

計算科学技術特論B (2018) 第10回

大規模MD並列化の技術1

自然科学研究機構 分子科学研究所
理論・計算分子科学研究領域

安藤 嘉倫

2018/6/21,28

講義の主旨

2/77

- **分子動力学計算**を例に, **三次元トラスネットワーク**上での**高並列対応ソフトウェアのコーディング技術**を紹介
 - 京コンピュータ, FX100 などでは有効な技術
 - 他ソフトにも有効な技術. 講義内容にインスパイアされた並列化コードを自作, 公表ないし論文公刊した場合は文献[1]を引用下さい.
- **MODYLAS^[1]**での実装例をもとに, 並列 (MPI, OpenMP, SIMD) の効率化技術をメインに, 演算の効率化技術についても紹介
- **コードの詳細には極力立ち入らずコーディング概念を説明**
 - 詳細は**ライセンスに同意の上** www.modylas.org での公開ソースコードをダウンロードして確認下さい.
 - ミニアプリ版 <http://fiber-miniapp.github.io/>も参照.

[1] Y.Andoh, N.Yoshii, K. Fujimoto, K.Mizutani, H.Kojima, A.Yamada, S.Okazaki, K.Kawaguchi, H.Nagao, K.Iwahashi, F. Mizutani, K.Minami, S. Ichikawa, H.Komatsu, S. Ishizuki, Y.Takeda, and M.Fukushima, *J. Chem. Theory Comput.*, 9, 3201 (2013).

目次

3/77

- 分子動力学 (MD) 法
- 分子動力学計算の並列化特性
- 並列化技術 1 データ構造
- 並列化技術 2 MPI
- 並列化技術 3 OpenMP, SIMD

第一回

第二回

目次

4/77

- **分子動力学 (MD) 法**

- **分子動力学計算の並列化特性**

- **並列化技術 1 データ構造**

第一回

- **並列化技術 2 MPI**

- **並列化技術 3 OpenMP, SIMD**

第二回

分子動力学法(1) 基礎方程式

ニュートンの運動方程式

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \mathbf{F}_i = - \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} \Phi(\overbrace{\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_i, \dots, \mathbf{r}_N}^{\mathbf{r}^N}) \quad i = 1, \dots, N$$

時間に対する座標の二階常微分方程式

t : 時刻

$\mathbf{r}_i$: 原子 i の座標

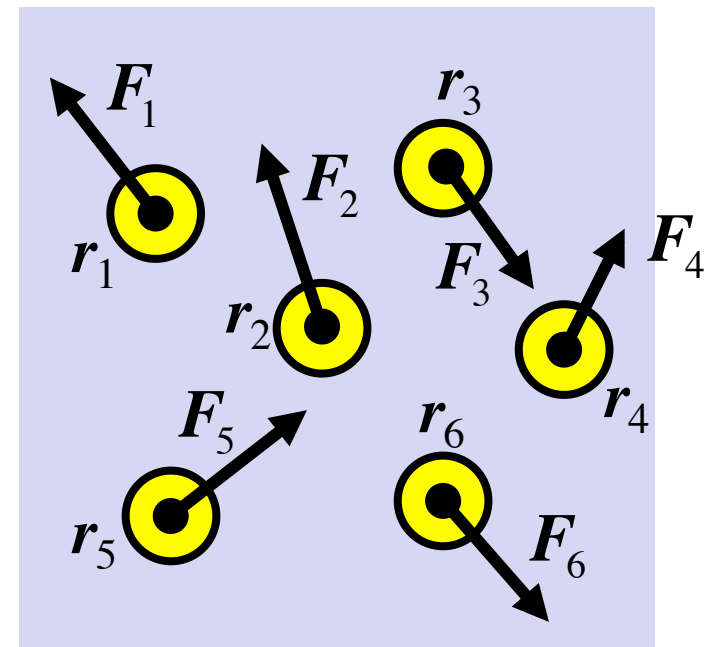
m_i : 原子 i の質量

$\mathbf{F}_i$: 原子 i に作用する力

$\Phi(\mathbf{r}^N)$: 系のポテンシャルエネルギー

N : 系に含まれる原子数

$N = 6$



分子動力学法(2) 運動方程式の数値積分

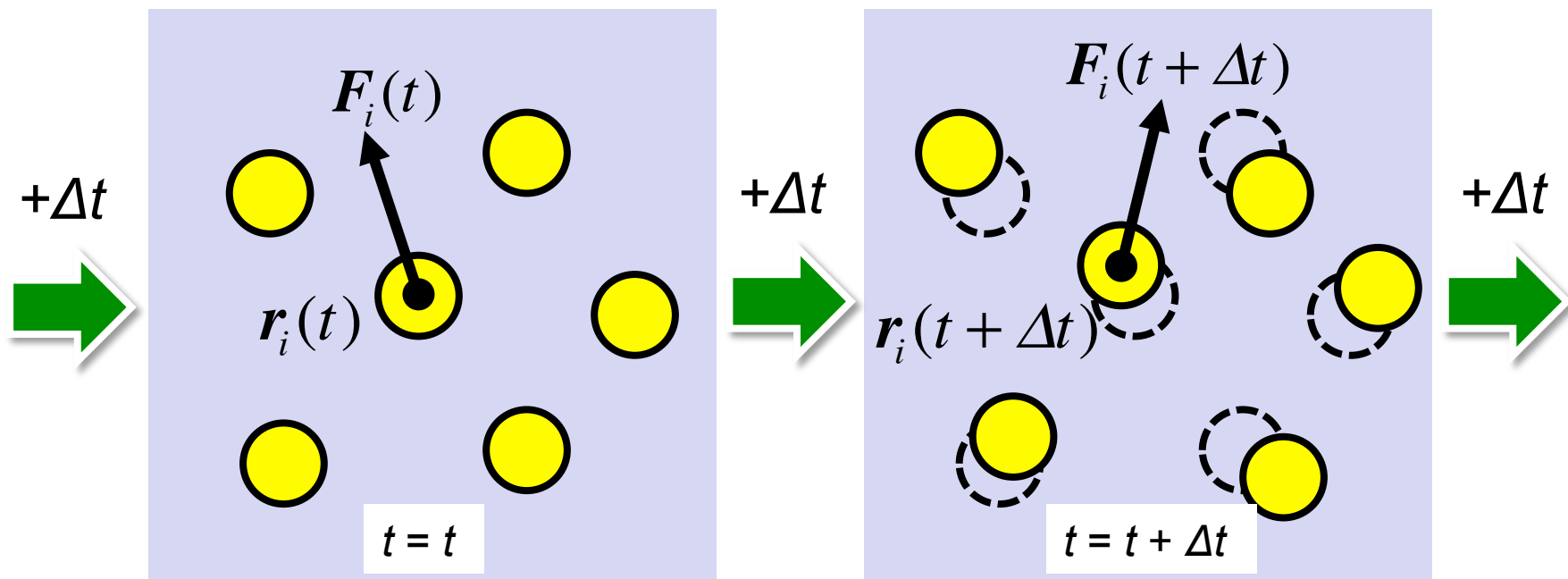
「ベルレ法」による差分化

$$v_i(t) = \frac{dr_i(t)}{dt} \quad \frac{F_i(t)}{m_i} = \frac{d^2 r_i(t)}{dt^2}$$

$$\begin{aligned} r_i(t + \Delta t) &= r_i(t) + \frac{dr_i(t)}{dt} \Delta t + \frac{1}{2!} \frac{d^2 r_i(t)}{dt^2} \Delta t^2 + \dots = r_i(t) + v_i(t) \Delta t + \frac{1}{2!} \frac{F_i(t)}{m} \Delta t^2 + \dots && \text{Taylor 展開 } +\Delta t \\ + \left. \begin{aligned} r_i(t - \Delta t) &= r_i(t) - \frac{dr_i(t)}{dt} \Delta t + \frac{1}{2!} \frac{d^2 r_i(t)}{dt^2} \Delta t^2 - \dots = r_i(t) - v_i(t) \Delta t + \frac{1}{2!} \frac{F_i(t)}{m} \Delta t^2 - \dots && \text{Taylor 展開 } -\Delta t \end{aligned} \right\} \end{aligned}$$

$$r_i(t + \Delta t) = 2r_i(t) + r_i(t - \Delta t) + \frac{F_i(t)}{m} \Delta t^2 + O(\Delta t^4) \quad \longrightarrow \quad \text{現在は「速度ベルレ法」による差分化が標準的}$$

ベルレの差分式



分子動力学法(2) 運動方程式の数値積分

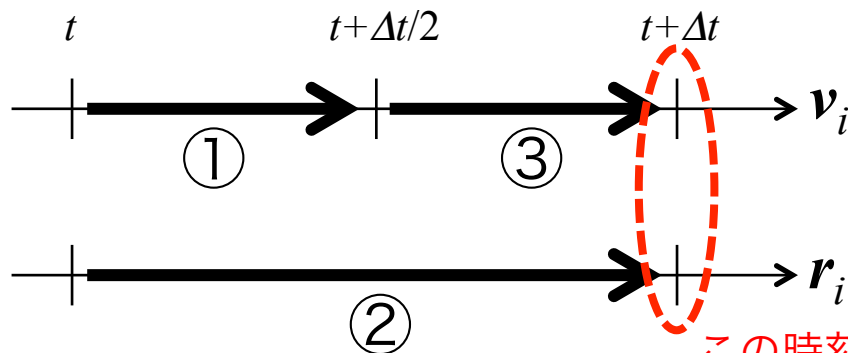
「速度ベルレ法」での差分式

$$v_i\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right) = v_i(t) + \frac{\Delta t}{2} \frac{F_i(t)}{m_i} \quad (1)$$

$$r_i(t + \Delta t) = r_i(t) + \Delta t v_i\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right) \quad (2)$$

$$v_i(t + \Delta t) = v_i\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right) + \frac{\Delta t}{2} \frac{F_i(t + \Delta t)}{m_i} \quad (3)$$

- ・ 同じ時刻 $t + \Delta t$ での座標および速度が得られる
- ・ 力の計算が最小限 (1ステップに1回のみ)
- ・ より汎用的な数値積分法(RESPA)への拡張



この時刻 $t + \Delta t$ で各種の解析を行う

コーディングイメージ

$\{r_i(0), i=1, \dots, n\}$ の読み込み
 $\{r_i(0)\}$ より $\{F_i(0)\}$ の計算

do mdstep=1, nsteps

$$v_i(t + dt/2) = v_i(t) + dt/2 * F_i(t)/m_i \quad (1)$$

$$r_i(t + dt) = r_i(t) + v_i(t + dt/2) \quad (2)$$

$\{r_i(t + dt)\}$ より $\{F_i(t + dt)\}$ の計算

$$v_i(t + dt) = v_i(t + dt/2) + dt/2 * F_i(t + dt)/m_i \quad (3)$$

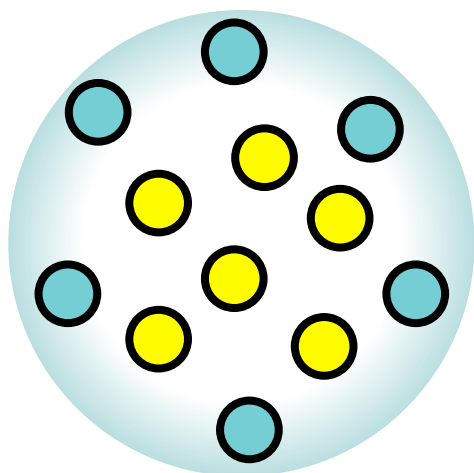
ハミルトニアン $H(t + dt)$ の計算, 各種解析

enddo

分子動力学法(3) 座標に対する境界条件

8 / 77

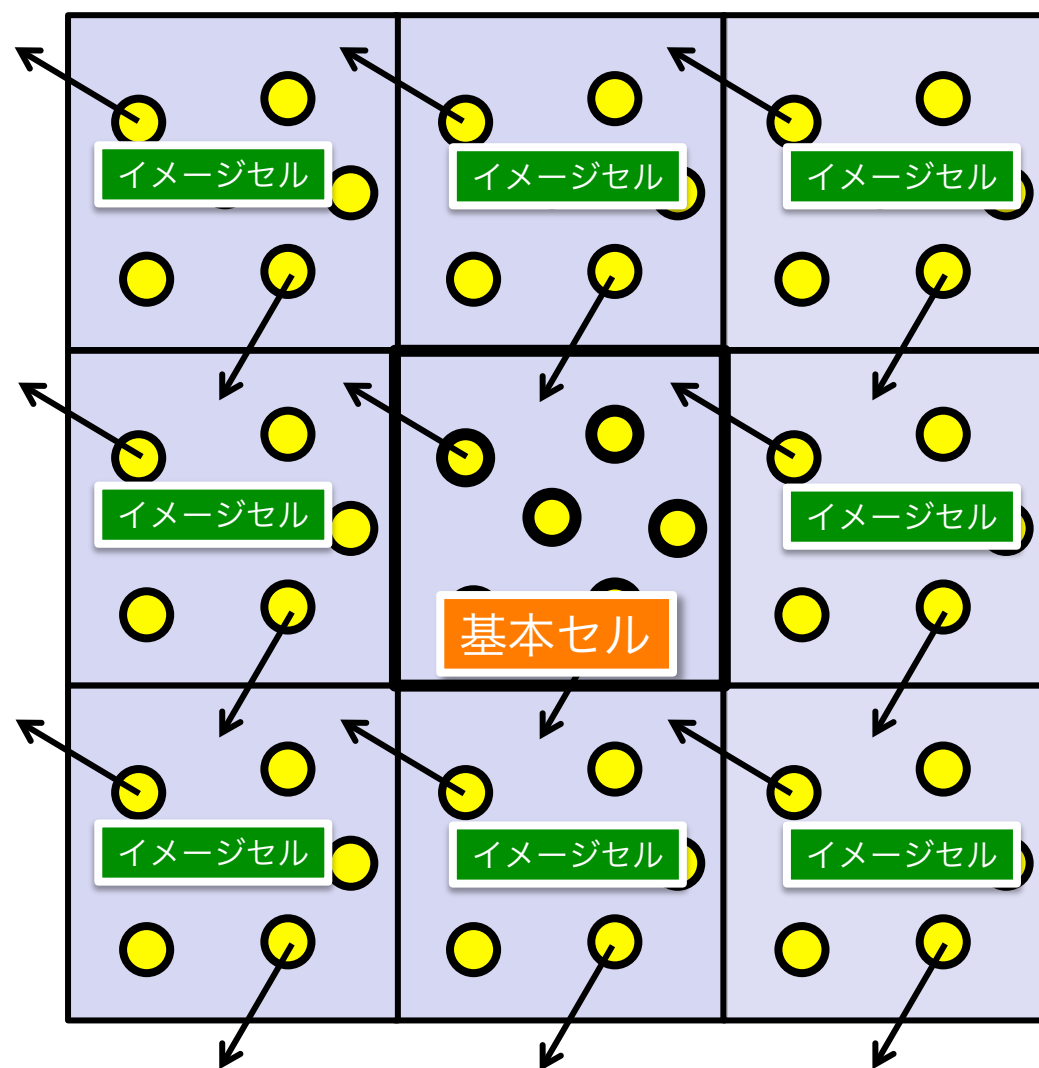
・自由境界条件



真空中での孤立系 (NVE)

“表面”の影響あり

・周期境界条件



“表面”の影響がないバルクでの孤立系 (NVE)

分子動力学法(4) 原子間相互作用

9 / 77

古典分子動力学法

古典近似された原子間相互作用関数 (力場) $\Phi(\mathbf{r}^N)$

各項は以降のスライド参照

$$\begin{aligned}
 \Phi(\mathbf{r}^N) = & \sum_{bonds} K_b (b(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) - b_0)^2 + \sum_{angles} K_\theta (\theta(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \mathbf{r}_k) - \theta_0)^2 \\
 & + \sum_{dihedrals} K_\phi [1 + \cos(n\phi(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \mathbf{r}_k, \mathbf{r}_l) - \delta)] + \sum_{impropers} K_\psi (\psi(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \mathbf{r}_k, \mathbf{r}_l) - \psi_0)^2 \\
 & + \sum_{nonbonds} \left[4\varepsilon \left\{ \left(\frac{\sigma}{r(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)} \right)^6 \right\} + \frac{q_i q_j}{r(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)} \right] \\
 & \qquad \qquad \text{Lennard-Jones} \qquad \qquad \text{Coulomb} \\
 & \qquad \qquad \text{ファンデルワールス力} \qquad \qquad \text{静電力}
 \end{aligned}$$

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \mathbf{F}_i = - \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} \Phi(\mathbf{r}^N) \quad \text{力の計算式はあらかじめ導出しておく (数値微分はしない)}$$

分子動力学法(4) 原子間相互作用

10 / 77

古典分子動力学法

古典近似された原子間相互作用関数 (力場) $\Phi(\mathbf{r}^N)$

各項は以降のスライド参照

$$\Phi(\mathbf{r}^N) = \sum_{\text{bonds}} K_b (b(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) - b_0)^2 + \sum_{\text{angles}} K_\theta (\theta(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \mathbf{r}_k) - \theta_0)^2$$

$$+ \sum_{\text{dihedrals}} K_\phi [1 + \cos(n\phi(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \mathbf{r}_k, \mathbf{r}_l) - \delta)] + \sum_{\text{impropers}} K_\psi (\psi(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \mathbf{r}_k, \mathbf{r}_l) - \psi_0)^2$$

$$+ \sum_{\text{nonbonds}} \left[4\varepsilon \left\{ \left(\frac{\sigma}{r(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)} \right)^6 \right\} + \frac{q_i q_j}{r(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)} \right]$$

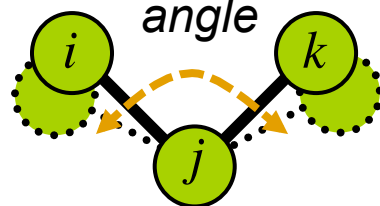
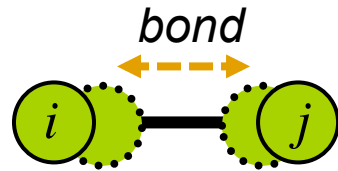
Lennard-Jones Coulomb

分子内 (intra-molecule) bonded 相互作用 +
分子間 (inter-molecule) nonbonded 相互作用

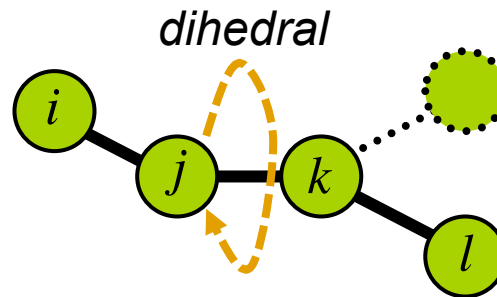
分子動力学法(5) 分子内 bonded 相互作用

11 / 77

$$\phi_{\text{bond},ij} = K_b (b(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) - b_0)^2$$

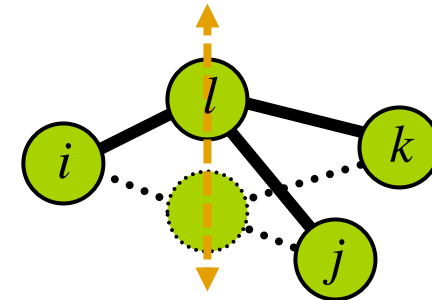


$$\phi_{\text{angle},ijk} = K_\theta (\theta(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \mathbf{r}_k) - \theta_0)^2$$



$$\phi_{\text{dihedral},ijkl} = K_\phi \left[1 + \cos(n\phi(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \mathbf{r}_k, \mathbf{r}_l) - \delta) \right]$$

improper dihedral



$$\phi_{\text{improper},ijkl} = K_\psi (\psi(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \mathbf{r}_k, \mathbf{r}_l) - \psi_0)^2$$

コーディングイメージ

do n=1,nbonds

b=b(ri, rj)

 $\phi_{\text{bond},ij}$ の計算 $\phi_{\text{bond}} = \phi_{\text{bond}} + \phi_{\text{bond},ij}$

Fi, Fj の計算

f(i)=f(i)+Fi

f(j)=f(j)+Fj

enddo

do n=1,nangles

theta=theta(ri, rj, rk)

 $\phi_{\text{angle},ijk}$ の計算 $\phi_{\text{angle}} = \phi_{\text{angle}} + \phi_{\text{angle},ijk}$

Fi, Fj, Fk の計算

f(i)=f(i)+Fi

f(j)=f(j)+Fj

f(k)=f(k)+Fk

enddo

do n=1,ndihedrals

phi=phi(ri, rj, rk, rl)

 $\phi_{\text{dihedral},ijkl}$ の計算 $\phi_{\text{dihedral}} = \phi_{\text{dihedral}} + \phi_{\text{dihedral},ijkl}$

Fi, Fj, Fk, Fl の計算

f(i)=f(i)+Fi

f(j)=f(j)+Fj

f(k)=f(k)+Fk

f(l)=f(l)+Fl

enddo

do n=1,nimpropers

psi=psi(ri, rj, rk, rl)

 $\phi_{\text{improper},ijkl}$ の計算 $\phi_{\text{improper}} = \phi_{\text{improper}} + \phi_{\text{improper},ijkl}$

Fi, Fj, Fk, Fl の計算

f(i)=f(i)+Fi

f(j)=f(j)+Fj

f(k)=f(k)+Fk

f(l)=f(l)+Fl

enddo

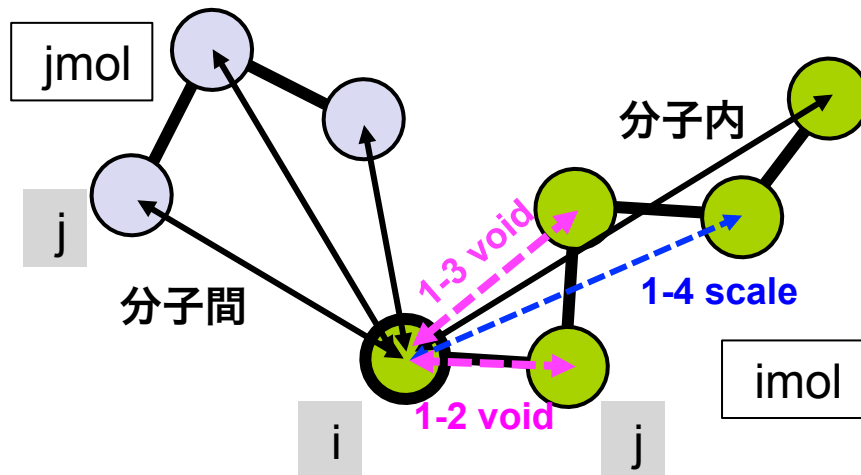
分子動力学法(6) 分子内・分子間 nonbonded 相互作用

12/77

nonbonded = **Lennard-Jones(LJ)** + **Coulomb(CL)**

$$\phi_{LJ}(r) = 4\epsilon \left\{ \left(\frac{\sigma}{r(r_i, r_j)} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r(r_i, r_j)} \right)^6 \right\} \quad \phi_{CL}(r) = \frac{q_i q_j}{r(r_i, r_j)}$$

$$r(r_i, r_j) = \sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2}$$



分子内 *nonbond* 相互作用計算の注意点:

- ・1番目および2番目の隣接原子とはnonbonded相互作用しない (1-2, 1-3 void)
- ・3番目の隣接原子とのnonbonded相互作用は因子 *s* でスケールする (1-4 scale) ※力場に依存
- ・4番目以降の隣接原子とは通常のnonbonded相互作用

コーディングイメージ

分子間

```
do imol=1,nmol-1
do jmol=imol+1,nmol
do i=1,natom(imol)
do j=1,natom(jmol)
rij=rij(ri, rj)
 $\phi_{ij}$  の計算
 $\phi_{nonbond} = \phi_{nonbond} + \phi_{ij}$ 
Fi, Fj の計算
f(i)=f(i)+Fi
f(j)=f(j)+Fj
enddo
enddo
enddo
```

