

課題名 (タイトル) :

生体高分子生化学的機能解析のための分子計算技術の開発

利用者氏名 :

○木寺 詔紀*、中村 春木、中田 一人

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

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

QM/MD 連成計算プログラム Platypus-QM/MM および、その中の量子化学計算コンポーネント Platypus-QM における高並列化と高機能化のための改良を進めており、本課題では、このソフトウェアの超並列クラスタにおける並列性能と演算性能を測定・解析し、さらなる高速化・高度化の指針とすることを目的としている。

2. 具体的な利用内容、計算方法

コストの大部分を占める積分計算のうち、エネルギー計算での 1 電子積分と 2 電子積分、力の計算での 1 電子積分の一次微分について、ハイブリッド並列化および SIMD 化を実施した。この有効性を確かめるため、上記の高度化した積分を組み込んだ Platypus-QM の RDFT エネルギー計算における各積分のハイブリッド並列性能、および Platypus-QM/MM の String 法におけるウィーク・スケール性能と演算性能を計測した。

3. 結果

Platypus-QM の RDFT エネルギー計算における並列化率は、高度化前 99.033% に対して、高度化後 99.692% と向上した。測定データは、光合成活性中心バクテリオクロフィル a の 2 量体 (原子数 280、点電荷数 30904)、基底関数系 6-31G** (原子軌道数 2728) を用い、並列化率は、8 プロセス×1 スレッドと 1024 プロセス×8 スレッドから算出した。

また、スレッド並列性能を、表 1 に示した。ここでは、8 プロセス×1 スレッドを基準に speedup を算出した。speedup がフラット MPI では 8 倍弱であったのに対して、OpenMP スレッド並列では、8 倍を超える値が得られ、OpenMP 化が有効であることが分った。

表 1 スレッド並列 Speedup

MPI プロセス数	8	8	64
OpenMP スレッド数	1	8	1
コア数	8	64	64
1 電子積分	1	8.68	7.82
2 電子積分 (注)	1	8.60	7.61
1 電子積分一次微分 (注)	1	8.67	7.92

(注: Fock 行列や力の項への足し込みを含む)

次に、Platypus-QM/MM における String 法のウィーク・スケール性能の測定結果を示す。このプログラムでは、最初の大規模実行であり、全体傾向をつかむことを目的として、今回はフラット MPI で実行した。1 構造当たりの MPI プロセス数を 128 に固定し、構造数の増加に応じて 128, 256, 512, 1024, 2048, 4096, 8192 コアでの経過時間を計測した。この結果を図 1 に示した。ここでの経過時間は、入出力処理を含むジョブ全体の時間であり、MD のステップ数を 30 とした。測定データは、QM 原子数 22、MM 原子数 717、基底関数系 cc-pVDZ (原子軌道数 210) である。また、実行効率はプロファイラの情報から、図 2 のような結果が得られた。これらの結果から、実行効率は約 8% であったものが、コア数の増加にともない経過時間が増加し、その影響により実行効率が徐々に低下していることが分った。この原因を調査するため、入出力処理とカーネル部分を区別した詳細な時間計測を行う必要がある。

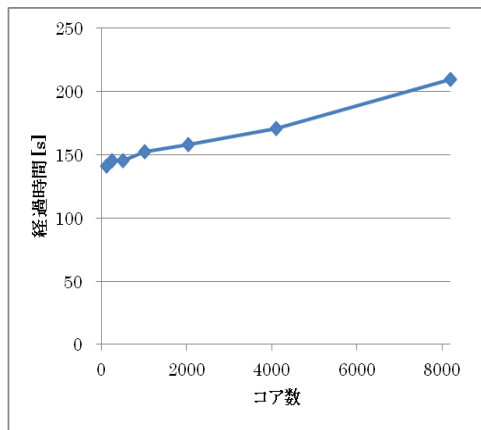


図 1 Platypus-QM/MM の経過時間

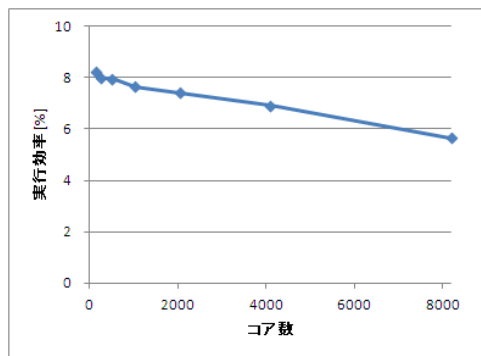


図 2 Platypus-QM/MM の実行効率

アの高機能化および高度化であり、研究成果としてのシミュレーション計算ではない。しかしながら、開発したソフトウェアが高い並列性能と演算性能を持っていることが検証でき、これが成果達成であると考えられる。

4. まとめ

各種積分の OpenMP 化がフラット MPI に比べて有効であることが分り、Platypus-QM の RDFT エネルギー計算では並列化率の向上が見られた。また、Platypus-QM/MM の String 法では、演算性能が約 8% から徐々に低下しており、ウィーク・スケーリング性能のさらなる高度化が必要であることが分った。

5. 今後の計画・展望

さらなる性能向上のため、高コスト積分計算のうちに残る 2 電子積分の一次微分について、ハイブリッド並列化、SIMD 化を実施する。他の部分についても、引き続き高度化を進める。

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を引き続き、ハイブリッド並列化、SIMD 化等を進め、性能測定と分析を行う。

7. 利用研究成果が無かった場合の理由

現時点での目的は、高並列性能をもつソフトウェ