

"計算科学"と"計算機科学"の連携による 統計力学理論の超高並列化への挑戦

吉田 紀生

自然科学研究機構分子科学研究所

[アブストラクト]

次世代スパコンの稼働が近づき、これまでにない“現実の系”の計算ができる時代が到来しつつある。次世代ナノ統合拠点では、次世代スパコンの性能を最大限に引き出し、これらの“現実の系”に応用できる、計算科学理論・方法論の確立と、それらに基づくソフトウェアの開発を行ってきた。

とくに、3つのグランドチャレンジ課題(次世代ナノ情報機能・材料、次世代ナノ生体物質、次世代エネルギー)を達成するべく、6つの中核アプリケーション(実空間第一原理ナノ物質シミュレーター、動的密度行列繰り込み群法、大規模並列量子モンテカルロ法、高並列汎用分子動力学シミュレーションソフト、RISM/3D-RISM、高速量子化学計算ソフト)を設定し、理論・計算科学と計算機科学の連携のもと、次世代スパコンにおける高並列化、高効率化を行ってきた。

本講演では、中核アプリケーションの一つである RISM/3D-RISM の開発を例に、理論・計算科学と計算機科学の連携によるアプリケーションの高度化の現状と、いくつかの応用例を紹介する。

[キーワード]

スーパーコンピューター、ナノサイエンス、RISM 理論、3D-FFT

[講演要旨]

最先端・高性能汎用スーパーコンピューターの開発利用プロジェクトは世界最速級のスーパーコンピューターの開発と、そのコンピューターを有効活用しこれまでにないサイエンスを構築できうる計算科学的方法論、ソフトウェアの開発を行うプロジェクトである。この次世代スーパーコンピューターは最近「京」と名付けられたが、その名の通り「京速」を目指して設計開発が行われている。「京」は8万以上の計算ノード(CPU)から成り、各 CPU が8コアを持つため、トータルでは64万コアを超える超高並列機となっている。[1] 「京」での運用を目指して、「次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発拠点」(以下、ナノ統合拠点)では、6つの中核アプリケーション、および30以上の付加機能ソフトウェアの開発を行っている。[2] これらのアプリケーションを用いて、3つのグランドチャレンジ課題を達成するのがナノ統合拠点の目標となっている。とくに、6つの中核アプリケーションについては、従来のスーパーコンピューターでは成し得なかった計算を、「京」の性能を活かして成し遂げることが期待されている。

我々は6つの中核アプリケーションのうちの一つ、3D-RISM の開発を行っている。3D-RISM 理論は統計力学に基づいた分子性液体の理論であり、液体の構造や物性を記述することができる。[3] 近年、本理論を用いて溶媒和した生体高分子(タンパク質、DNA)の構造・溶媒和・分子認識に関する研究が活発に行われている。[4] この理論を基に種々の計算科学的手法(量子化学計算、シミュレーション等)を組み合わせることで、構造がわかっていないタンパク質の変異体による分子認識機構や、酵素の反応性を解析することができる。我々はこの方法を基に、生体高分子の反応(とくに酵素反応)を統合的に解析できる計算科学的方法論

の確立することをめざしている。この方法を用いて、グランドチャレンジ課題「次世代エネルギー」の中の課題の一つである「草木系バイオマスのための高効率酵素反応設計」に挑戦したいと考えている。

3D-RISM のソフトウェアはこれまでワークステーションや従来型スパコン等で数百コア向けの並列化が行われており、このソフトウェアでタンパク質等を解析してきた。これを次世代スーパーコンピュータ向けに改良することで、これまでよりも高精度に、より多くの計算が可能になる。しかし、3D-RISM の超高並列化は容易ではない。3D-RISM では三次元高速フーリエ変換(3D-FFT)を多用するため、その並列化効率がネックになる。3D-RISM で扱うグリッド数は 2048^3 程度であり、従来の 3D-FFT の並列法では 2048 並列までが限界となるからである。我々は筑波大学研究グループと共同で Volumetric 並列三次元 FFT を 3D-RISM へ組み込むことで超高並列化への道筋をつけることに成功した。[5] Volumetric 並列三次元 FFT は筑波大学のグループで開発された 3D-FFT の超高並列向けのアルゴリズムであり、これまでは一次元方向だけに行われていた並列化を二次元にすることで、並列数を増やし、かつ全対全通信の通信量を減らすことができる。

この成果は計算科学者と計算機科学者の連携によってなされたものであり、これ自体が本プロジェクトの一つの大きな成果であると考えている。再来年度に予定されている次世代スーパーコンピュータ実機の本格稼働に向け、さらなる連携強化を行い、3D-RISM 理論の超高並列化とグランドチャレンジ課題を遂行していく予定である。

[参考文献]

- (1) 次世代スーパーコンピュータの開発・整備 ウェブサイト http://www.nsc.riken.jp/index_j.html
- (2) 最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用プロジェクト 次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発 ウェブサイト <http://nanogc.ims.ac.jp/nanogc/index.html>
- (3) Hirata, F. ed.: "Molecular Theory of Solvation" Kluwer Academic Publishers (2003)
- (4) Yoshida, N.; Imai, T.; Phongphanphanee, S.; Kovalenko, A.; Hirata, F. " Molecular Recognition in Biomolecules Studied by Statistical Mechanical Integral-Equation Theory of Liquids", J. Phys. Chem. B 2009, 113, 873-886.
- (5) 多田野寛人、高橋大介、佐藤三久、吉田紀生、丸山豊、平田文男, "超並列クラスタにおける 3D-RISM への Volumetric 並列三次元 FFT の適用と性能評価", 情報処理学会研究報告, 1234-1239, (2009)