分子内

```
do imol=1,nmol
do i=1,natom(imol)-1
do j=i+1,natom(imol)
rij=rij(ri, rj)
 $x = \begin{cases} 0 & \text{if 1-2, -3 void} \\ s & \text{if 1-4 scale} \\ 1 & \text{else} \end{cases}$ 
 $\phi_{ij}$  の計算
 $\phi_{nonbond} = \phi_{nonbond} + x * \phi_{ij}$ 
Fi, Fj の計算
f(i)=f(i)+x*Fi
f(j)=f(j)+x*Fj
enddo
enddo
enddo
```

分子動力学法(7) LJ 相互作用のカットオフ

13 / 77

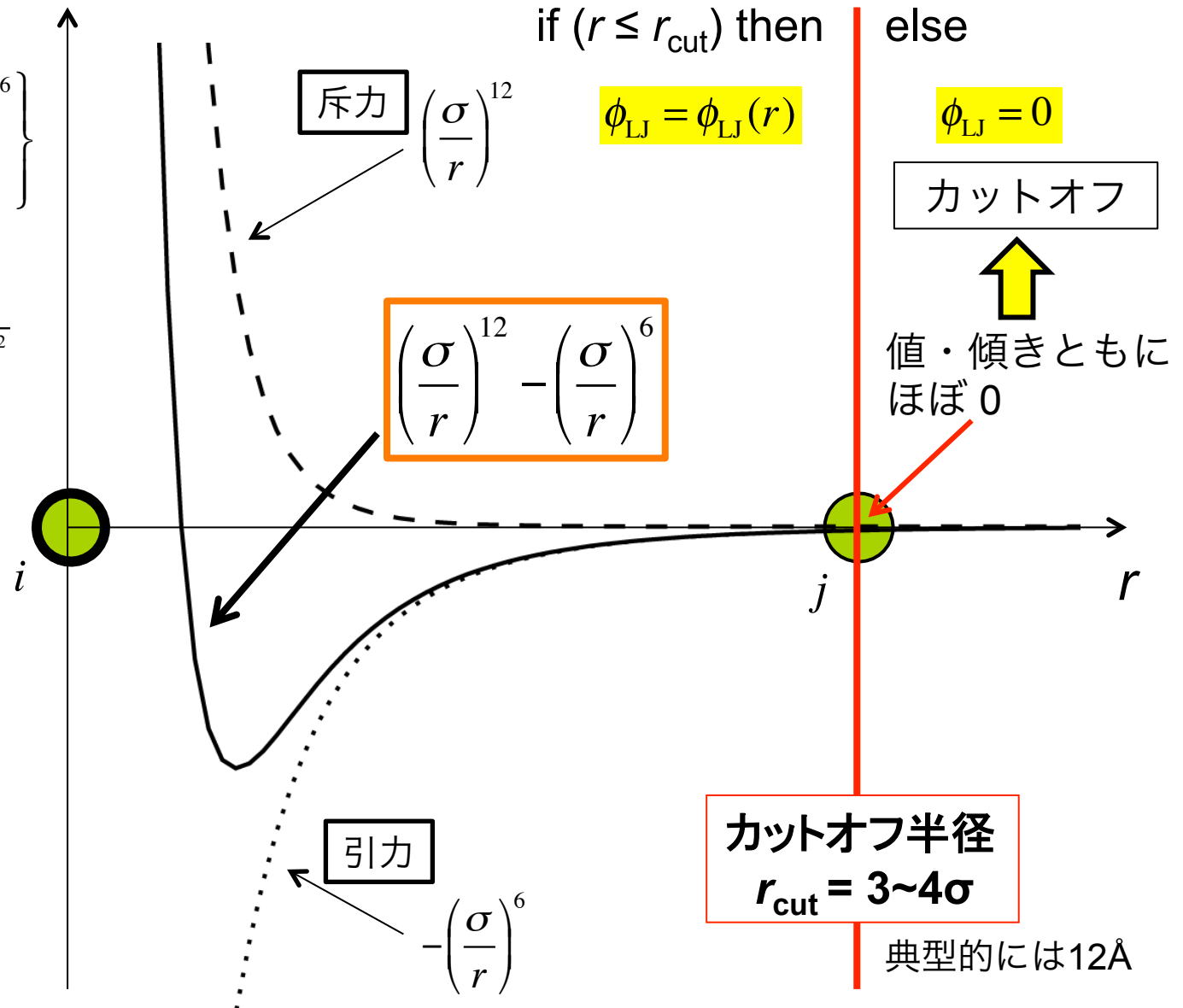
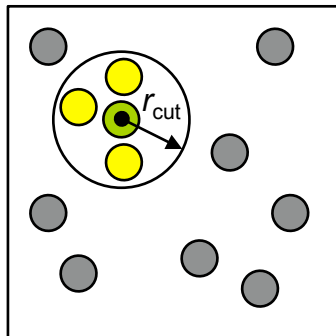
$$\phi_{LJ}(r) =$$

$$4\epsilon \left\{ \left(\frac{\sigma}{r(r_i, r_j)} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r(r_i, r_j)} \right)^6 \right\}$$

$$r(r_i, r_j) =$$

$$\sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2}$$

$r > r_{\text{cut}}$ にある粒子との相互作用を無視(cut off)することで計算時間を削減できる



分子動力学法(7) LJ 相互作用のカットオフ

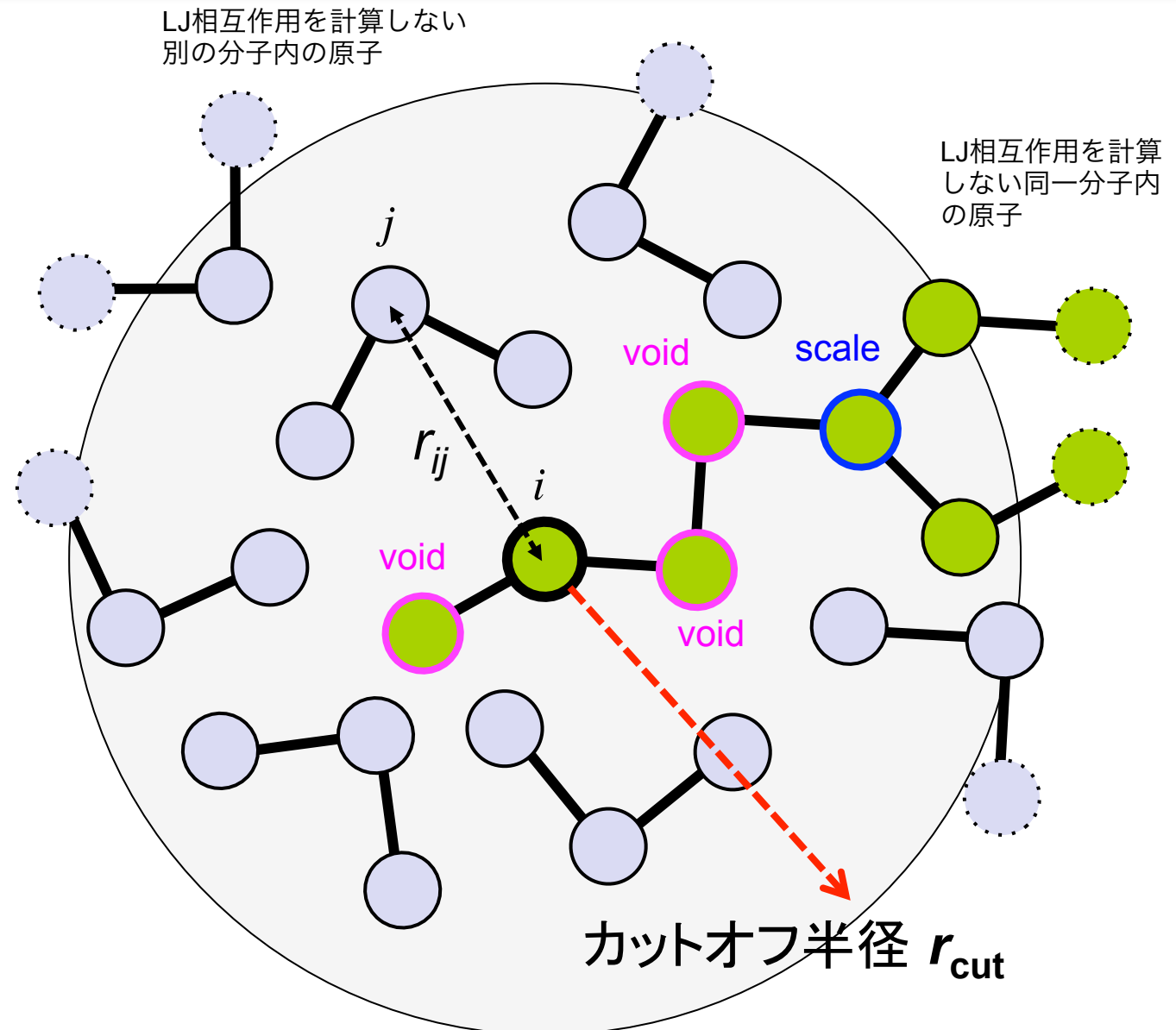
14 / 77

・分子系での留意事項

コーディングイメージ
(分子間)

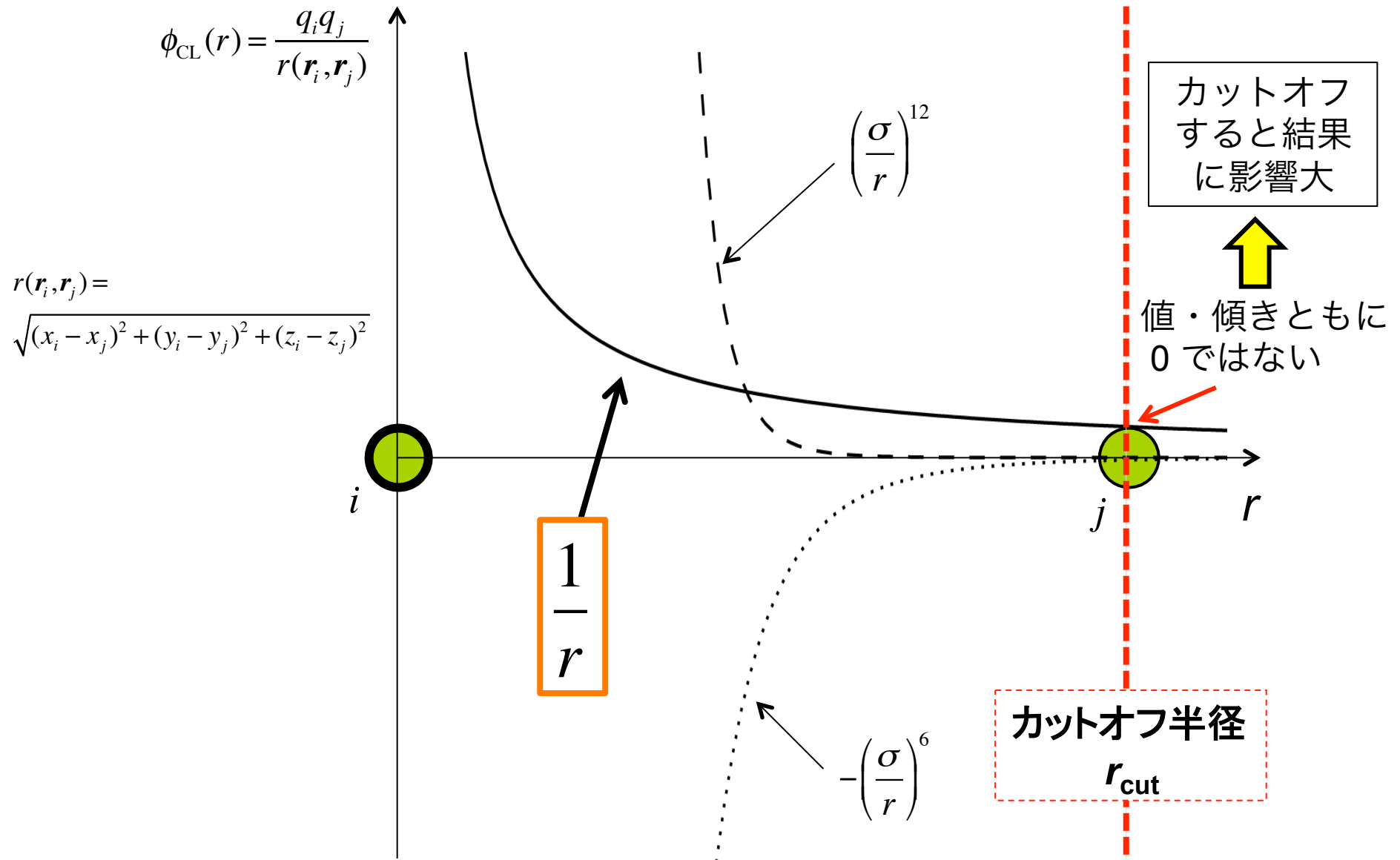
```

do imol=1,nmol-1
do jmol=imol+1,nmol
do i=1,natom(imol)
do j=1,natom(jmol)
  rij=rij(ri, rj)
  if(rij > rcut) cycle
   $\phi_{ij}$  の計算
   $\phi_{nonbond} = \phi_{nonbond} + \phi_{ij}$ 
   $F_i, F_j$  の計算
   $f(i) = f(i) + F_i$ 
   $f(j) = f(j) + F_j$ 
enddo
enddo
enddo
enddo
  
```



分子動力学法(8) Coulomb 相互作用

15 / 77



分子動力学法(8) Coulomb 相互作用

16 / 77

カットオフしない Coulomb 相互作用の計算法

- 自由境界条件下

すべての i, j 原子対を計算

多重極展開法, および**高速多重極展開法 (FMM)**

- 周期境界条件下

Ewald 法 $O(N^2)$

Particle Mesh Ewald (PME) 法 $O(N \log N)$

FMM + 多重極子のEwald法 $O(N)$

今回の講義ではこの
並列化を説明

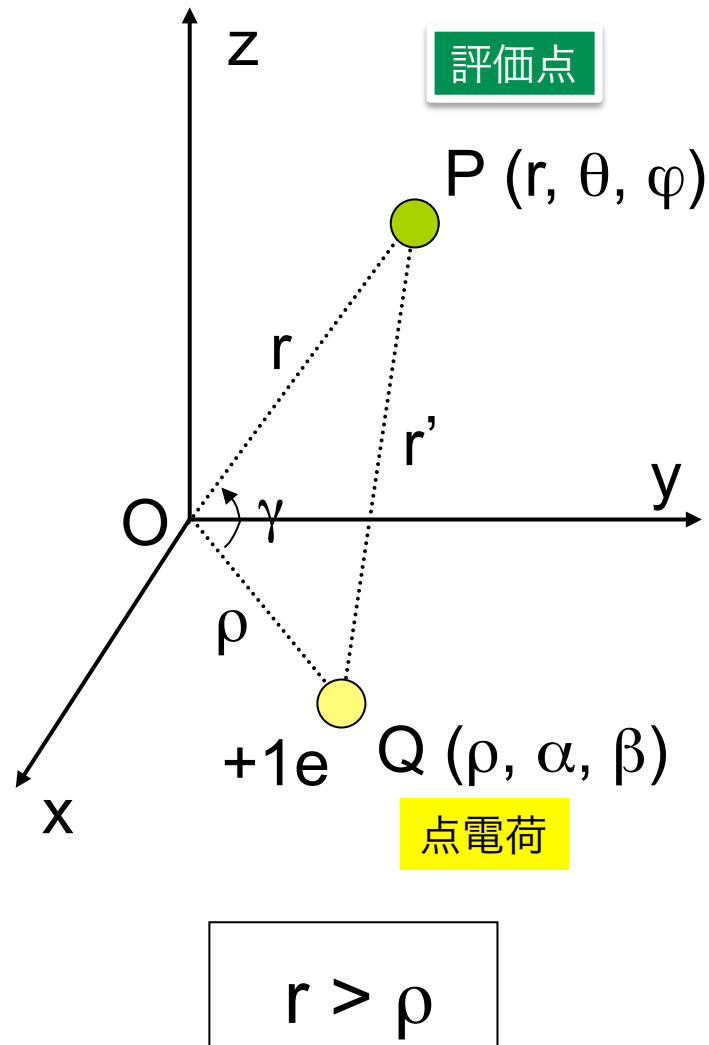
FMM:

方法論の詳細は「**CMSI**計算科学技術特論A」 古典分子動力学法の高速度化 (吉井) を参照

分子動力学法(8) Coulomb 相互作用

177

$1/r'$ 関数の極座標表示



余弦定理より

$$r'^2 = r^2 + \rho^2 - 2r\rho \cos \gamma$$

$$\begin{aligned} \frac{+1}{r'} &= \frac{1}{\sqrt{r^2 + \rho^2 - 2r\rho \cos \gamma}} \\ &= \frac{1}{r \sqrt{1 - 2\frac{\rho}{r} \cos \gamma + \left(\frac{\rho^2}{r^2}\right)}} \\ &= \frac{1}{r \sqrt{1 - 2u\mu + \mu^2}} \end{aligned}$$

ここで

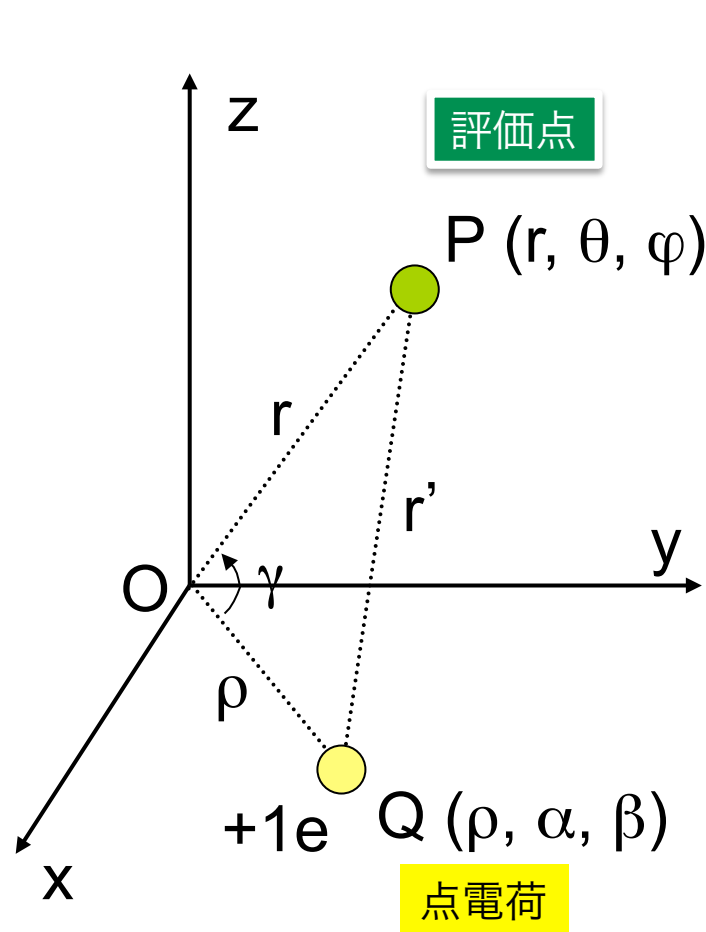
$$\mu = \frac{\rho}{r}, \quad u = \cos \gamma$$

$$\mu < 1, \quad -1 \leq u \leq 1$$

分子動力学法(8) Coulomb 相互作用

177

点電荷ポテンシャルの多重極展開



$$r > \rho$$

$$\begin{aligned}\Phi(P) &= \frac{1}{r'} = \frac{1}{r} \frac{1}{\sqrt{1 - 2u\mu + \mu^2}} \quad \mu = \frac{\rho}{r} \\ &= \frac{1}{r} \sum_{n=0}^{\infty} P_n(u) \mu^n \quad \text{※} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\rho^n}{r^{n+1}} P_n(u)\end{aligned}$$

多重極展開

ただし $r > \rho$ ($\mu < 1$) の場合に限る.

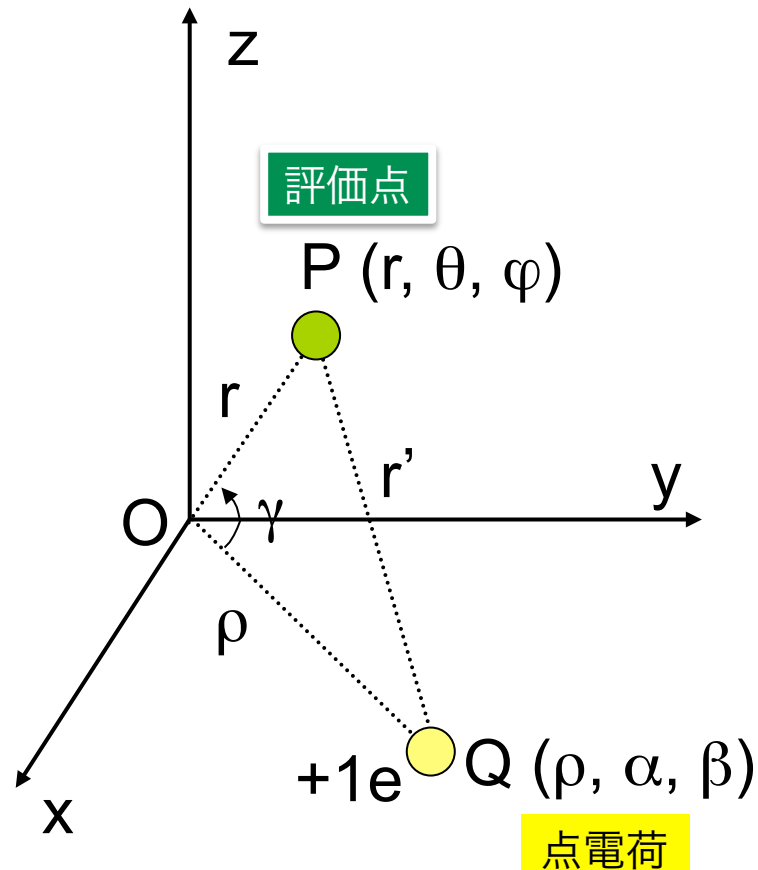
※ Legendre 多項式 $P_n(x)$ の母関数:

$$G_L(x, t) = \frac{1}{\sqrt{1 - 2xt + t^2}}, \quad |t| < 1, |x| \leq 1 \quad G_L(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} P_n(x) t^n$$

分子動力学法(8) Coulomb 相互作用

177

点電荷ポテンシャルの局所展開



$$\Phi(P) = \frac{1}{r'} = \frac{1}{\rho} \frac{1}{\sqrt{1 - 2u\mu' + \mu'^2}} \quad \mu' = \frac{r}{\rho}$$

$$= \frac{1}{\rho} \sum_{n=0}^{\infty} P_n(u) \mu'^n$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{r^n}{\rho^{n+1}} P_n(u)$$

局所展開

ただし $r < \rho$ ($\mu' < 1$) の場合に限る.

