

分子シミュレーションの並列計算方式

東京大学大学院農学生命科学研究科 清水 謙多郎

コンピュータの高速化により、分子シミュレーションによる生体分子の構造解析は、立体構造に基づいたタンパク質の設計、タンパク質のフォールディングの分子機構の解明のような分子生物学の主要な問題において、非常に重要な役割を果たすものと期待されている。しかしながら、生体分子の構造解析は、対象の巨大さ、複雑性のため、現実に近い高精度の解を得ることは困難となっている。本研究では、大規模並列処理により、膨大な計算量を要する分子シミュレーション計算を高速化・精密化するための手法およびそれを実現するシステムを開発する。

本発表では、並列計算を基本ソフトウェアのレベルから支援するためシステム Parsley の開発と、その上に実現した分子シミュレーションの並列プログラムを開発について報告する。Parsley では、アプリケーションプログラムは並列処理可能な部分問題（サブタスクと呼ぶ）に分割され、それらを単位としてプロセッサが割り当てられ実行される。サブタスク間には、実行の先行制約が依存関係として定義され、それとともにサブタスクグラフが形成される。システムはそのサブタスクの内容に従ってプロセッサの割り当て（スケジューリング）を行う。サブタスクの定義は、物理的なハードウェア構成とは独立であり、また、サブタスク間の通信も実行時にプロセッサ間の通信（MPI の通信命令）に変換される。このように、基盤となるハードウェア環境およびアプリケーションに適応した並列化を実現することができる。

Parsley におけるサブタスクの実行は、マスタ/スレーブ方式に基づき、マスタがサブタスクのプールを管理しスケジューリングを行い、スレーブがマスタからの依頼を受けてサブタスクを実行する。この場合、スレーブはサブタスクの実行が終了すると、終了したことを伝えるメッセージだけをマスタに返し、スレーブは実行結果を一時的に保存するとともに、次のサブタスクの実行を開始する。他のプロセッサで後続サブタスクの実行が開始されたとき、そのサブタスクに直接実行結果を送信する。

図1は、分子動力学シミュレーション（MD）を Parsley 上に実現した結果を示したものである。BPTI + 水系（原子数 16735）に対し、日立 SR2201（プロセッサ数 125 台）上で、Parsley 上の MD（Parsley MD）が、従来の空間分割法の MD（SD MD）に比べて 3.49 倍の性能向上を達成した。並列計算に際しては、原子を空間分割の手法によりグループ化して、グループ内の原子に関する計算（座標の更新、力の計算など）をサブタスクとして定義している。従来の空間分割法などの並列化と異なり、タイムステップごとに同期をとる必要がなく、例えば、座標の更新（力の計算）を行うのに、必要な部分の力の計算（座標の更新）が終れば、すぐに計算が開始できる、というように、サブタスク間の依存関係に従い、データフロー的に計算が実行される。図2に、空間分割法と比較した、実行のようすを示す（四角は計算処理の内訳を表す）。

