

## 汎用分子動力学計算ソフト MODYLAS 開発の最近の進展

名大院工 安藤嘉倫

分子科学分野での幅広い計算対象を京コンピューター上で高速かつ高効率に計算できるよう、MODYLAS [1,2] 開発を進めてきた。取扱う計算系には次のような特徴がある。

- ・化学組成および構造の両面での多様性
- ・分子間の静電相互作用が支配的である
- ・従来分子動力学計算で対象としてきた系にくらべ大きな空間スケール
- ・系に長時間スケールのダイナミクスが含まれる

化学組成の多様性に対応するため CHARMM (with CMAP), AMBER/OPLS といった代表的な汎用ポテンシャルモデルを使用可能としている。これら汎用ポテンシャルは分子内相互作用、短距離 Lennard-Jones 相互作用、長距離静電相互作用から構成される。特に静電相互作用は現象の再現性を決める重要な因子のため厳密な計算が必要であり、標準的な PME (Particle Mesh Ewald) 法に加え高速多重極展開法 (FMM) を実装している。FMM を実装した理由は、演算量が  $O(N)$  であることに加え高並列時に並列性能を低下させる全体通信を含まず、数千ノード規模以上においても良好な並列性能が維持されると期待されたためである。また空間スケールの大きな系および長時間スケールのダイナミクスを扱うには 1 step あたりの計算時間を削減する必要がある。そのため通信の前後処理が極力発生しないデータ構造 (メタデータ構造) を独自に考案し、かつ 3D トーラスネットワークに最適化した通信方式を採用することで Tofu の性能を最大限に引き出したレーテンシー律速の通信コードを開発した。メタデータ法に従った通信の結果、座標および多極子データはメモリ上に連続に装填され、低キャッシュミス率の演算をも同時に実現される。MODYLAS は京コンピューターをフルノード規模使用した場合であっても高並列性能および高演算性能を維持する汎用分子動力学計算ソフトウェアである。

最近の進展として、基本セル形状をこれまで立方体に限定していたところ、直方体形状の基本セルも計算可能とした。一方向に長い基本セルは界面を扱った分子動力学計算においてしばしば用いられるため、この拡張により MODYLAS のより広い計算対象への応用が期待される。また併せて使用可能プロセス数についてこれまで  $2^n$  制限 (京で最大 65,536 ノード) があったところ、 $2^n \times 3^m$  のプロセス数も選択可能とした (京で最大 82,944 ノード)。京の全 82,944 ノードを使ったテスト計算においてプログラムの正常動作を確認した。その際には、通信最適化のため Tofu の物理ノード形状を rank-map-hostfile により通常の  $48 \times 54 \times 32$  から  $48 \times 48 \times 36$  へと変更した上で、論理プロセス形状を同じく  $48 \times 48 \times 36$  ( $2^4 3^1 \times 2^4 3^1 \times 2^2 3^2$ ) と指定して計算を実行した。今回の拡張に際して上述したメタデータ構造、コピーレスな通信ルーチン、および低キャッシュミス率の演算はそのまま維持されており、細部の最適化および性能評価を進めている。

文献

[1] Y. Andoh et al., *J. Chem. Theory Comput.*, **9**, 3201 (2013).

[2] <http://www.modylas.org/>