FMM = 多重極展開と局所展開
の組み合わせ + α

$O(N)$ 法

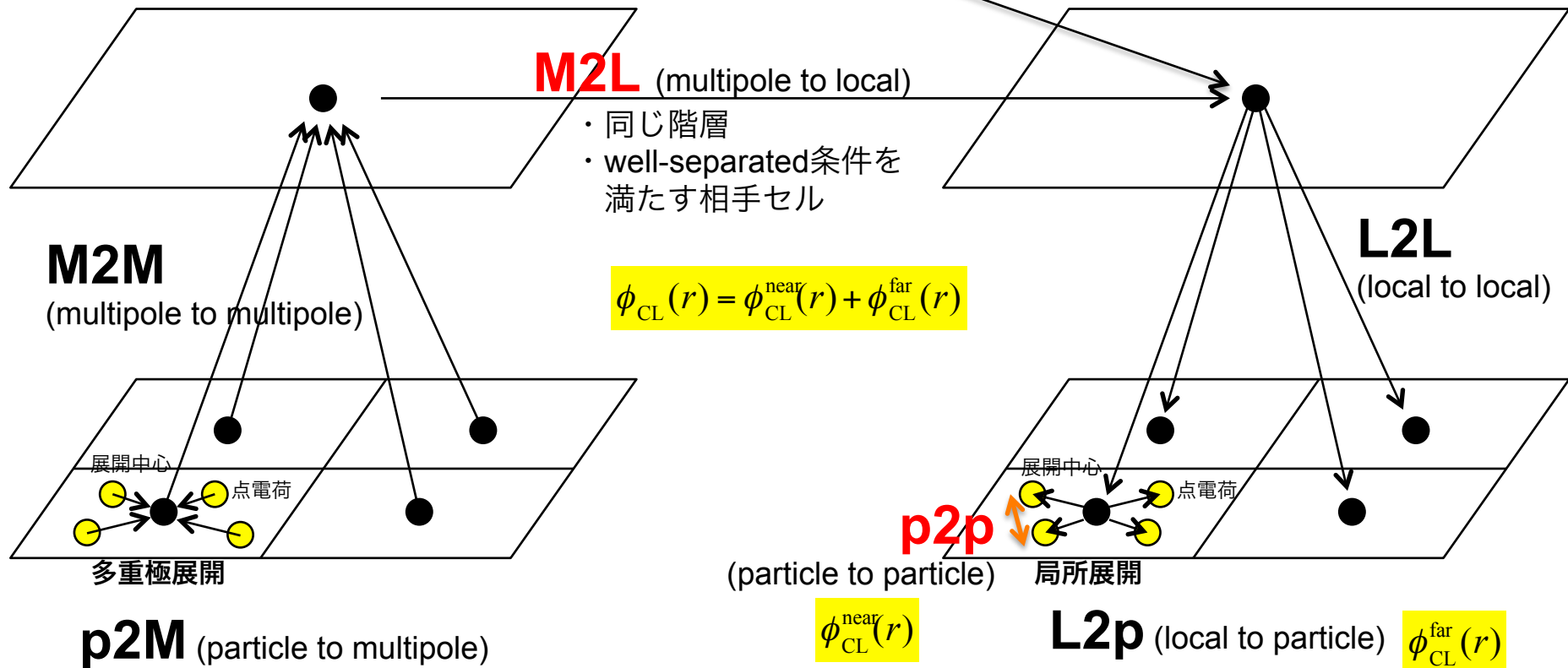
分子動力学法(8) Coulomb 相互作用

20 / 77

FMM 基本演算

多極子エwald法
(無限遠からの寄与)

$O(N)$ 法



p2M : 点電荷の多重極展開

M2M : 多重極子のマージ

M2L : 多重極子の局所展開

L2L : 局所展開中心の移動, 重ね合わせ

L2p : 局所展開による静電ポテンシャル評価

p2p : 粒子対計算

Hot spots

各演算の詳細は「岡崎, 吉井, 「コンピュータシミュレーションの基礎(第二版)」, 化学同人」を参照

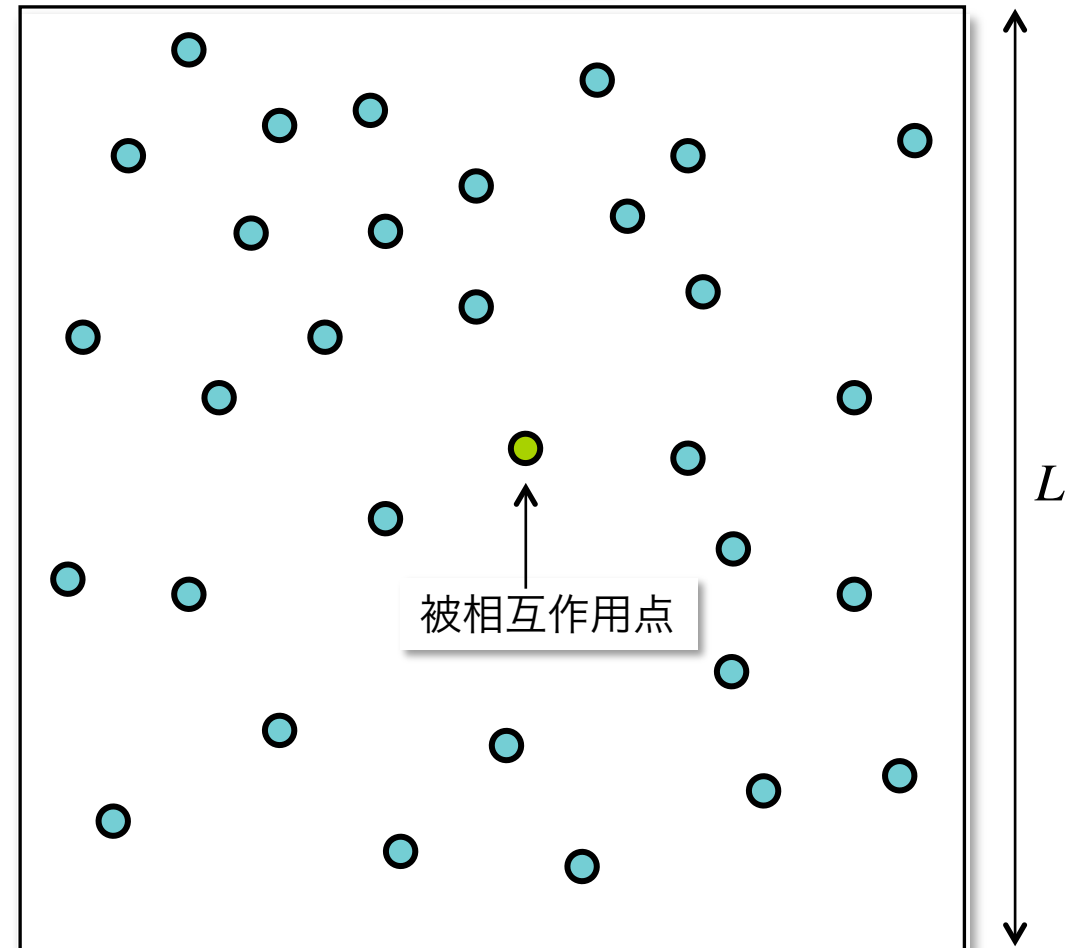
分子動力学法(8) Coulomb 相互作用

21 / 77

基本セル

FMM での階層的セル分割

- 基本セルは立方体 (一辺 L)



分子動力学法(8) Coulomb 相互作用

22 / 77

FMM での階層的セル分割

- ・ 基本セルは立方体 (一辺 L)
- ・ 各辺を 2^n 回に等分割

本講義では簡単のためこの2つを前提

用語の定義：

サブセル:

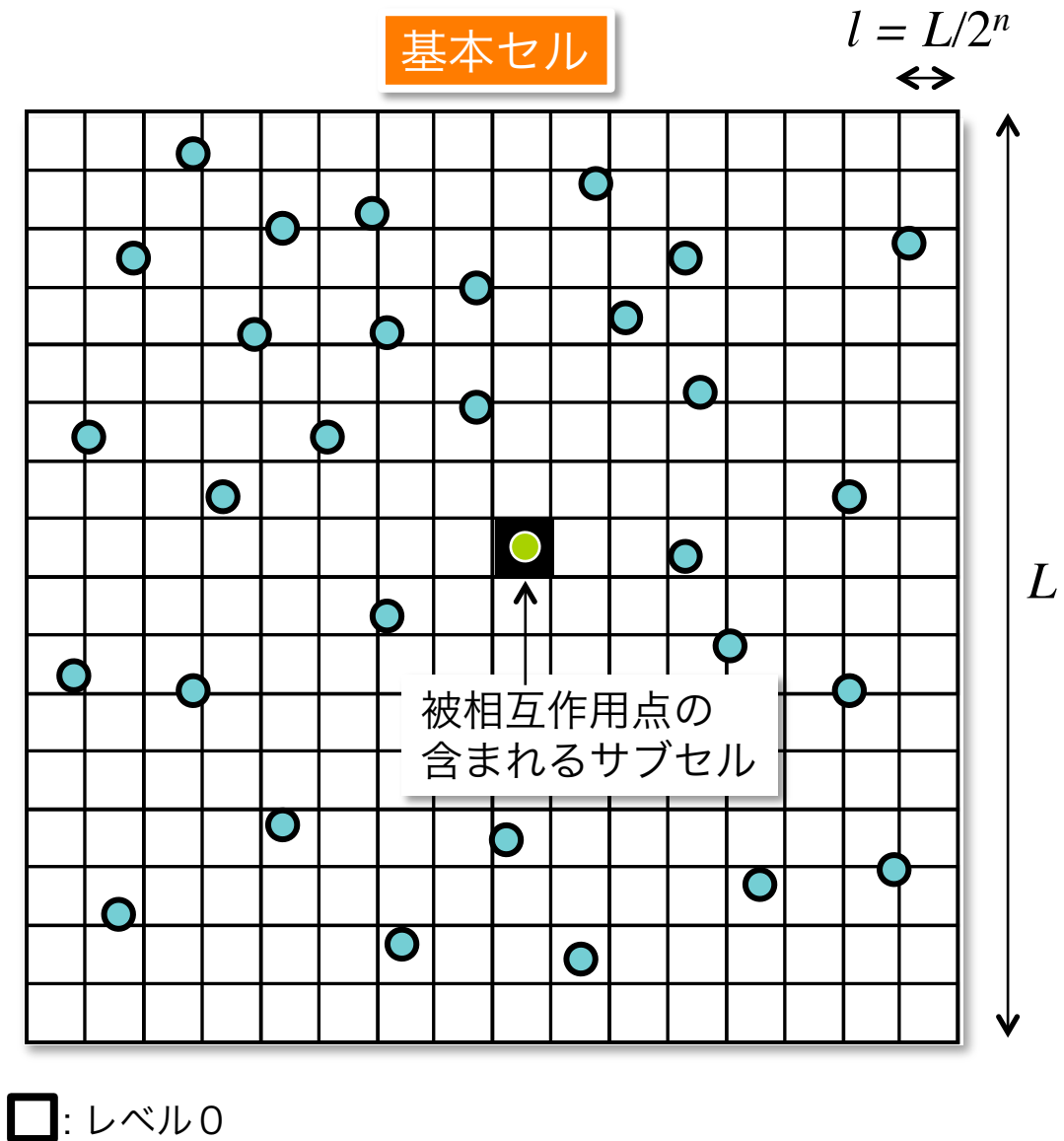
レベル0の分割セル (一辺 $l = L/2^n$)

スーパーセル:

レベル m の分割セル (一辺 $l \times 2^m$)

系には計 8^n 個のサブセル, レベル m には 8^{n-m} 個のスーパーセル.

サブセルは $m=0$ のスーパーセル



分子動力学法(8) Coulomb 相互作用

23 / 77

FMM での階層的セル分割

- ・ 基本セルは立方体 (一辺 L)
- ・ 各辺を 2^n 回に等分割

本講義では簡単のためこの2つを前提

用語の定義：

サブセル:

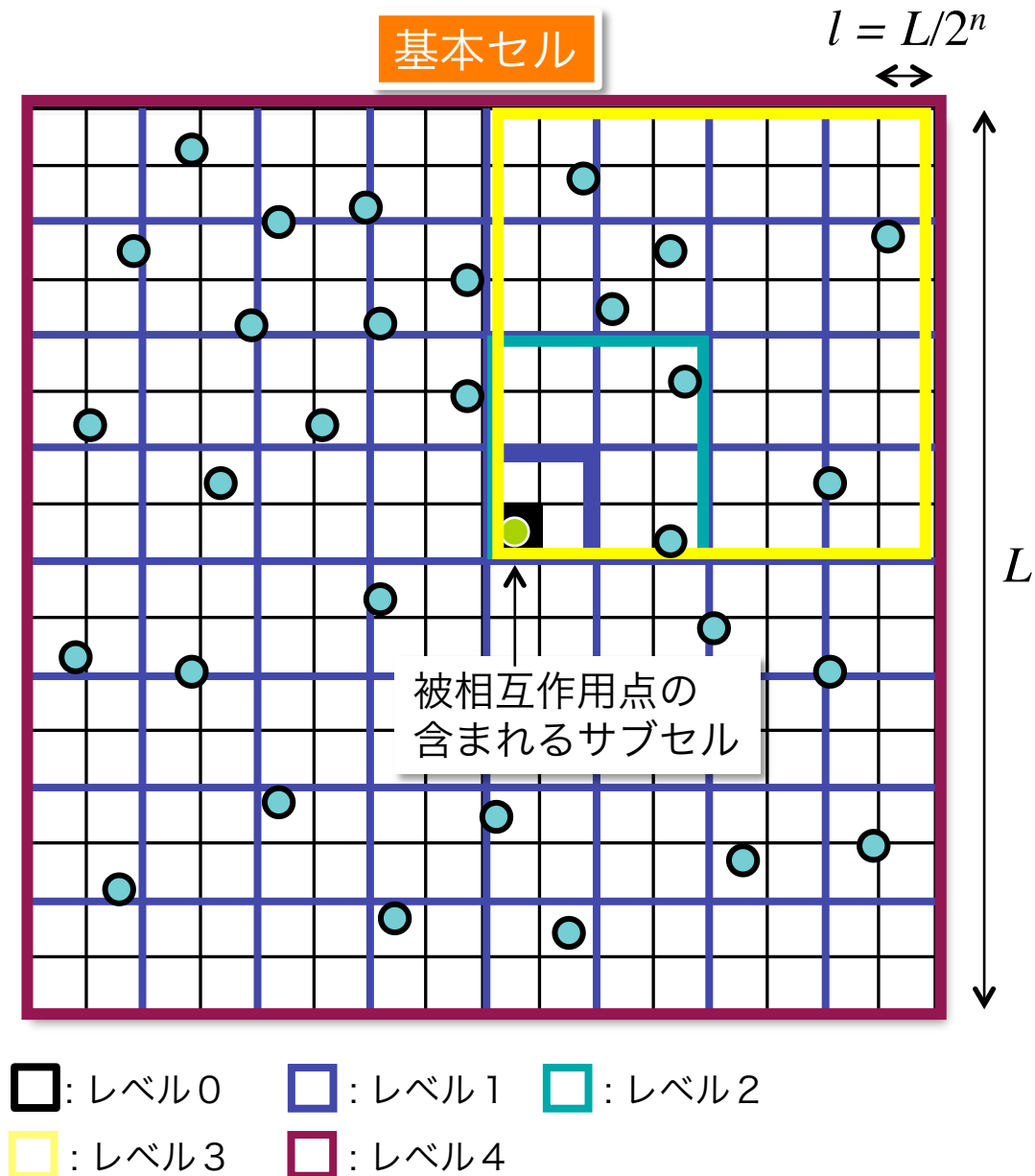
レベル0の分割セル (一辺 $l = L/2^n$)

スーパーセル:

レベル m の分割セル (一辺 $l \times 2^m$)

系には計 8^n 個のサブセル, レベル m には 8^{n-m} 個のスーパーセル.

サブセルは $m=0$ のスーパーセル



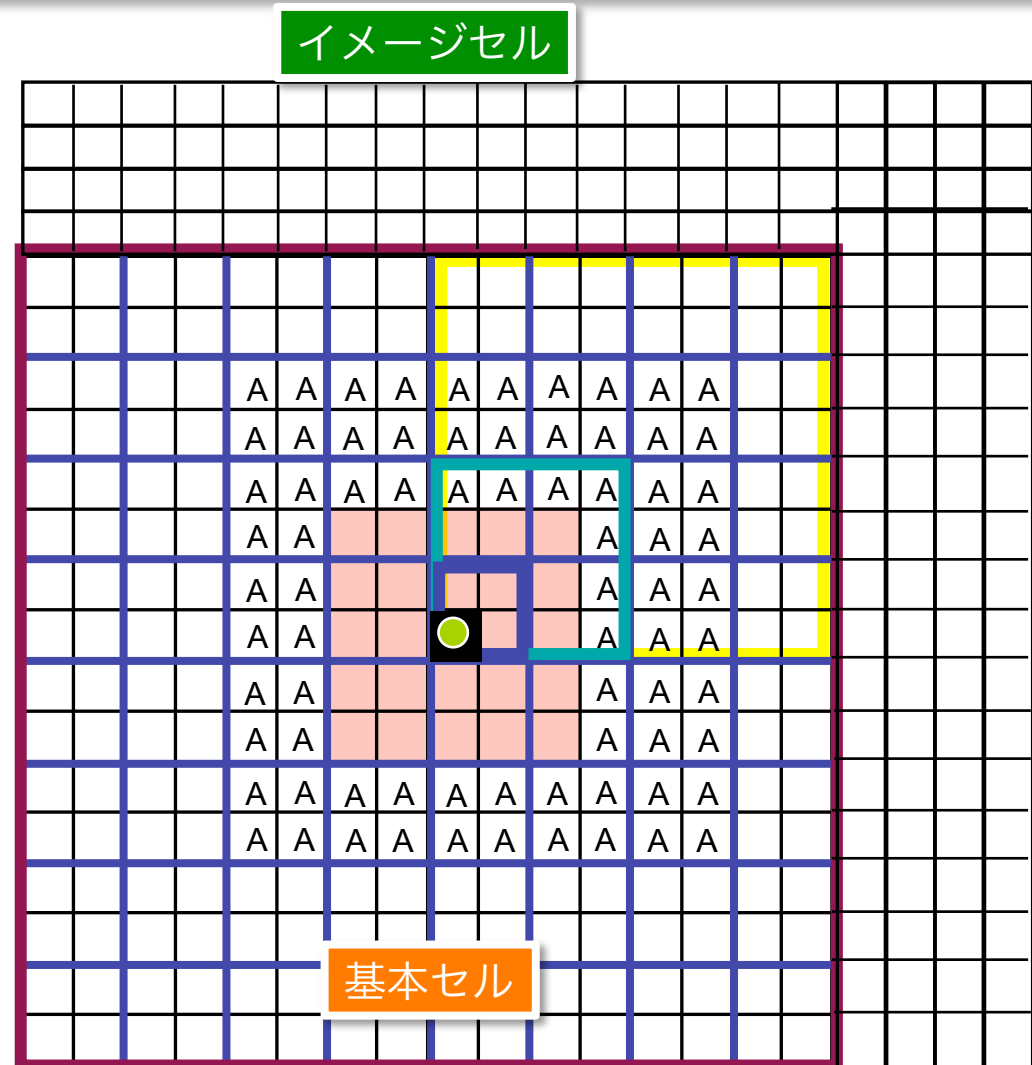
分子動力学法(8) Coulomb 相互作用

24 / 77

FMMでの相互作用計算の要点

レベル0

- ・ 近傍サブセルに含まれる点電荷との **p2p**
- ・ サブセルAとの **M2L**



- : レベル0
 : レベル1
 : レベル2
 : レベル3
 : レベル4
 : 粒子間相互作用を計算(p2p)

分子動力学法(8) Coulomb 相互作用

25 / 77

FMMでの相互作用計算の要点

レベル0

- ・ 近傍サブセルに含まれる点電荷との **p2p**
- ・ サブセルAとの **M2L**

レベル1

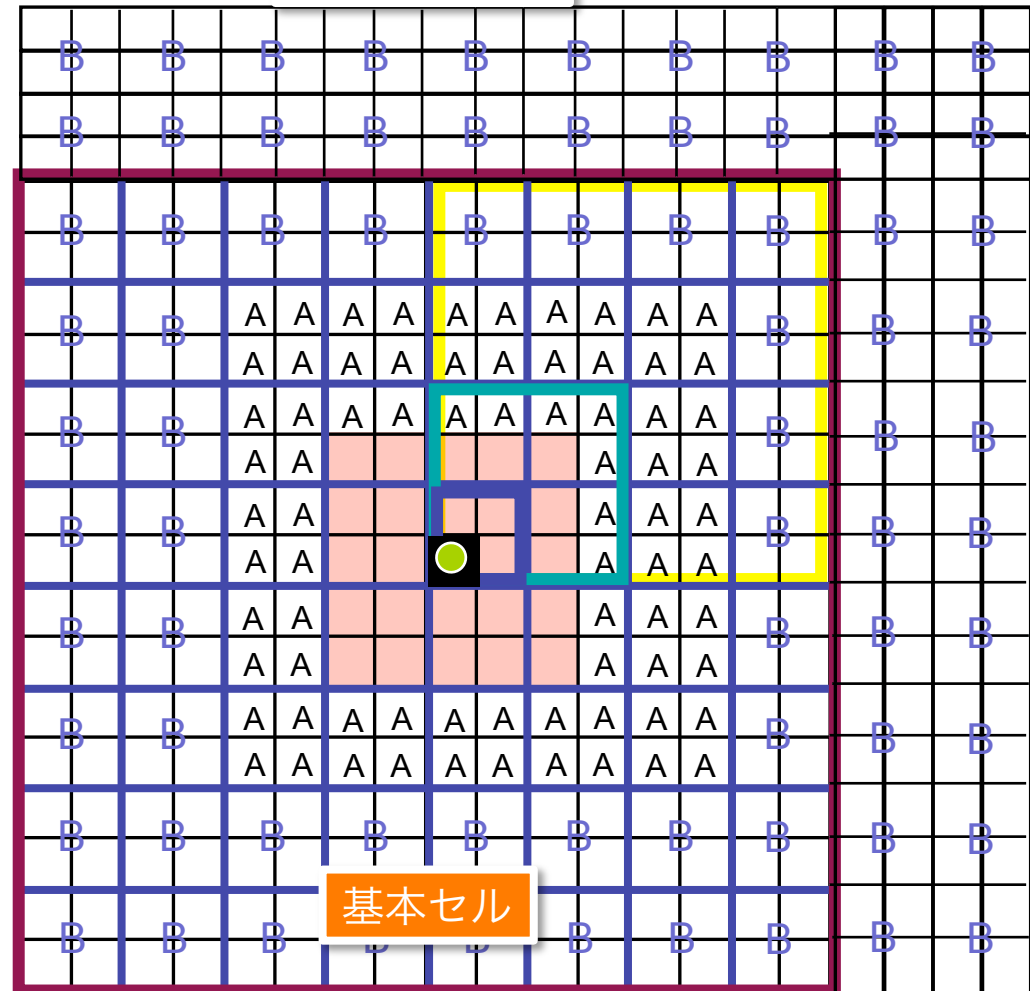
- ・ スーパーセルBとの**M2L**, **L2L**

...以下同様 (入れ子構造)

入れ子構造により,

周期境界条件下では各レベル
 $10^3 - 5^3 = 875$ 個のスーパーセル
 とM2L

イメージセル



基本セル

- : レベル0
- : レベル1
- : レベル2
- : レベル3
- : レベル4
- : 粒子間相互作用を計算(p2p)

分子動力学法(8) Coulomb 相互作用

26 / 77

FMMでの相互作用計算の要点

レベル0

- ・ 近傍サブセルに含まれる点電荷との **p2p**
- ・ サブセルAとの **M2L**
- ・ 点電荷への局所展開 **L2p**

レベル1

- ・ スーパーセルBとの**M2L**, **L2L**

...以下同様 (入れ子構造)