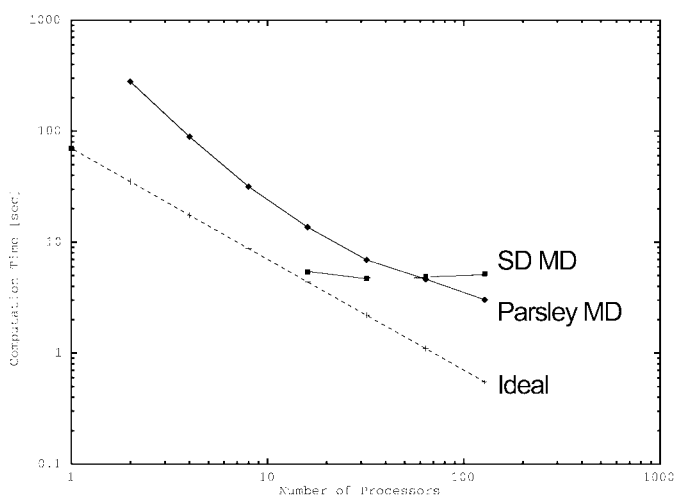


図1 並列化効率

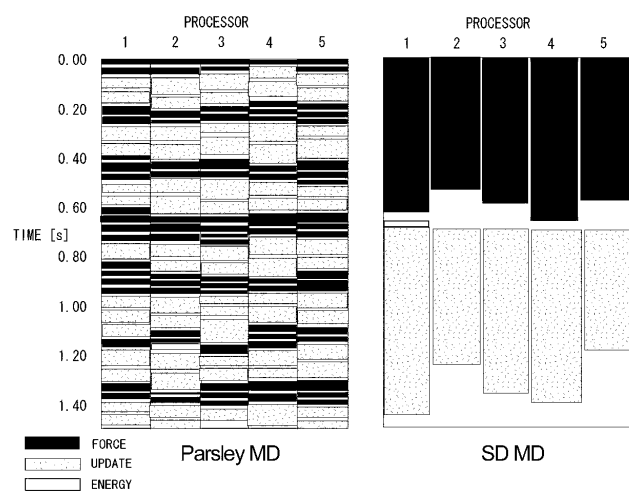


図2 プロセッサの利用

Parsley に対しては、さらに高度な資源管理機能を持たせる研究を進めており、例えば、同じ操作を繰り返し実行する性質をもったプログラムにおいて、サブタスクグラフの繰返し構造を利用し、サブタスク実行時間および通信時間の計測結果を用いて、実行時におけるスケジューリング方針の自動的な改善を行う機構を実現している。サブタスク実行時間の予測値として実際に計測した値を用いて静的スケジューリングを行った結果を、動的スケジューリングを行った結果と比較したところ、プロセッサ16台で9.6%の性能向上を達成した。今後、通信コストを十分に考慮したスケジューリング方針を実現することにより、さらなる性能改善が実現できるものと期待している。

Parsley は、C 言語で記述され、MPI 上に実装されているため、移植性は高い。日立 SR2201 のほか、Sun Ultra Enterprise 10000、NEC Genju-3、Compaq DS20 クラスタ、LAN で接続された UNIX ワークステーション上で稼働している。Parsley は、基本ソフトウェアとして、MD 以外のアプリケーションにも適用可能であり、現在、静電相互作用の計算に有用な FMM (Fast Multipole Method) を Parsley 上で実現している。また、MD と FMM のように、サブタスク実行時間の異なる、比較的独立したプログラムを組み合わせて実行することにより、さらに Parsley の効果が増大するものと考えられる。現在、既存の MPI プログラムから Parsley プログラムへの自動的な変換についても作業を進めている。

本研究では、また、サブタスクの依存関係が既知の問題に対し、サブタスクの静的スケジューリング方針を、遺伝的アルゴリズムを用いて最適化する試みを行っている。とくに、通信コストを削減するため、サブタスクの動的な結合を可能にするようなサブタスク構造を実現し、遺伝的アルゴリズムで、サブタスクの結合をも考慮した最適なプロセッサ割当て方針を探索する。これを、基準振動モード解析やエネルギー最小化計算で用いられる(計算時間の多くを占める)分子の構造エネルギーの2次微分行列(Hessian行列)の計算に適用した。日立 SR2201 上(プロセッサ数24台)で、Gln-tRNA の Hessian 行列を計算した結果、単一プロセッサで実行した場合に比べ、従来の並列化では6.7倍の高速化であったのに対し、遺伝的アルゴリズムを用いて最適なスケジューリング方針を探索するサブタスク方式では19.4倍の高速化を達成した。現在、基準振動モード解析やエネルギー最小化計算を統合的に行うシステムを開発するとともに、上記の静的スケジューリングの Parsley システムへの導入について検討している。

[1] M. Sekijima, S. Takasaki, S. Nakamura, M. Ikeguchi and K. Shimizu. Parsley: a Scalable Framework for Dependence-Driven Task Scheduling in Distributed-Memory Multiprocessor Systems. Proceedings of the 11th International Conference on Parallel and Distributed Computing Systems, pp.800-805 (1999).

[2] 関嶋政和, 高崎慎也, 中村周吾, 池口満徳, 清水謙多郎. サブタスク間の依存関係に基づくスケジューリング機構を備えた並列プログラミング環境の開発, 情報処理学会論文誌プログラミング, 採録済み.

これは平成12年3月9日に開催した
計算科学技術活用型特定研究開発推進事業
研究報告会（主催 科学技術振興事業団）
の予稿集から抜粋したものです。