算に基づくタンパク質反応シミュレーションプログラム ProteinDF のチューニングのために実施された研究である。次世代スーパーコンピュータは 8 万ノード・64 万コア以上の計算ノードから構成されており、高度に並列化されたプログラムが必要とされる。RICC は国内屈指の約 8000 並列のプログラムが実行可能な環境である。RICC を用いて ProteinDF が次世代スーパーコンピュータ上で効率的に並列計算できるように開発・テストすることを目的とした。

2. 具体的な利用内容、計算方法

ProteinDF は大規模分子の全電子計算を限られたメモリ上で遂行するために、全ノードから参照できる共有ファイルシステムを有効利用するように構築されていた。同時に計算する大規模行列を最低限に絞り、その時点で必要ではない行列はディスク領域に退避させる方法を採用している。1000 残基クラスのタンパク質全電子計算の場合、行列のサイズは 80GB にも及ぶ。ディスクを用いる方法は非効率的であるが、計算ノードの搭載メモリ量が限られている現在において、大規模分子の量子化学計算を行う次善の策といえる。ディスク領域に退避させるもう一つのメリットとして、リスタートが可能である点も挙げられる。実際これにより、我々は世界最大の全電子量子化学計算を達成してきた。

一方、次世代スーパーコンピュータならびに RICC はノード毎にストレージが接続されており、ノード間のファイルの共有はできない。ノード別

のストレージは、共有ファイルシステムに比べてプログラミングが複雑になるが、ノード上のプロセスがディスク I/O 帯域を占有することができるため、いつでも良好なパフォーマンスを発揮するメリットがある。本研究では、ノード別ストレージを利用したファイルアクセス方法を開発し、ProteinDF に実装した。RICC を利用することによって、次世代スーパーコンピュータにおける ProteinDF の動作確認を前もって行うことができた。

また、次世代スーパーコンピュータでの 64 万並列を目標とした場合、MPI/OpenMP のハイブリッド並列は必須である。各ノードに分散された行列データを OpenMP スレッドと MPI を利用して非同期通信しつつ、各ノードの積分計算は OpenMP によって並列計算するアルゴリズムを実装・テストした。単体のパフォーマンス向上のため、ボトルネックとなる分子積分・数値積分部分のチューニングも行った。

3. 結果

巨大大域行列を分散保持し、それを各 MPI プロセスが参照・計算・格納するアプローチを ProteinDF に組み込んだ。数千~数十万並列計算に耐えるためには、プロセスの待ち状態の時間を極力なくす必要がある。本年度は、昨年度に開発したバックグラウンド通信方式に加え、新たな方式を導入した。分子積分においては、すでにブロックサイクリックに分散保持したローカル行列に対して各プロセスが並行して分子積分を計算するように実装した。数値積分においては、まず各プロセスにおいてローカルに保有している密度行列を元に全グリッドの電子密度ならびに密度勾配を求め、全通信により集計した後、Kohn-Sham 行列における交換相関項をローカル

に算出するようにした。これにより、ロードバランスが保つことは難しいが、通信待ちを減らして分子軌道計算を行うことに成功した。

本研究で開発・チューニングした ProteinDF を実際に「京」上でビルド・動作確認をすることができた。ただし、単体性能が芳しくないために大規模計算に至っていない。現在、C++コンパイラの最適化が適切に行われるように改良を行なっているところである。

#### 4. まとめ

次世代スーパーコンピュータ上で効率良く ProteinDF を実行できるようにするため、巨大行列分散保持・計算方式の改良とハイブリッド並列の性能向上を行っている。巨大行列を分散保持した場合の分子積分・数値積分ルーチンを実装し、現在最適化中である。

#### 5. 今後の計画・展望

ハードウェア構成や問題規模により、最適な MPI 並列数・OpenMP スレッド数が異なるため、現在その最適条件を探索している。ストロングスケール、ウィークスケールテストを実施し、ProteinDF プログラムの改善を行う。これにより、次世代スーパーコンピュータに適した ProteinDF が完成し、前人未踏の大規模タンパク質量子化学計算が達成したいと考えている。

#### 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

RICC では次世代スーパーコンピュータを想定した ProteinDF の実行・利用が可能である。いくつか実装済みの超並列計算方式の調整や、巨大行列の分散ファイル I/O によるローカルファイルシステムへの利用方法も含め、効率的な利用方法を探っている。8000 コアを使用した並列計算を実施し、スケーラビリティの結果を外挿することにより、次世代スーパーコンピュータ「京」でもパフォーマンスが低下しないようにコーディングし、実行様式を調査する必要がある。富士通製コンパイラの特徴を活かした最適化も行う必要がある。上記の理由により、来年度の RICC の継続利用を求める。

7. 一般利用で演算時間を使い切れなかった理由  
本研究は本項目に該当しない。

#### 8. 利用研究成果が無かった場合の理由

ProteinDF において、大規模行列の分散保持による分子積分・交換関連計算の並列化の調整、ならびに分散ファイル I/O 機能の調整を行い、RICC を用いた実証計算ならびに研究成果の発表には至らなかった。