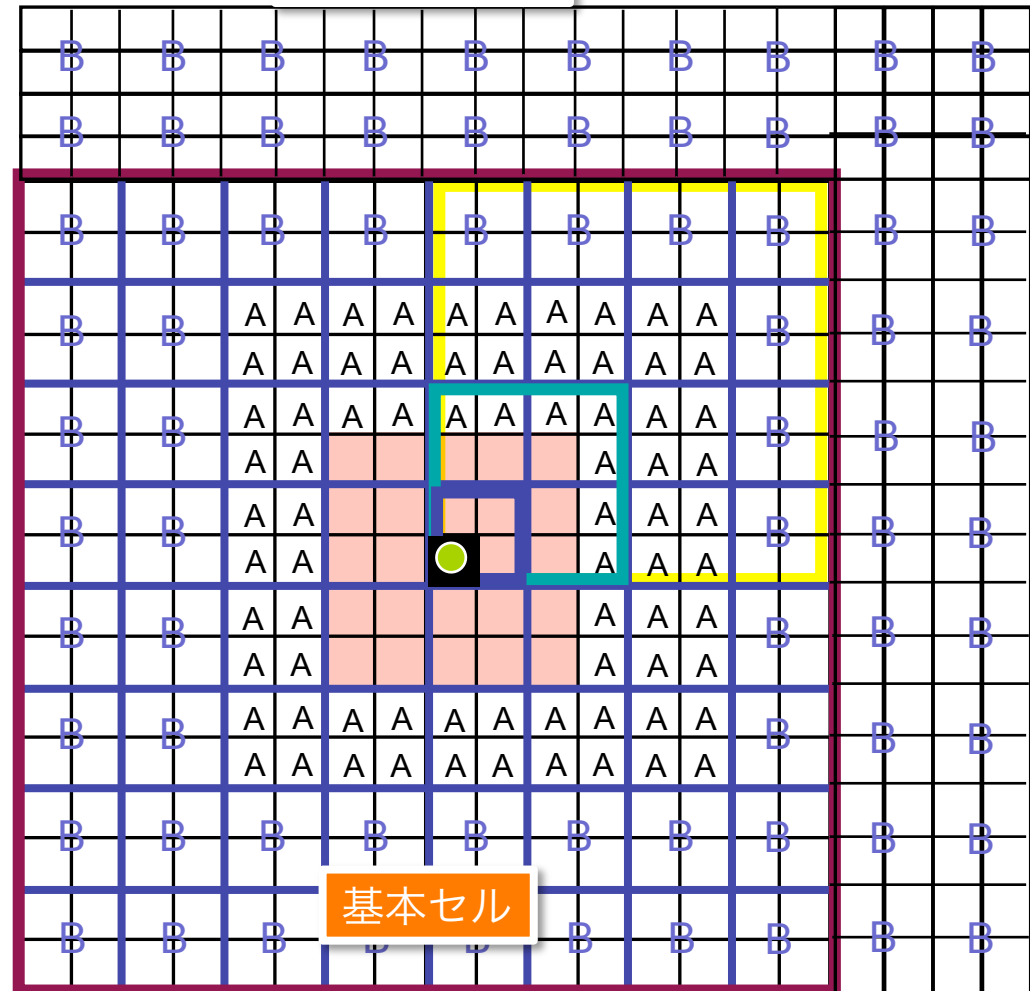
最上レベル

- ・ 多極子のEwald法, **L2L**

入れ子構造により,

周期境界条件下では各レベル
 $10^3 \cdot 5^3 = 875$ 個のスーパーセル
 とM2L

イメージセル



- : レベル0
- : レベル1
- : レベル2
- : レベル3
- : レベル4
- : 粒子間相互作用を計算(p2p)

目次

27 / 77

- 分子動力学 (MD) 法
- 分子動力学計算の並列化特性
- 並列化技術 1 データ構造
- 並列化技術 2 MPI
- 並列化技術 3 OpenMP, SIMD

第一回

第二回

分子動力学計算の並列化特性(1)

28 / 77

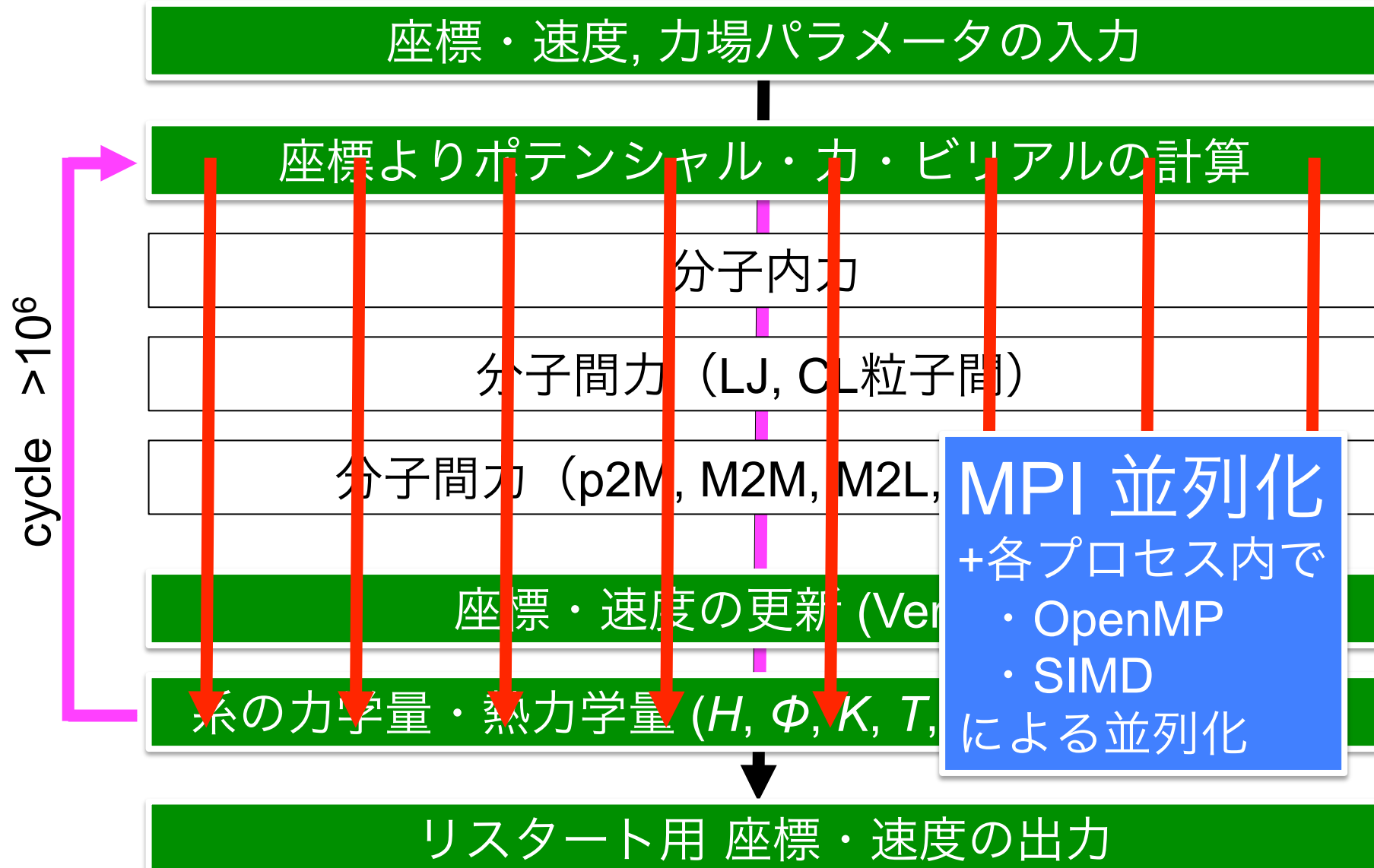
MD 計算の処理フロー



分子動力学計算の並列化特性(1)

29 / 77

MD 計算の処理フロー



分子動力学計算の並列化特性(2) プロセス分割

30 / 77

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \mathbf{F}_i$$

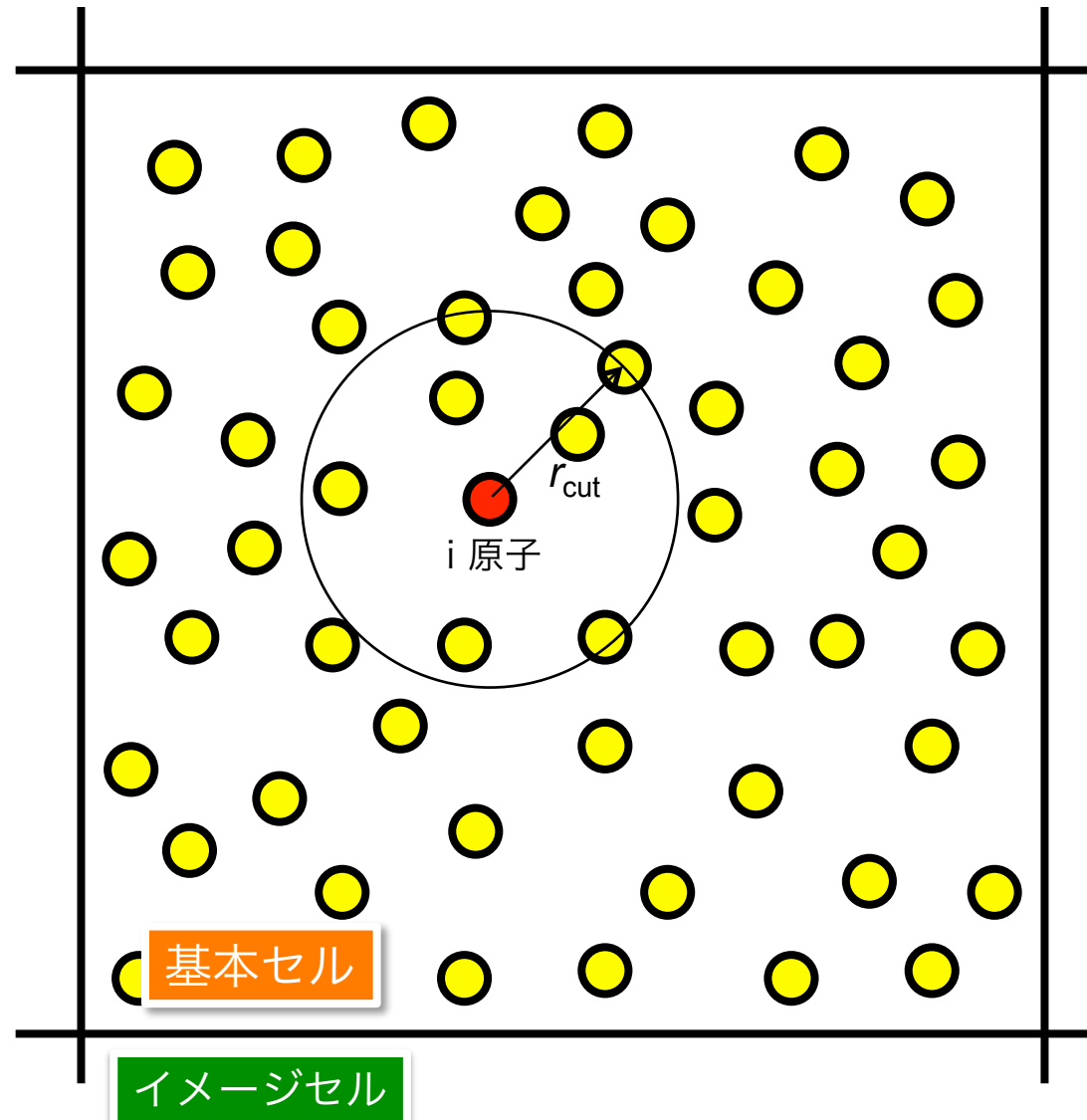
i ごと独立な演算
(粒度 N)

コーディングイメージ

```

do istep=1,Nstep
  do i=1, N
    ポテンシャルの計算
    力の計算
  enddo
  do i=1, N
    座標・速度更新
  enddo
  力学・熱力学量計算
enddo

```



分子動力学計算の並列化特性(2) プロセス分割

31 / 77

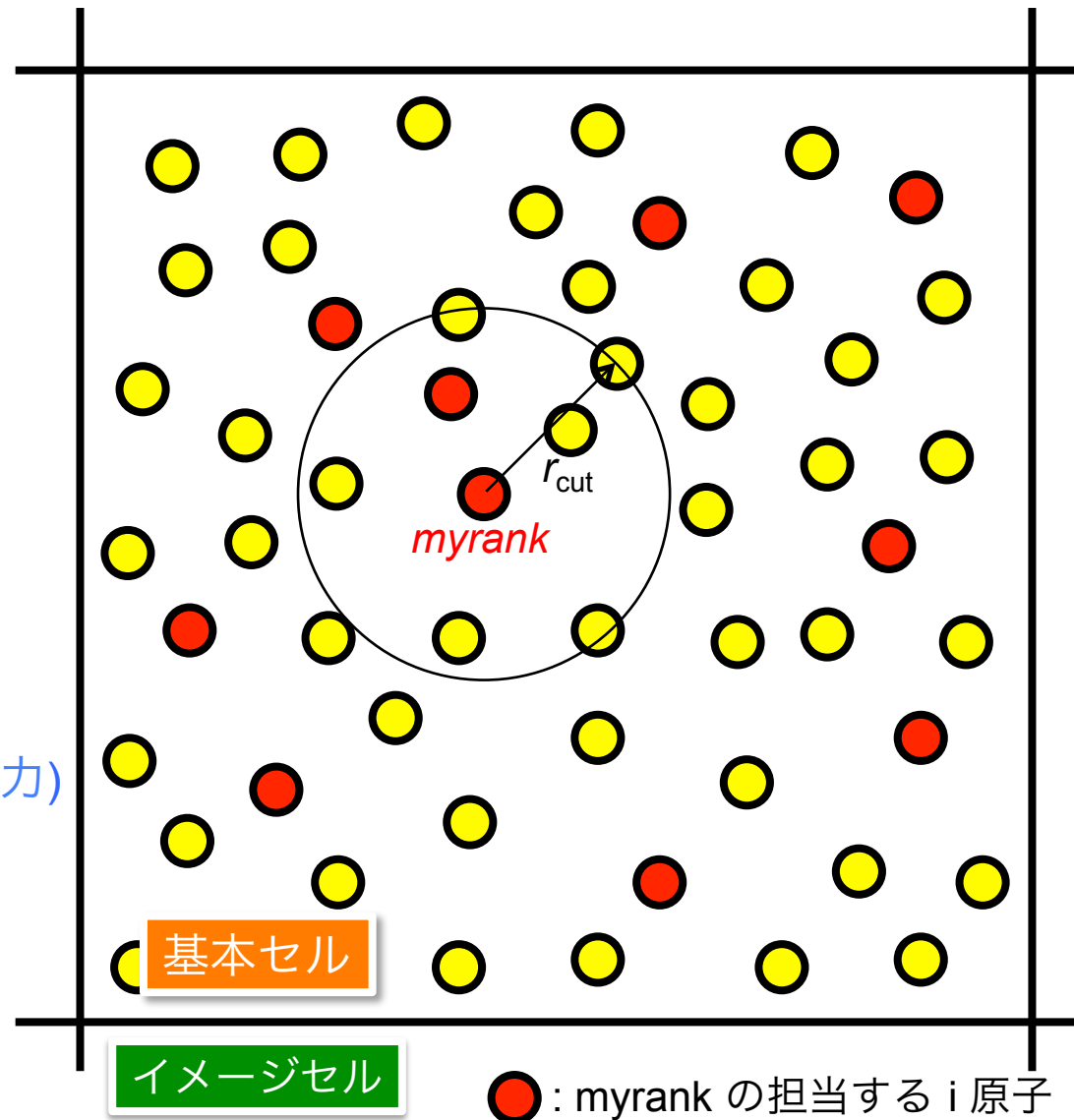
$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \mathbf{F}_i$$

i ごと独立な演算
(粒度 N)

最も単純な MPI 並列化:

```
do istep=1,Nstep
  do i=1+myrank, N, nprocs
    ポテンシャルの計算
    力の計算
  enddo
  call mpi_allreduce(ポテンシャル, 力)
  座標・速度更新
  力学・熱力学量計算
enddo
```

myrank : MPIプロセス番号 (0始まり)
nprocs : MPIプロセス数



分子動力学計算の並列化特性(2) プロセス分割

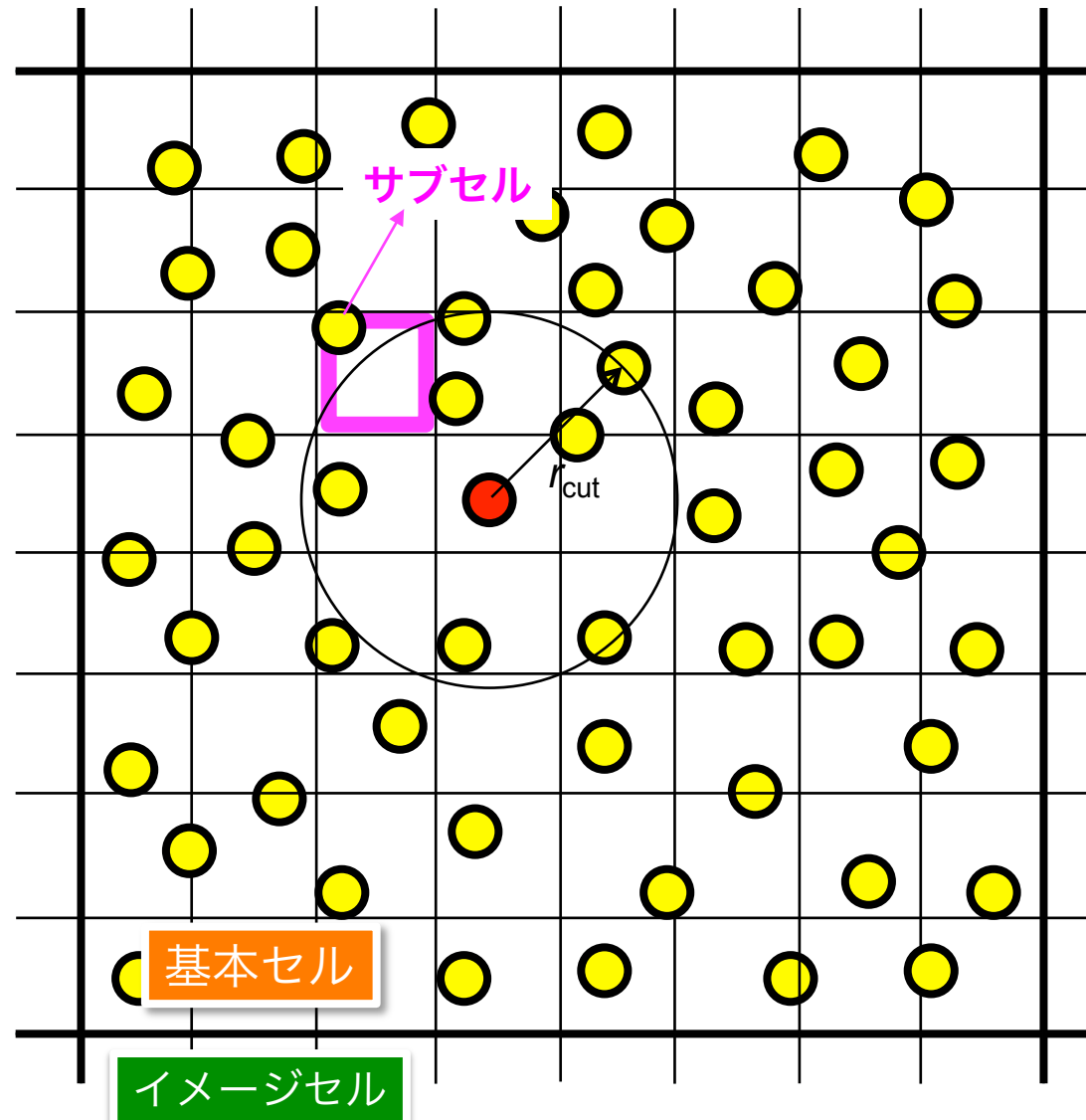
32 / 77

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \mathbf{F}_i$$

i ごと独立な演算
(粒度 N)

空間ドメイン分割による
MPI 並列化:

①基本セルを各辺にそって分割



分子動力学計算の並列化特性(2) プロセス分割

33 / 77

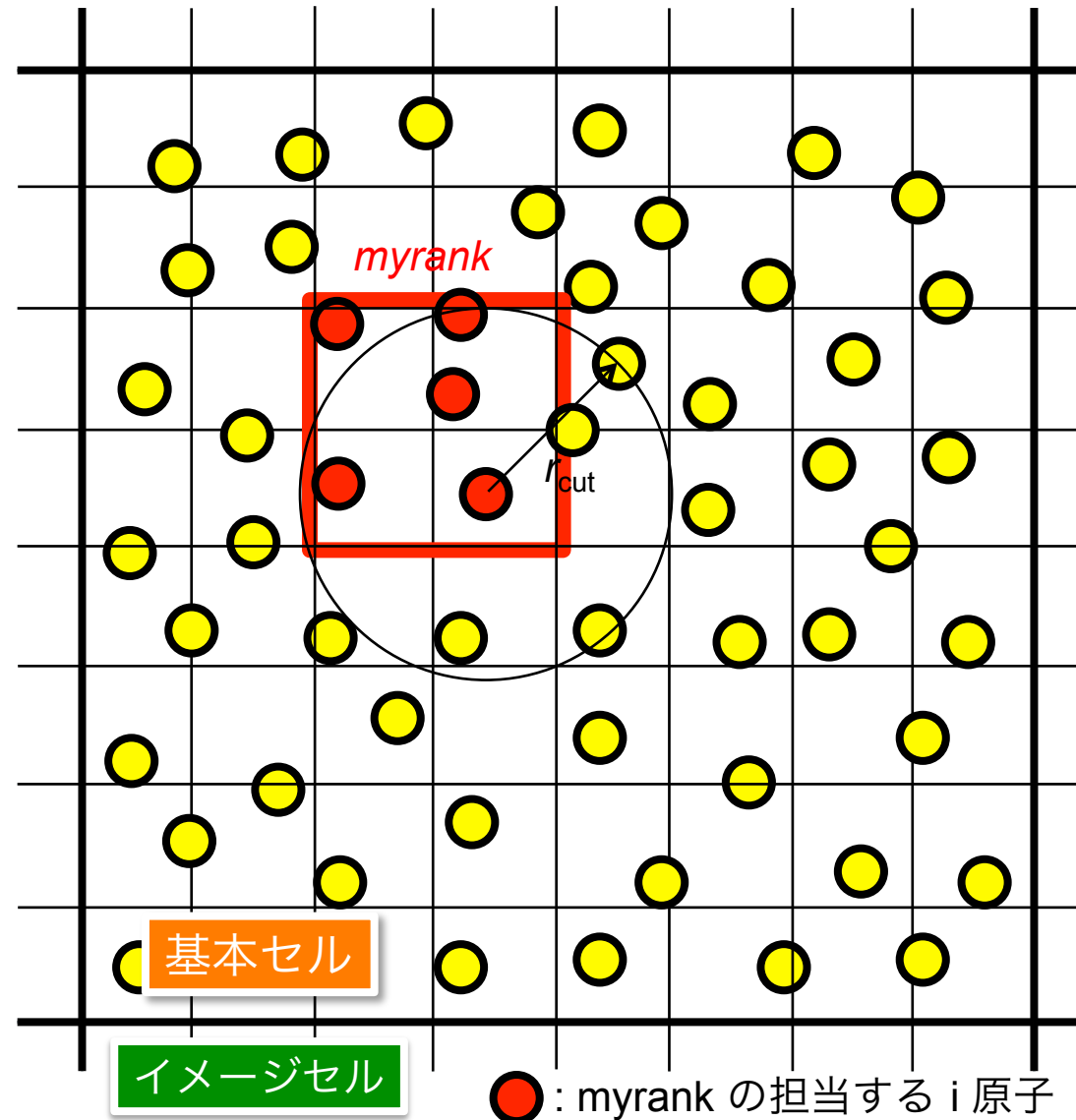
$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \mathbf{F}_i$$

i ごと独立な演算
(粒度 N)

空間ドメイン分割による MPI 並列化:

- ① 基本セルを各辺にそって分割
- ② 複数のサブセルを各プロセスに均等割り当て

例) プロセスあたり 4 サブセル



分子動力学計算の並列化特性(2) プロセス分割

34 / 77

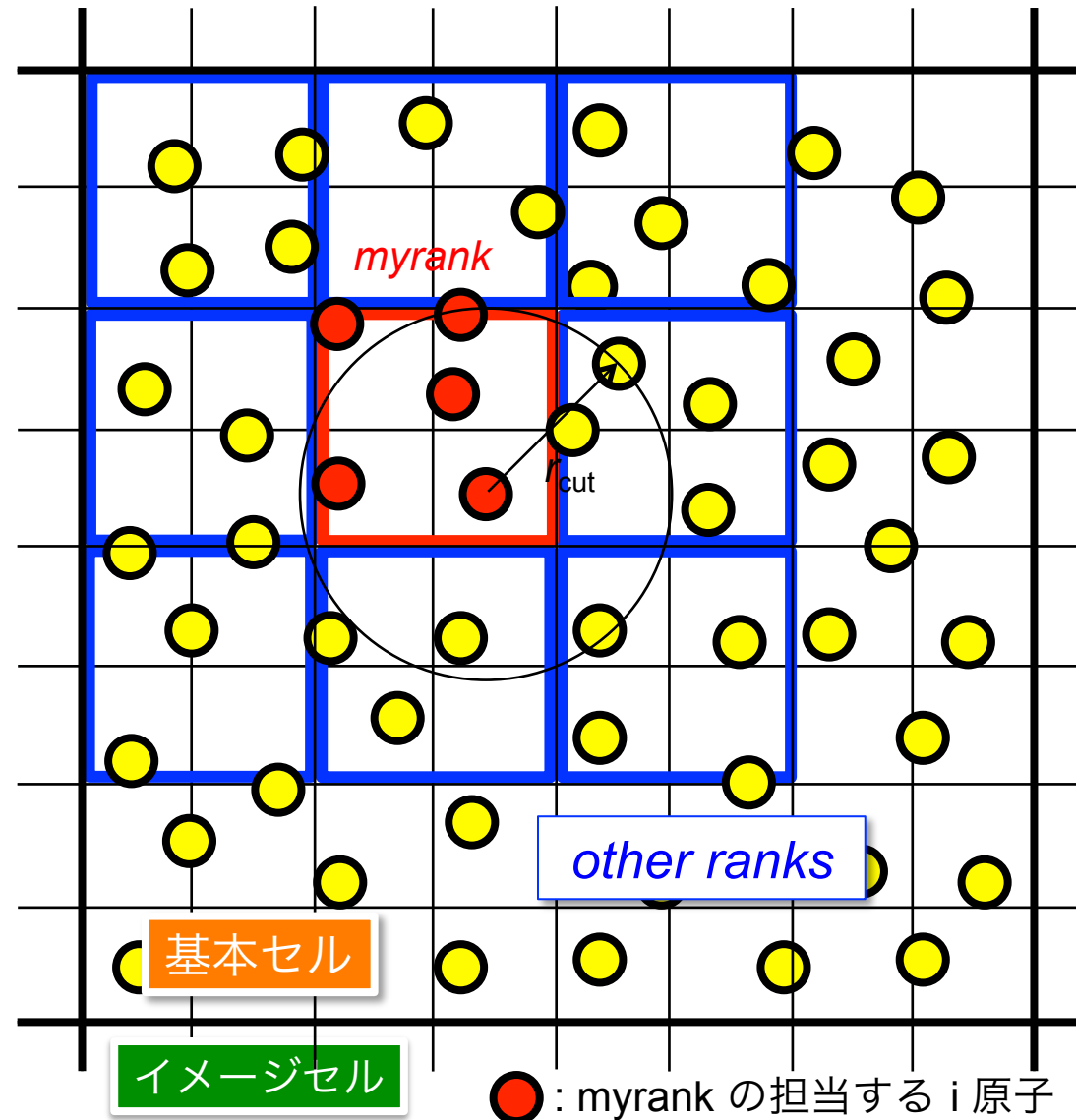
$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \mathbf{F}_i$$

i ごと独立な演算
(粒度 N)

空間ドメイン分割による MPI 並列化:

- ① 基本セルを各辺にそって分割
- ② 複数のサブセルを各プロセスに均等割り当て
- ③ **myrank** の所持するサブセル内原子と近傍 **other ranks** の所持するサブセル内原子との間で粒子対型の相互作用計算

例) プロセスあたり 4 サブセル



分子動力学計算の並列化特性(2) プロセス分割

35 / 77

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \mathbf{F}_i$$

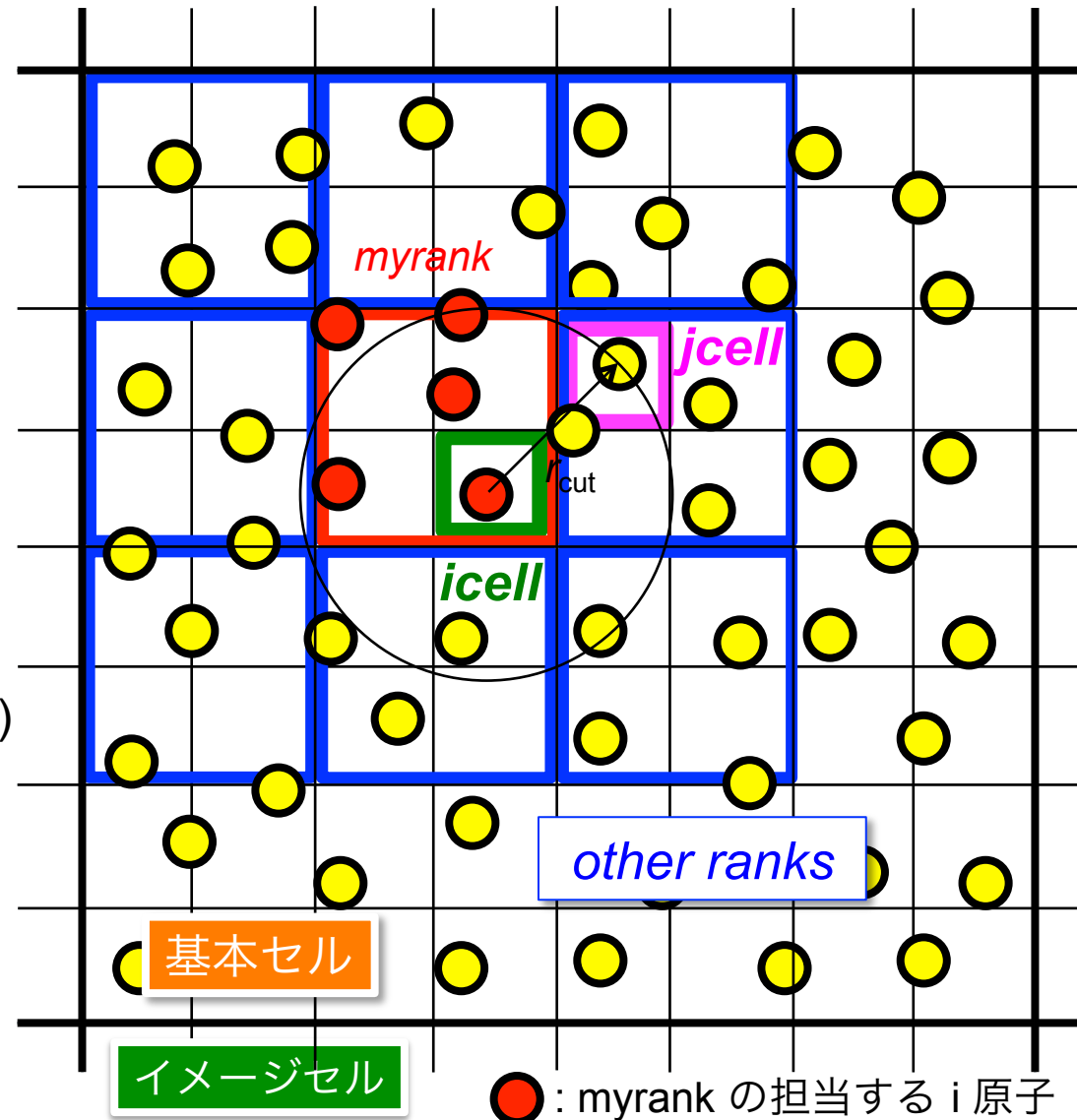
i ごと独立な演算
(粒度 N)

空間ドメイン分割による
MPI 並列化:

コーディングイメージ

```
do icell(myrank)
  do jcell_list(myrank or other ranks)
    ポテンシャルの計算
    力の計算
  enddo
  座標・速度更新 in myrank
  力学・熱力学量計算
enddo
```

例) プロセスあたり 4 サブセル



分子動力学計算の並列化特性(2) プロセス分割

36 / 77

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \mathbf{F}_i$$

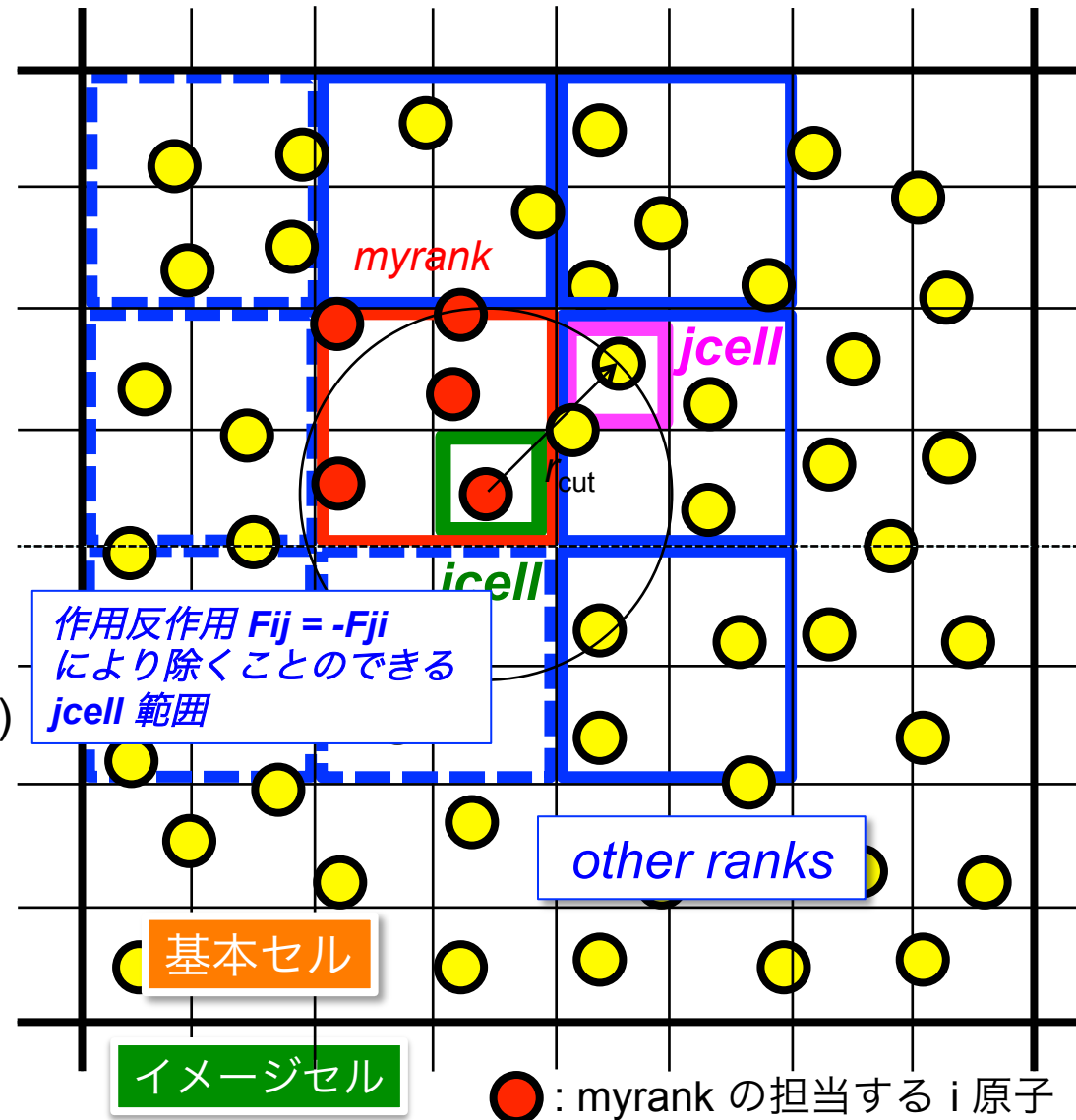
i ごと独立な演算
(粒度 N)

空間ドメイン分割による
MPI 並列化:

コーディングイメージ

```
do icell(myrank)
  do jcell_list(myrank or other ranks)
    ポテンシャルの計算
    力の計算
  enddo
  座標・速度更新 in myrank
  力学・熱力学量計算
enddo
```

例) プロセスあたり 4 サブセル

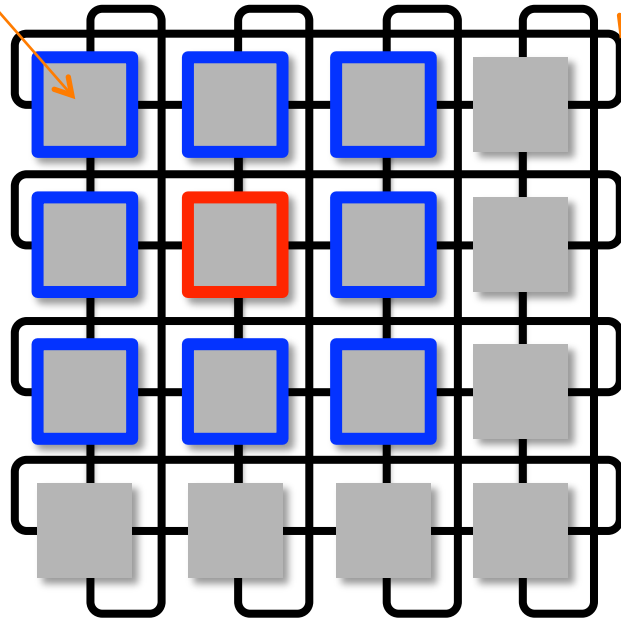


分子動力学計算の並列化特性(2) プロセス分割

37 / 77

計算機 (ノード)

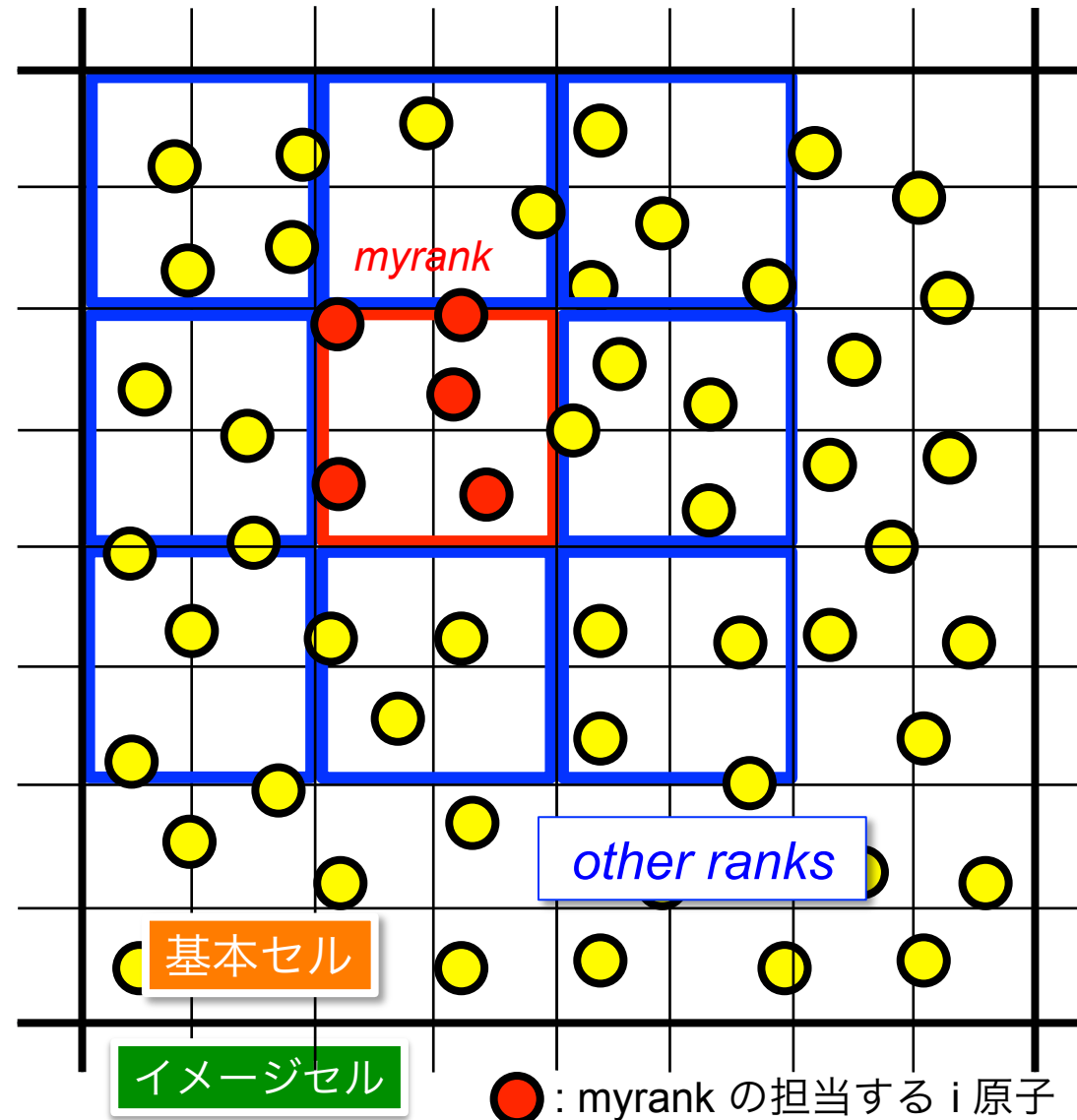
通信ケーブル



トーラスネットワーク

空間ドメイン分割による MPI 並列化:

ノード形状とプロセス形状とを一致させることを前提に、トーラスネットワークとの相性が非常に良い



分子動力学計算の並列化特性(3) 通信パターン

38 / 77



分子動力学計算の並列化特性(3) 通信パターン

39 / 77

例) プロセスあたり 4 サブセル

通信①(隣接)

分子内力, 分子間力の計算に必要な相手原子座標 r_j, r_k, r_l の通信.

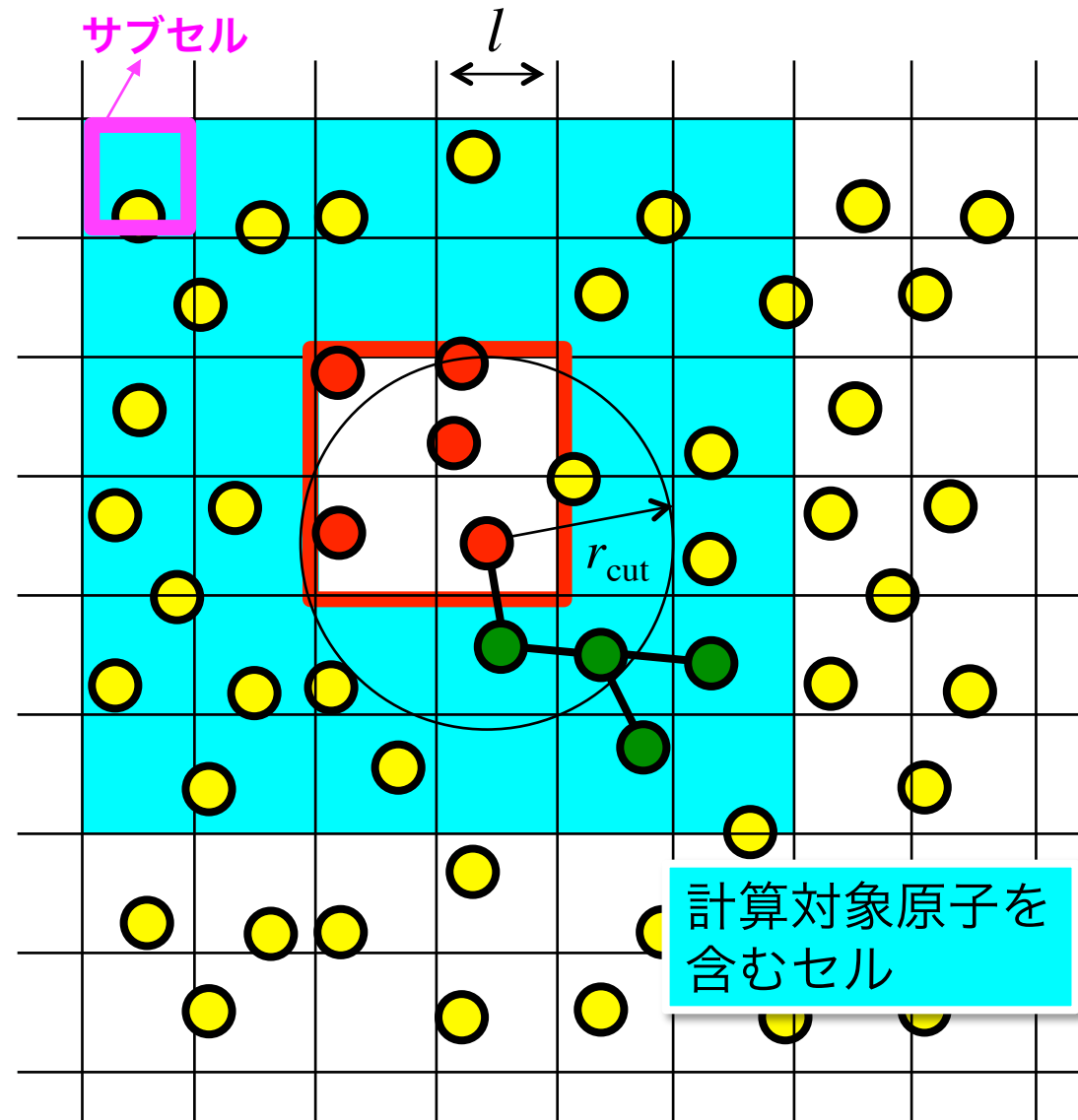
特徴:

- ・ 近傍プロセスとのみ通信
- ・ データサイズは小さい

例) 40 原子/サブセル では,
 $8 \text{ byte}(\text{real} \times 8) \times 3(\text{xyz}) \times 40$
 $= 1 \text{ KB/サブセル}$

注意点:

- ・ $r_{\text{cut}} \leq n \times l$ [今回の講義では $n=2$]
- ・ 分子内結合原子 (特に dihedral) を通信範囲内に収める



分子動力学計算の並列化特性(3) 通信パターン

40 / 77

通信①(隣接)

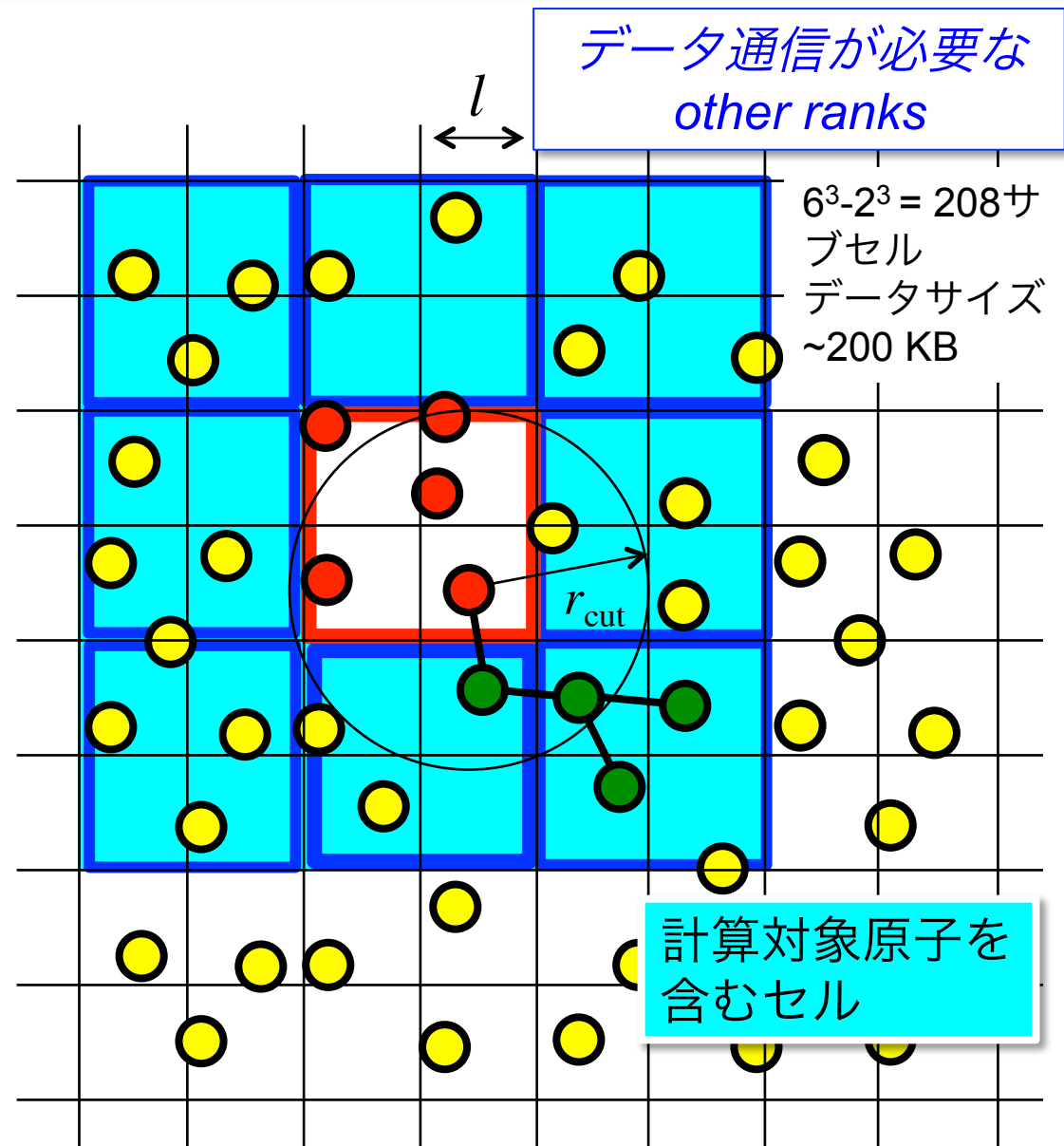
分子内力, 分子間力の計算に必要な相手原子座標 r_j, r_k, r_l の通信.

特徴:

- ・ 近傍プロセスとのみ通信
- ・ データサイズは小さい
例) 40 原子/サブセル では,
8 byte(real*8)*3(xyz)*40
= 1 KB/サブセル

注意点:

- ・ $r_{\text{cut}} \leq n * l$ [今回の講義では $n=2$]
- ・ 分子内結合原子 (特に dihedral) を通信範囲内に収める



分子動力学計算の並列化特性(3) 通信パターン

41 / 77

通信①(隣接)

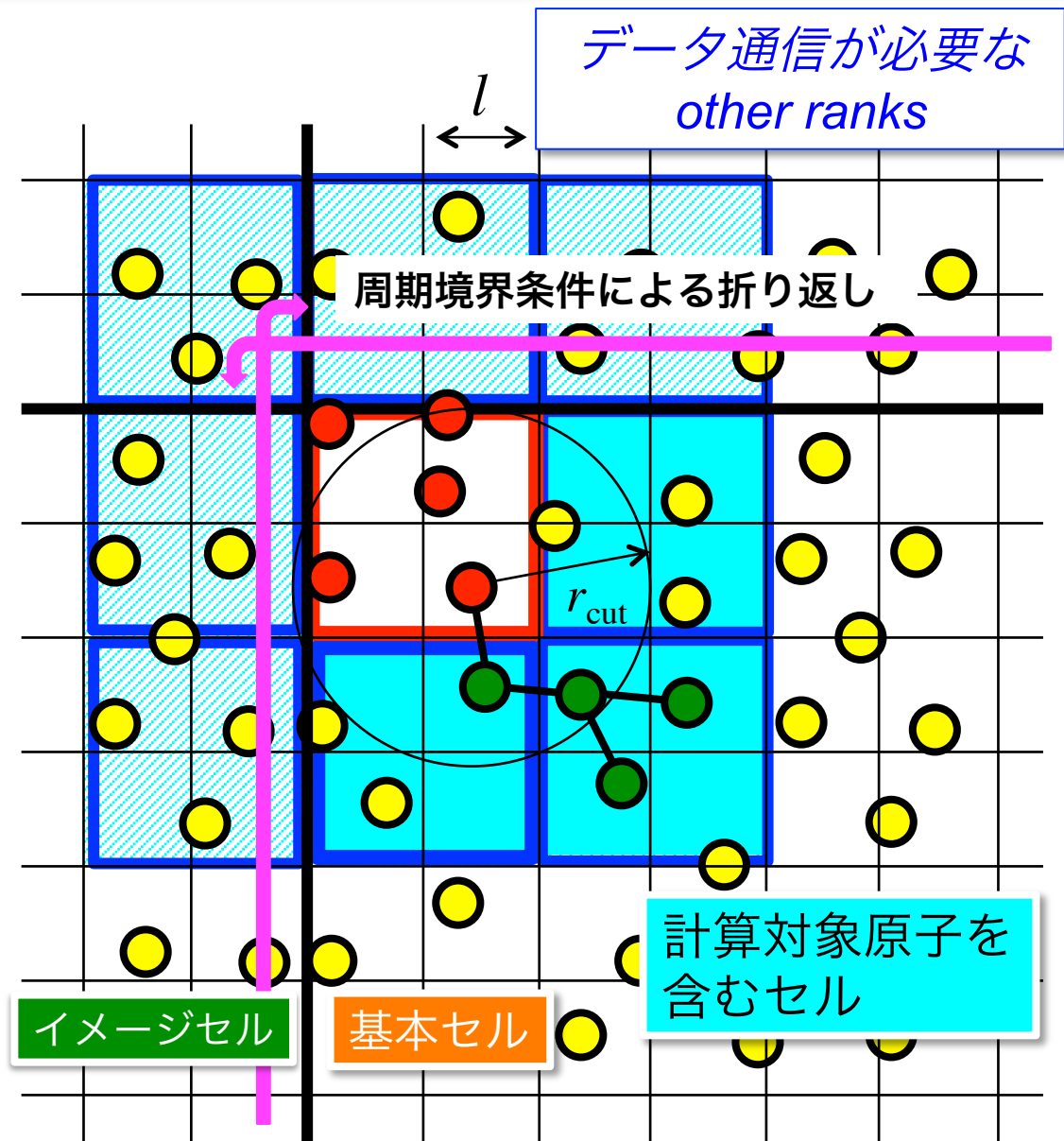
分子内力, 分子間力の計算に必要な相手原子座標 r_j, r_k, r_l の通信.

特徴:

- ・ 近傍プロセスとのみ通信
- ・ データサイズは小さい
例) 40 原子/サブセル では,
8 byte(real*8)*3(xyz)*40
= 1 KB/サブセル

注意点:

- ・ $r_{\text{cut}} \leq n * l$ [今回の講義では $n=2$]
- ・ 分子内結合原子 (特に dihedral) を通信範囲内に収める
- ・ 周期境界条件による折り返し



分子動力学計算の並列化特性(3) 通信パターン

42 / 77

レベル 0

通信②(隣接・近接)

多極子情報の通信

M2M: 周辺 8 スーパーセル

M2L : 周辺 875 スーパーセル

特徴:

- ・ 通信対象範囲が階層ごと異なる.
上位階層ほど遠方.

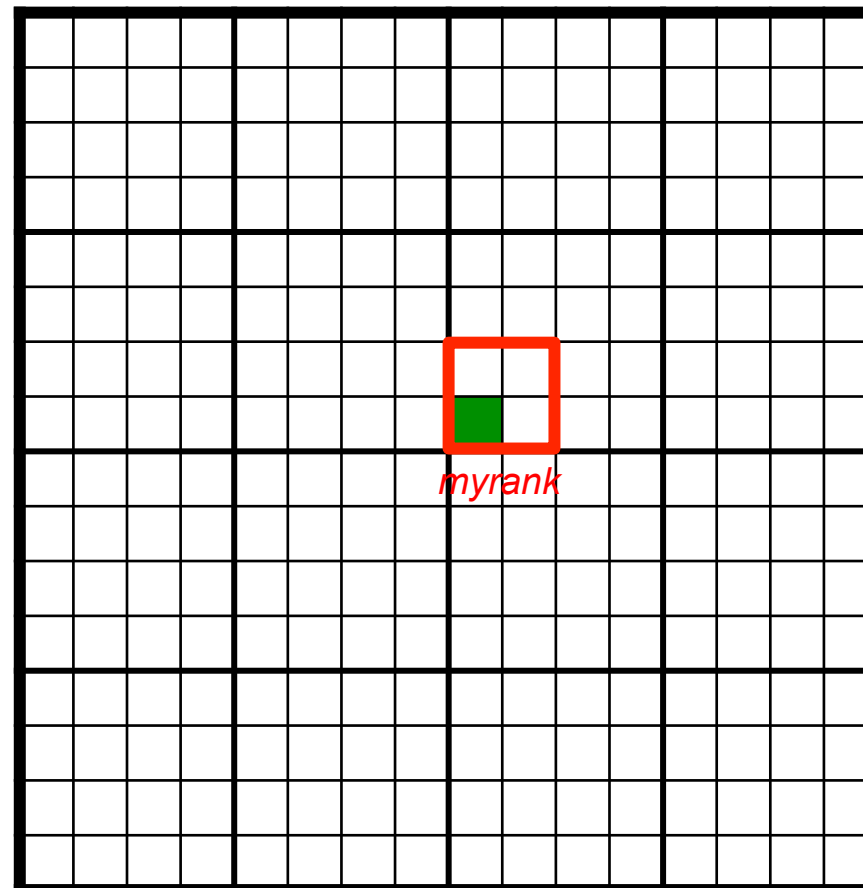
- ・ データサイズ

例) $n_{\max}=4$ では

$$16 \text{ byte}(\text{complex} * 8) * (4+1)^2$$

$$= 0.4 \text{ KB/スーパーセル}$$

$$\text{階層ごと } 875 * 0.4 \text{ KB} = 320 \text{ KB}$$



分子動力学計算の並列化特性(3) 通信パターン

43 / 77

レベル 0

通信②(隣接・近接)

多極子情報の通信

M2M: 周辺 8 スーパーセル

M2L : 周辺 875 スーパーセル

特徴:

- ・ 通信対象範囲が階層ごと異なる.
上位階層ほど遠方.

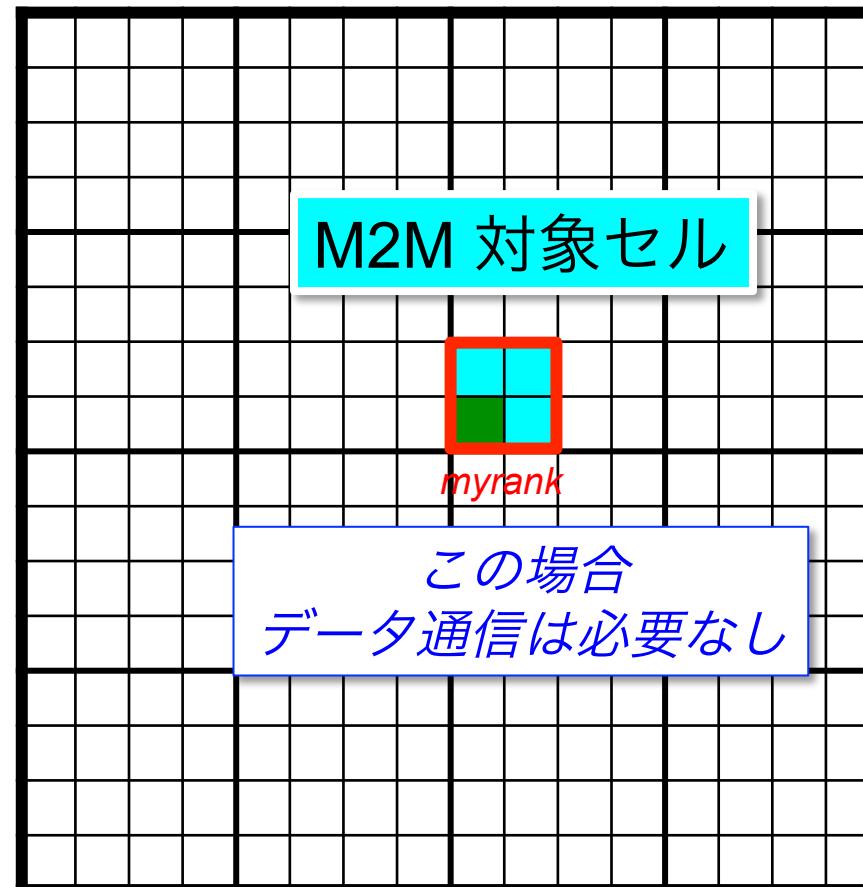
- ・ データサイズ

例) $n_{\max}=4$ では

$$16 \text{ byte}(\text{complex} * 8) * (4+1)^2$$

$$= 0.4 \text{ KB/スーパーセル}$$

$$\text{階層ごと } 875 * 0.4 \text{ KB} = 320 \text{ KB}$$



分子動力学計算の並列化特性(3) 通信パターン

44 / 77

通信②(隣接・近接)

多極子情報の通信

M2M: 周辺 8 スーパーセル

M2L : 周辺 875 スーパーセル

特徴:

- ・ 通信対象範囲が階層ごと異なる.
上位階層ほど遠方.

- ・ データサイズ

例) $n_{\max}=4$ では

$$16 \text{ byte}(\text{complex} * 8) * (4+1)^2$$

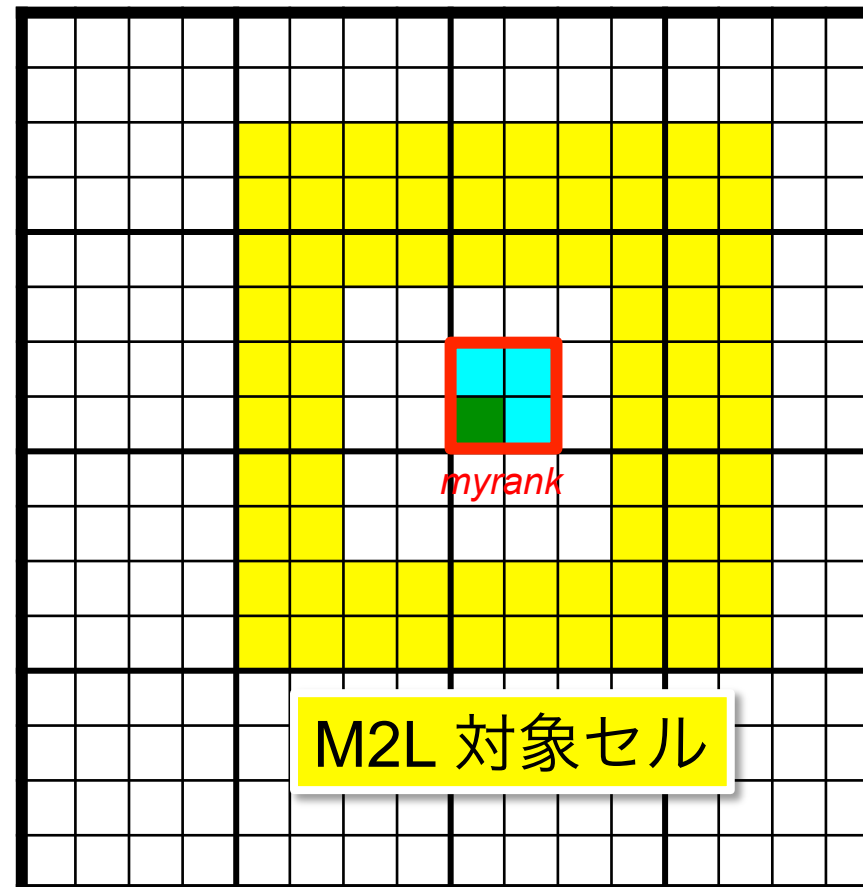
$$= 0.4 \text{ KB/スーパーセル}$$

$$\text{階層ごと } 875 * 0.4 \text{ KB} = 320 \text{ KB}$$

レベル 0

注意

プロセス内自セル位置
(0,0), (1,0), (0,1), (1,1)



分子動力学計算の並列化特性(3) 通信パターン

45 / 77

通信②(隣接・近接)

多極子情報の通信

M2M: 周辺 8 スーパーセル

M2L : 周辺 875 スーパーセル

特徴:

- ・ 通信対象範囲が階層ごと異なる.
上位階層ほど遠方.

- ・ データサイズ

例) $n_{\max}=4$ では

$$16 \text{ byte}(\text{complex} * 8) * (4+1)^2$$

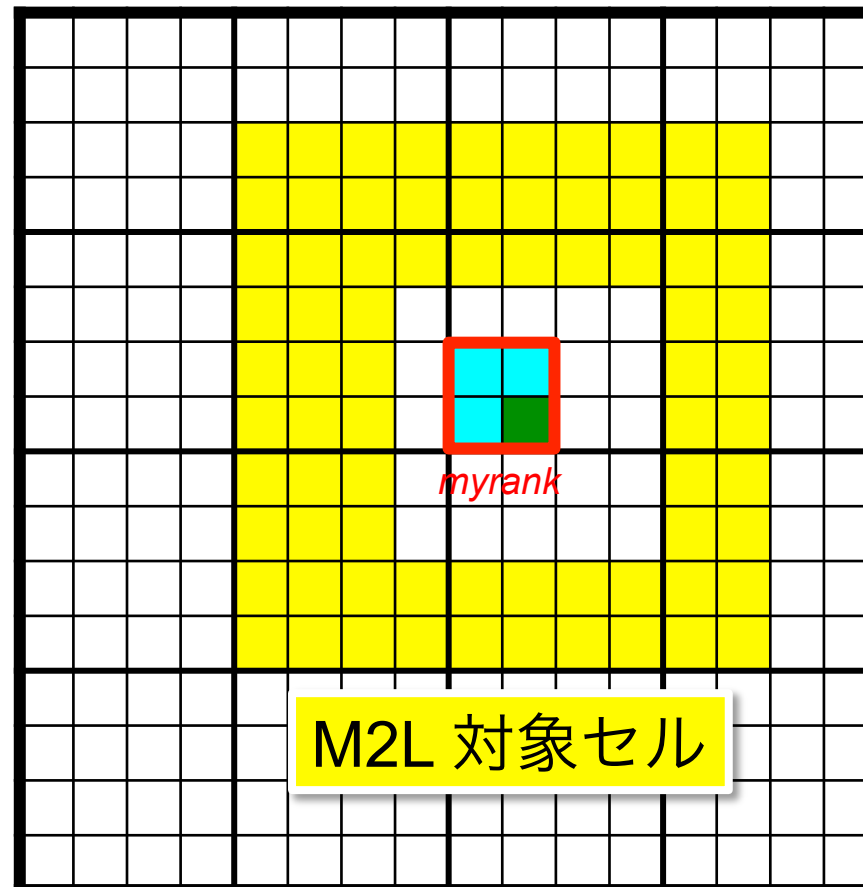
$$= 0.4 \text{ KB/スーパーセル}$$

$$\text{階層ごと } 875 * 0.4 \text{ KB} = 320 \text{ KB}$$

レベル 0

プロセス内自セル位置

(0,0), (1,0), (0,1), (1,1)



分子動力学計算の並列化特性(3) 通信パターン

46 / 77

通信②(隣接・近接)

多極子情報の通信

M2M: 周辺 8 スーパーセル

M2L : 周辺 875 スーパーセル

特徴:

- ・ 通信対象範囲が階層ごと異なる.
上位階層ほど遠方.

- ・ データサイズ

例) $n_{\max}=4$ では

$$16 \text{ byte}(\text{complex} * 8) * (4+1)^2$$

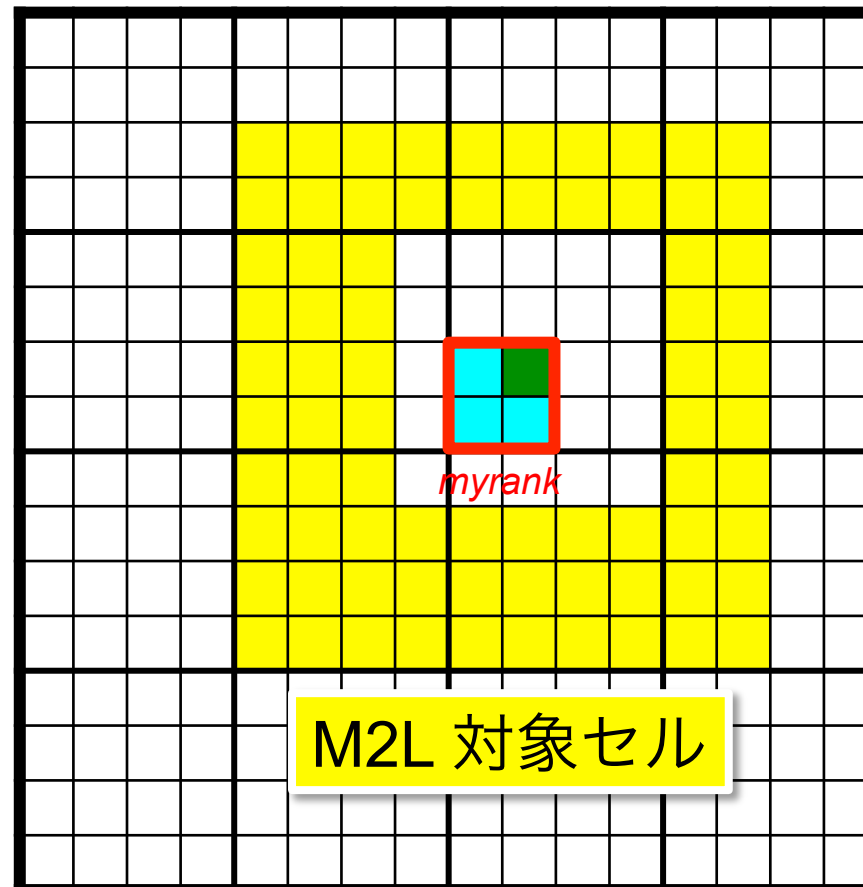
$$= 0.4 \text{ KB/スーパーセル}$$

$$\text{階層ごと } 875 * 0.4 \text{ KB} = 320 \text{ KB}$$

レベル 0

プロセス内自セル位置

(0,0), (1,0), (0,1), (1,1)



分子動力学計算の並列化特性(3) 通信パターン

47 / 77

通信②(隣接・近接)

多極子情報の通信

M2M: 周辺 8 スーパーセル

M2L : 周辺 875 スーパーセル

特徴:

- ・ 通信対象範囲が階層ごと異なる.
上位階層ほど遠方.

- ・ データサイズ

例) $n_{\max}=4$ では

$$16 \text{ byte}(\text{complex} * 8) * (4+1)^2$$

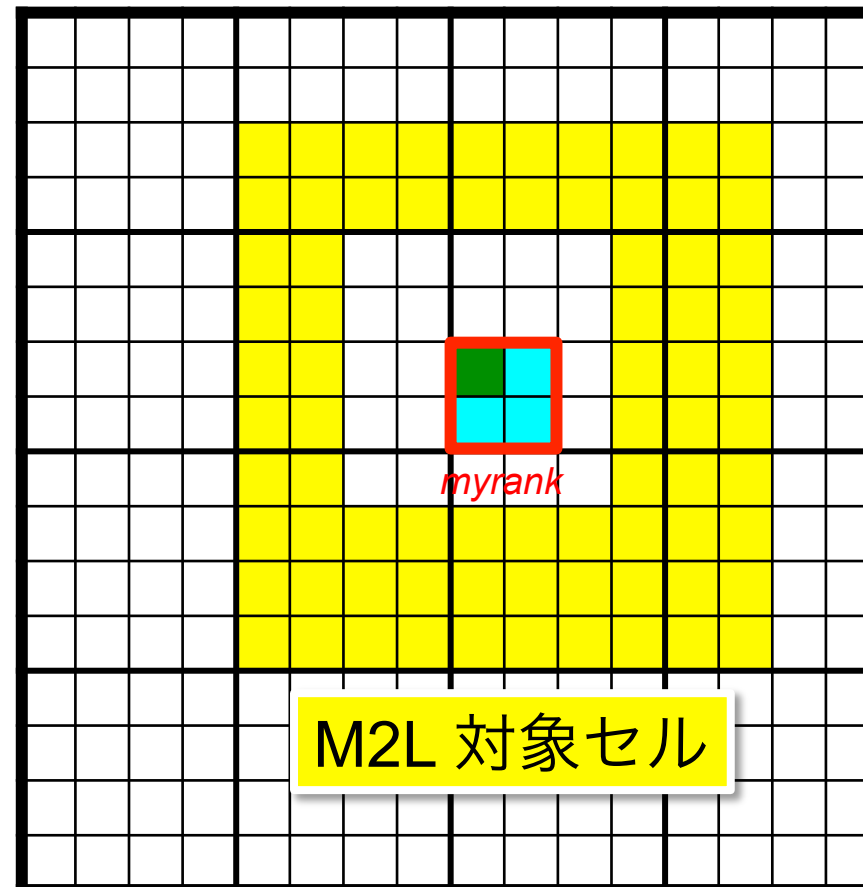
$$= 0.4 \text{ KB/スーパーセル}$$

$$\text{階層ごと } 875 * 0.4 \text{ KB} = 320 \text{ KB}$$

レベル 0

プロセス内自セル位置

(0,0), (1,0), (0,1), (1,1)



分子動力学計算の並列化特性(3) 通信パターン

48 / 77

通信②(隣接・近接)

多極子情報の通信

M2M: 周辺 8 スーパーセル

M2L : 周辺 875 スーパーセル

特徴:

- ・ 通信対象範囲が階層ごと異なる.
上位階層ほど遠方.

- ・ データサイズ

例) $n_{\max}=4$ では

$$16 \text{ byte}(\text{complex} * 8) * (4+1)^2$$

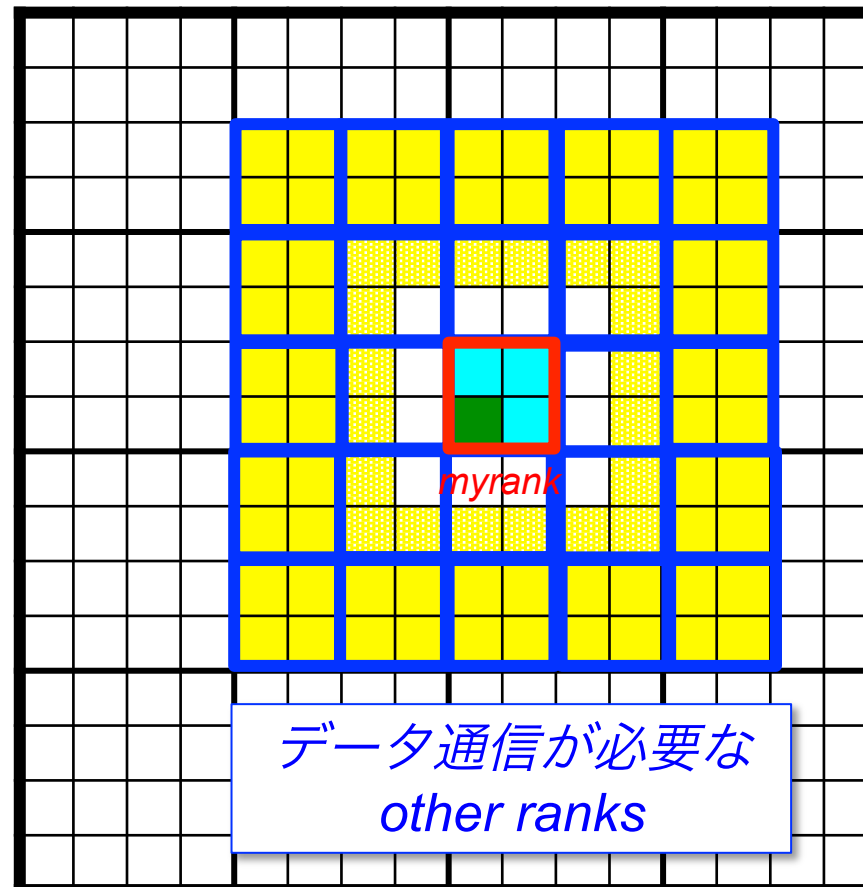
$$= 0.4 \text{ KB/スーパーセル}$$

$$\text{階層ごと } 875 * 0.4 \text{ KB} = 320 \text{ KB}$$

レベル 0

プロセス内自セル位置

(0,0), (1,0), (0,1), (1,1)



分子動力学計算の並列化特性(3) 通信パターン

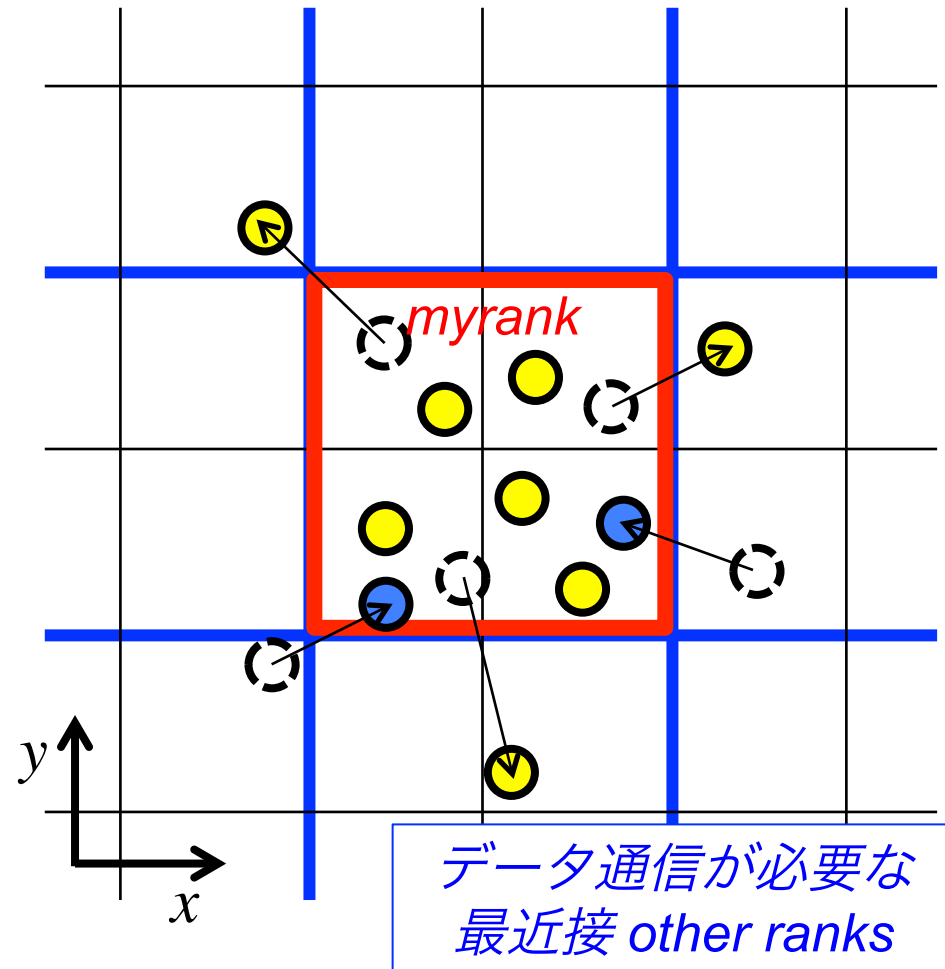
49 / 77

通信③(隣接)

運動方程式の数値積分の結果, 原子が移動. これを各プロセスに再帰属させるための座標通信.

特徴:

- ・ 最近接 $3^3-1=26$ プロセスと通信
- ・ データサイズは非常に小さい
- ・ myrank から出る粒子, myrank に入ってくる粒子, 両方ある



分子動力学計算の並列化特性(3) 通信パターン

50 / 77

通信③(隣接)

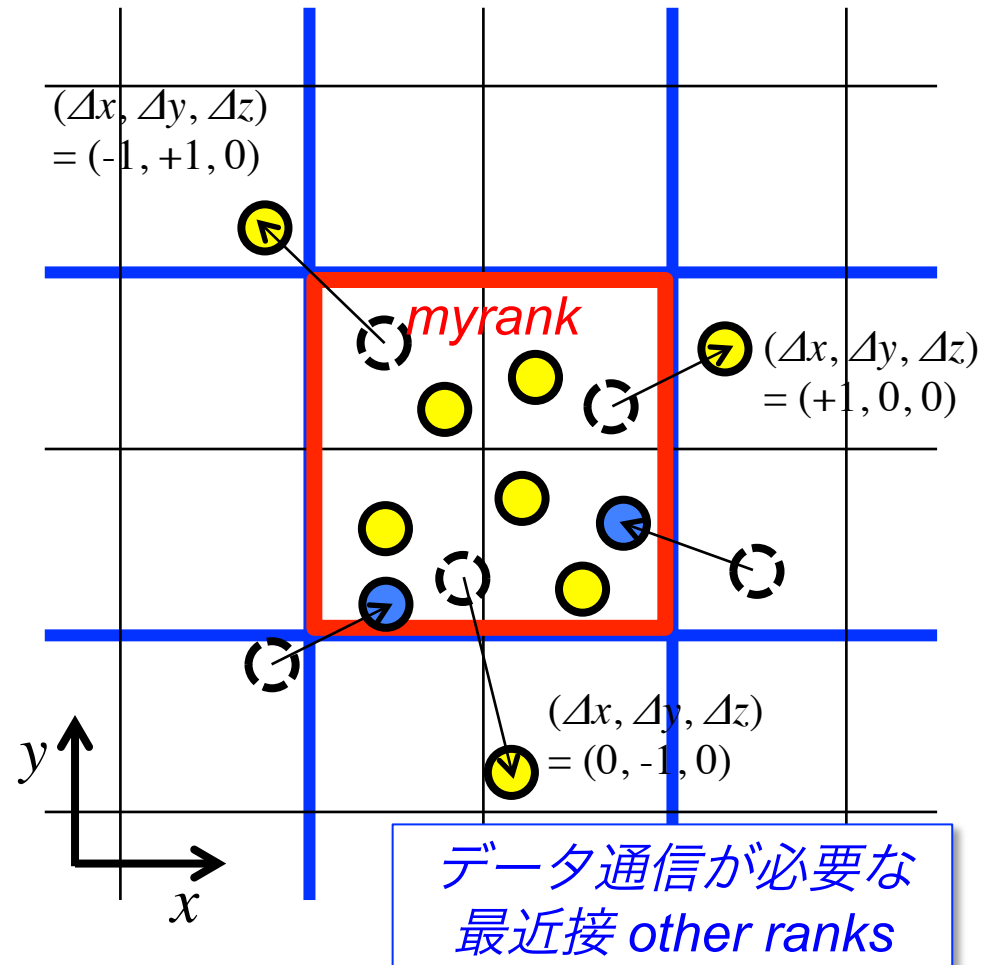
運動方程式の数値積分の結果, 原子が移動. これを各プロセスに再帰属させるための座標通信.

特徴:

- ・ 最近接 $3^3-1=26$ プロセスと通信
- ・ データサイズは非常に小さい
- ・ myrank から出る粒子, myrank に入ってくる粒子, 両方ある

注意点:

- ・ x, y, z 軸方向への移動に加え, 斜め方向への移動が発生



分子動力学計算の並列化特性(3) 通信パターン

51 / 77

通信③(隣接)

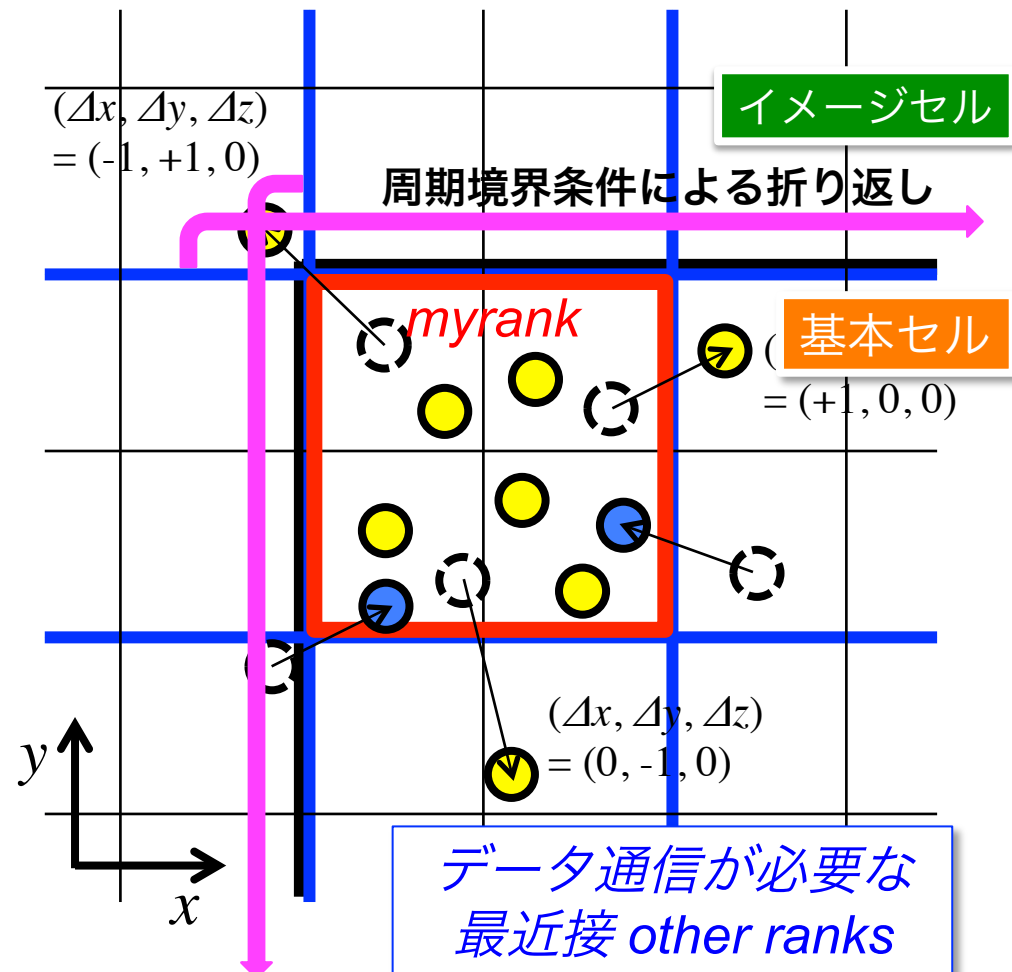
運動方程式の数値積分の結果, 原子が移動. これを各プロセスに再帰属させるための座標通信.

特徴:

- ・ 最近接 $3^3-1=26$ プロセスと通信
- ・ データサイズは非常に小さい
- ・ myrank から出る粒子, myrank に入ってくる粒子, 両方ある

注意点:

- ・ x, y, z 軸方向への移動に加え, 斜め方向への移動が発生
- ・ 周期境界条件による折り返し



分子動力学計算の並列化特性(3) 通信パターン

52 / 77

通信④(全ノード間・総和型)

系全体での量（ハミルトニアン, 温度, 圧力など）を計算するための通信

特徴:

- ・ データサイズは, real*8 の1変数
- ・ 全プロセス間で総和をとる (allreduce)

→ハードウェア機能の利用で高速化

例えば, 京の TBI (Tofu barrier interface)

~10,000ノード reduce 演算 10 μ s

安島ら, FUJITSU. 63, 3, p. 260-264(05, 2012)

例) 運動エネルギー

$$K = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} m_i v_i^2 = \sum_{k=1}^{nprocs} \boxed{\sum_{i=1}^{N_k} \frac{1}{2} m_i v_i^2}$$

kene プロセスごとの和
wk_kene

```
call mpi_allreduce(wk_kene,kene,1,
  mpi_double_precision,mpi_sum,
  mpi_comm_world,ierr)
```

分子動力学計算の並列化特性(3) 通信パターン

53 / 77

通信④(全ノード間・総和型)

系全体での量（ハミルトニアン, 温度, 圧力など）を計算するための通信

特徴:

- ・ データサイズは, real*8 の1変数
- ・ 全プロセス間で総和をとる (allreduce)

→ハードウェア機能の利用で高速化

例えば, 京の TBI (Tofu barrier interface)

~10,000ノード reduce 演算 10 μ s

安島ら, FUJITSU. 63, 3, p. 260-264(05, 2012)

注意点:

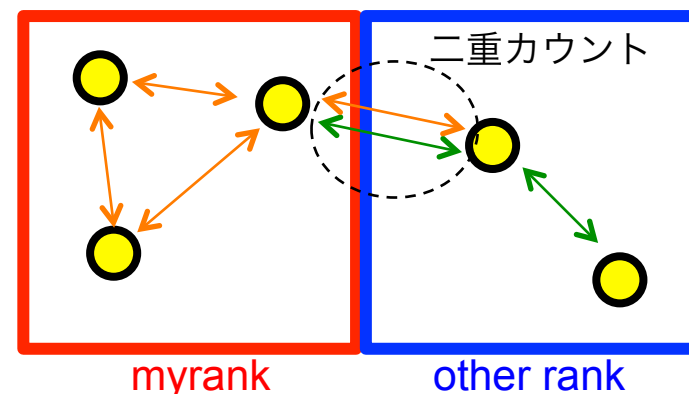
- ・ rank 間での二重カウント
特にポテンシャルエネルギーとビリアル

例) 運動エネルギー

$$K = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} m_i v_i^2 = \sum_{k=1}^{nprocs} \boxed{\sum_{i=1}^{N_k} \frac{1}{2} m_i v_i^2}$$

kene プロセスごとの和
wk_kene

```
call mpi_allreduce(wk_kene,kene,1,
  mpi_double_precision,mpi_sum,
  mpi_comm_world,ierr)
```



目次

- 分子動力学 (MD) 法
- 分子動力学計算の並列化特性
- 並列化技術 1 データ構造
- 並列化技術 2 MPI
- 並列化技術 3 OpenMP, SIMD

第一回

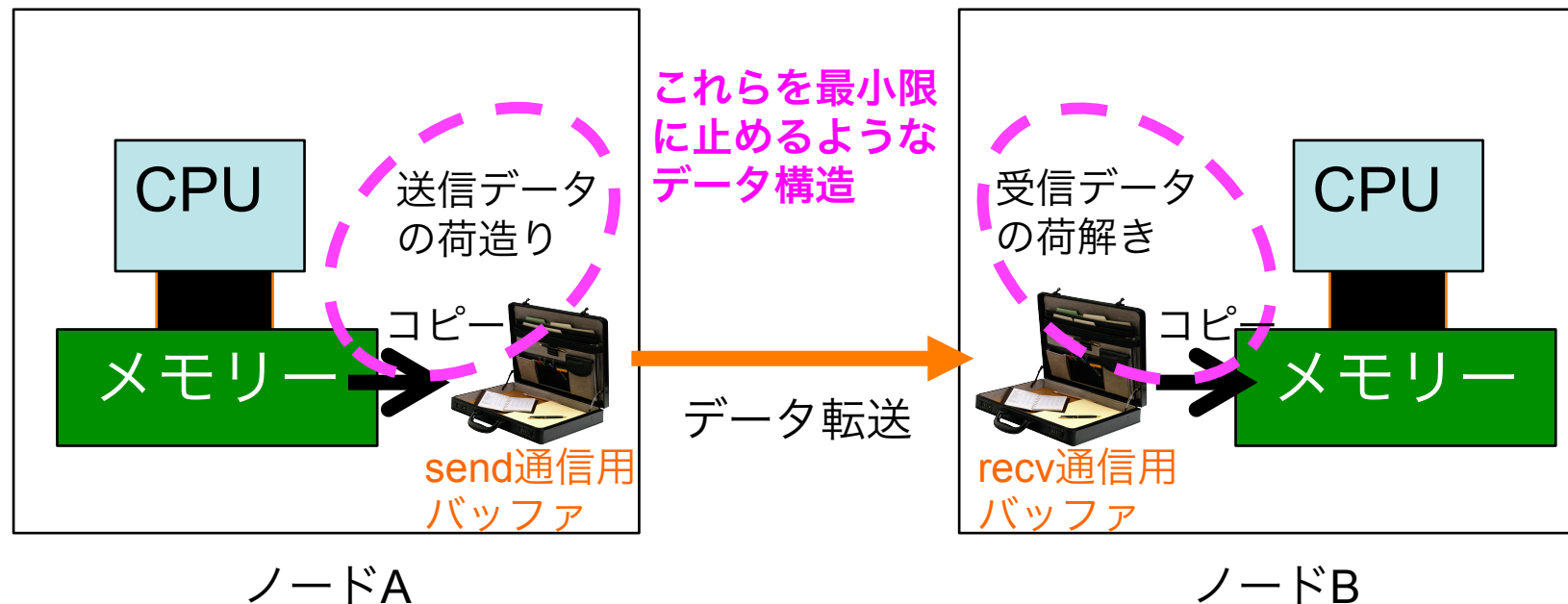
第二回

MPI 並列化技術: データ構造

データ構造: MPI 並列性能 (および演算性能) に直結

MD 計算のように 1 サイクル当たりの経過時間が小さい [$\leq O(10^{-3} \text{ sec})$] 場合に特に重要.

システムが大規模・複雑化する将来, アプリによらず重要になる.

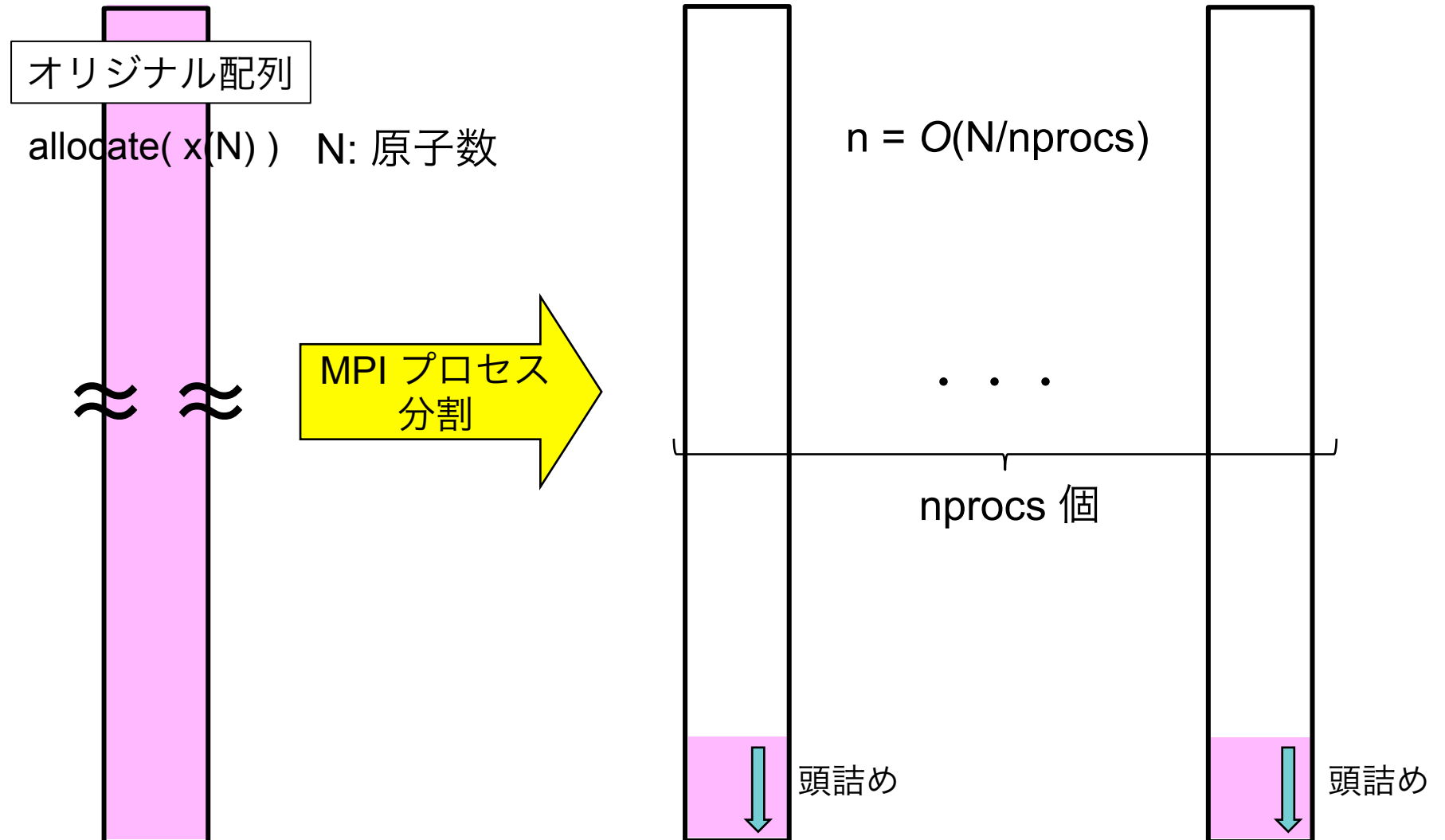


- [理想] プログラムを書く前に, ネットワーク構造に最適なデータ構造を考案する
- [現実] 途中で問題に直面して, 既存のプログラムを1から書き直す

MPI 並列化技術: データ構造 [1] 座標

56 / 77

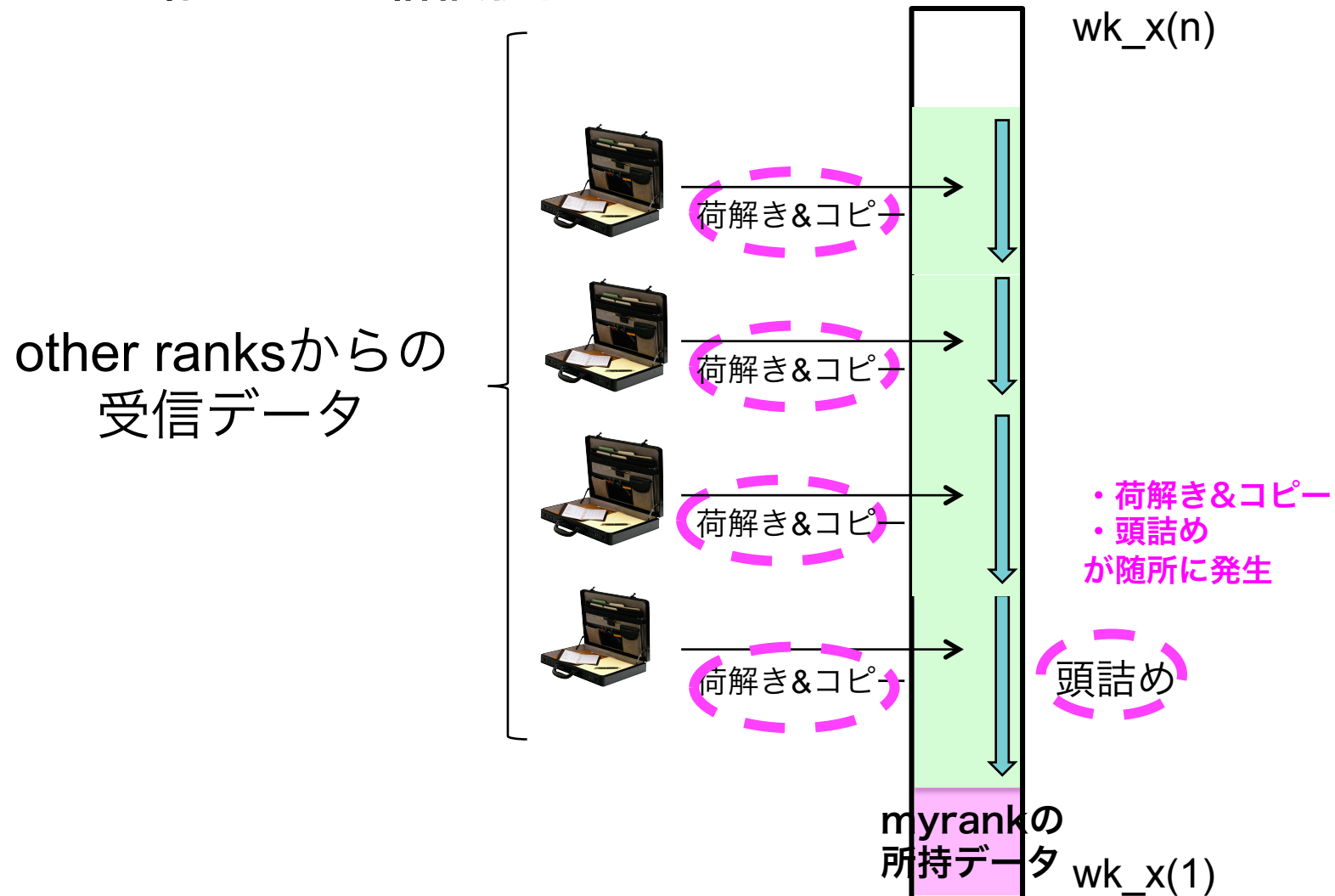
通常 of データ構造



MPI 並列化技術: データ構造 [1] 座標

57 / 77

通常のデータ構造を用いた際の
転送された座標データの格納形態



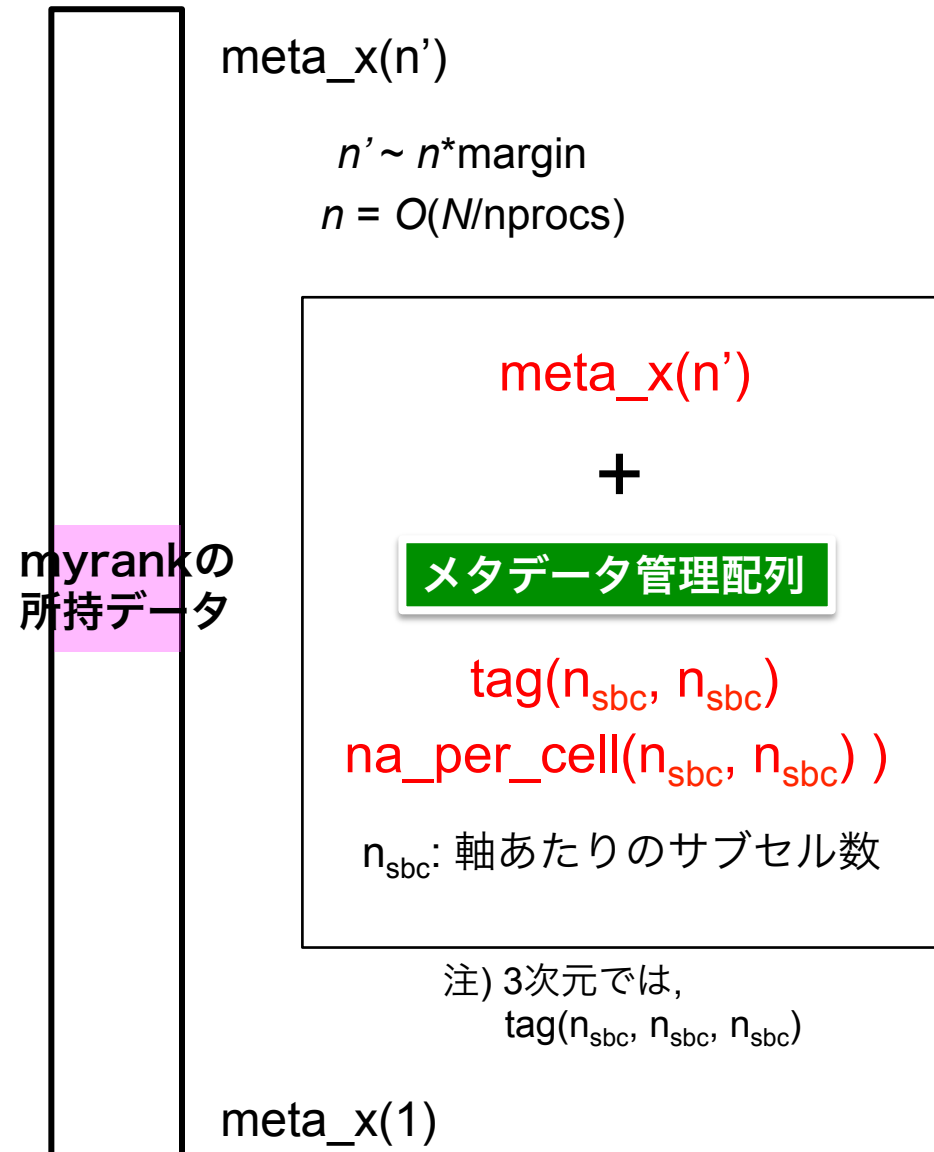
MPI 並列化技術: データ構造 [1] 座標

58 / 77

新しく考案した座標のデータ構造: **メタデータ構造**

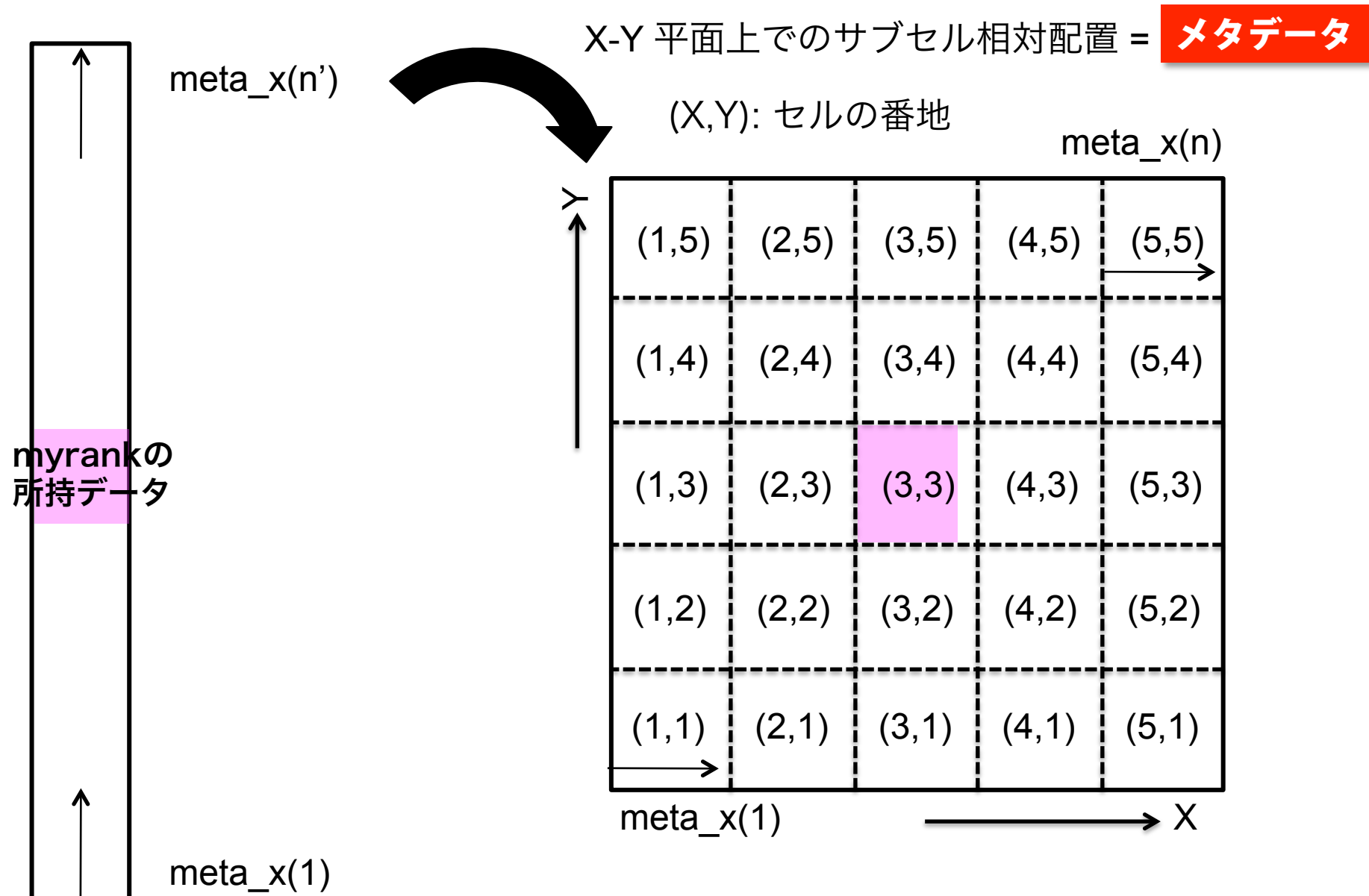
メタデータ: あるデータに
関連する補助的な情報

ここでは,
あるデータ: 原子座標
関連する情報: 原子の所属するサブ
セルの相対的な空間配置



MPI 並列化技術: データ構造 [1] 座標

59 / 77



MPI 並列化技術: データ構造 [1] 座標

60 / 77

メタデータ構造

メタデータ管理配列

サブセルの先頭原子番号:

$\text{tag}(1:5, 1:5)$

サブセルの格納原子数:

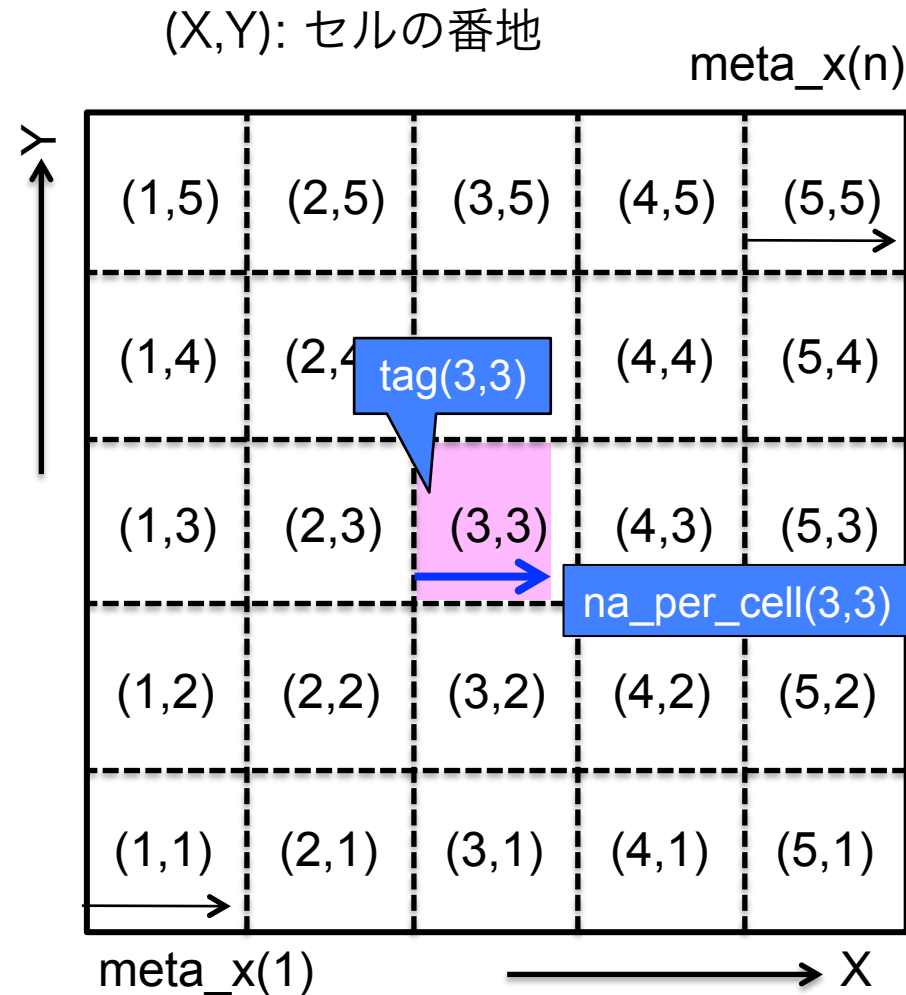
$\text{na_per_cell}(1:5, 1:5)$

データへのアクセス方法

myrank所持データ:

$\text{tag}(3,3) \sim$

$\text{tag}(3,3) + \text{na_per_cell}(3,3) - 1$

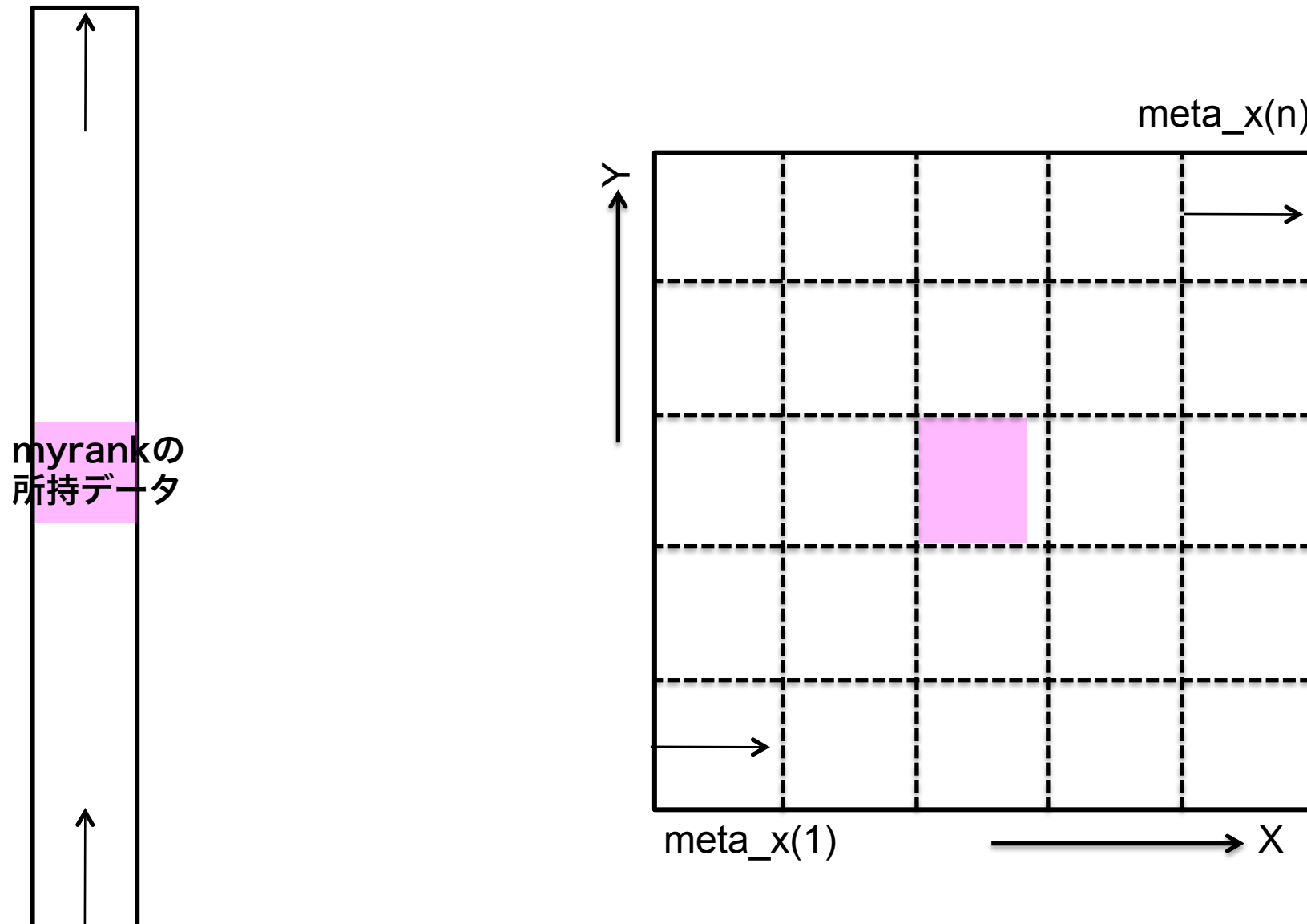


MPI 並列化技術: データ構造 [1] 座標

61 / 77

転送された座標データの格納形態

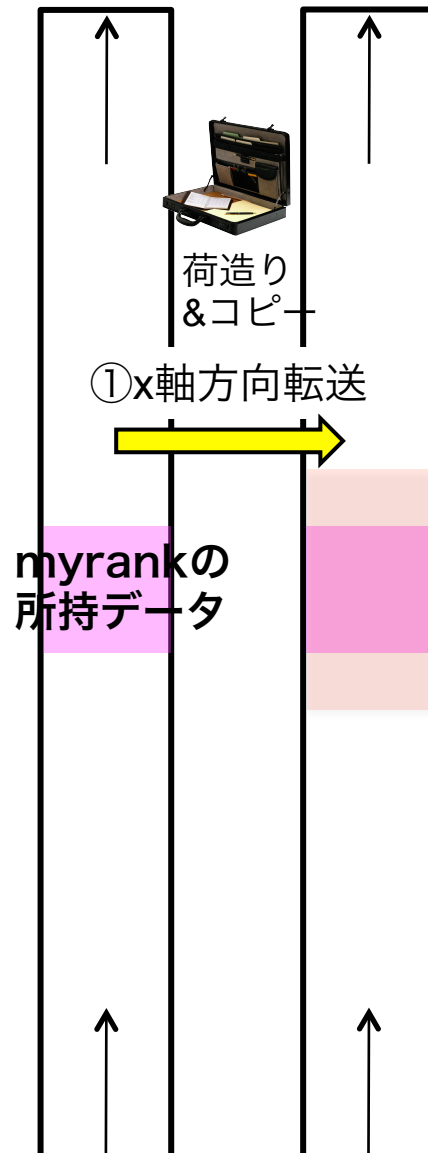
メタデータ構造



MPI 並列化技術: データ構造 [1] 座標

62 / 77

転送された座標データの格納形態

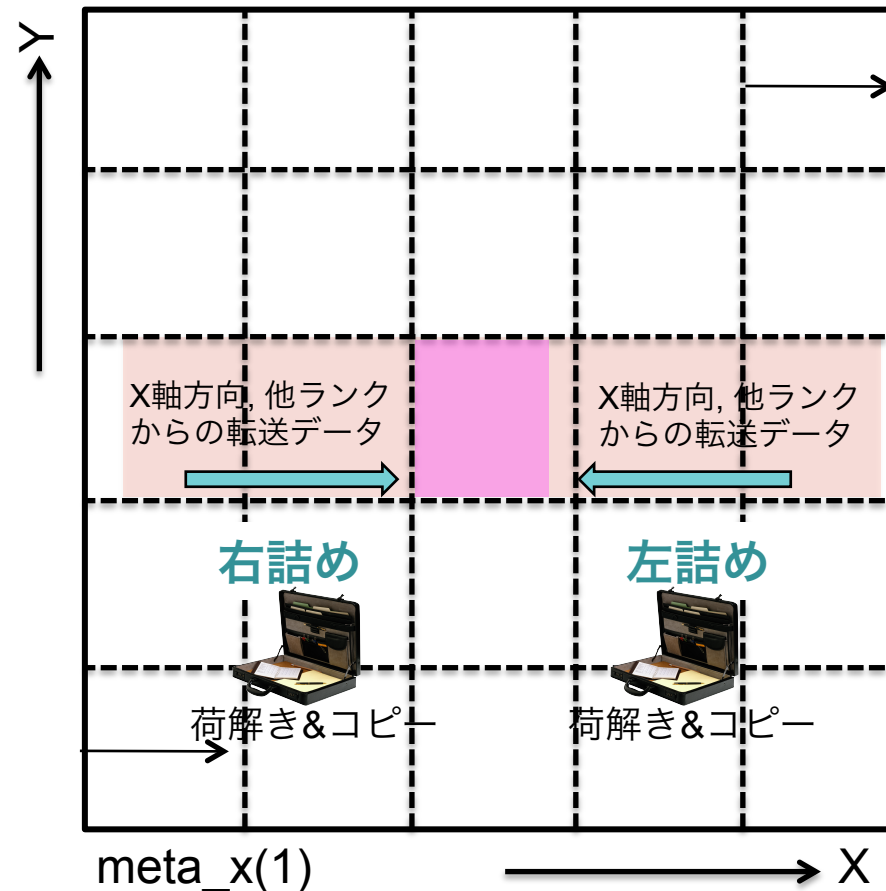


最初の ①x軸方向通信 においては, x軸に沿ったデータ連続性を実現するために

- ・ 荷解き&コピー
- ・ 右詰め, 左詰め

が発生. 左右の余白は原子数のばらつきを吸収.

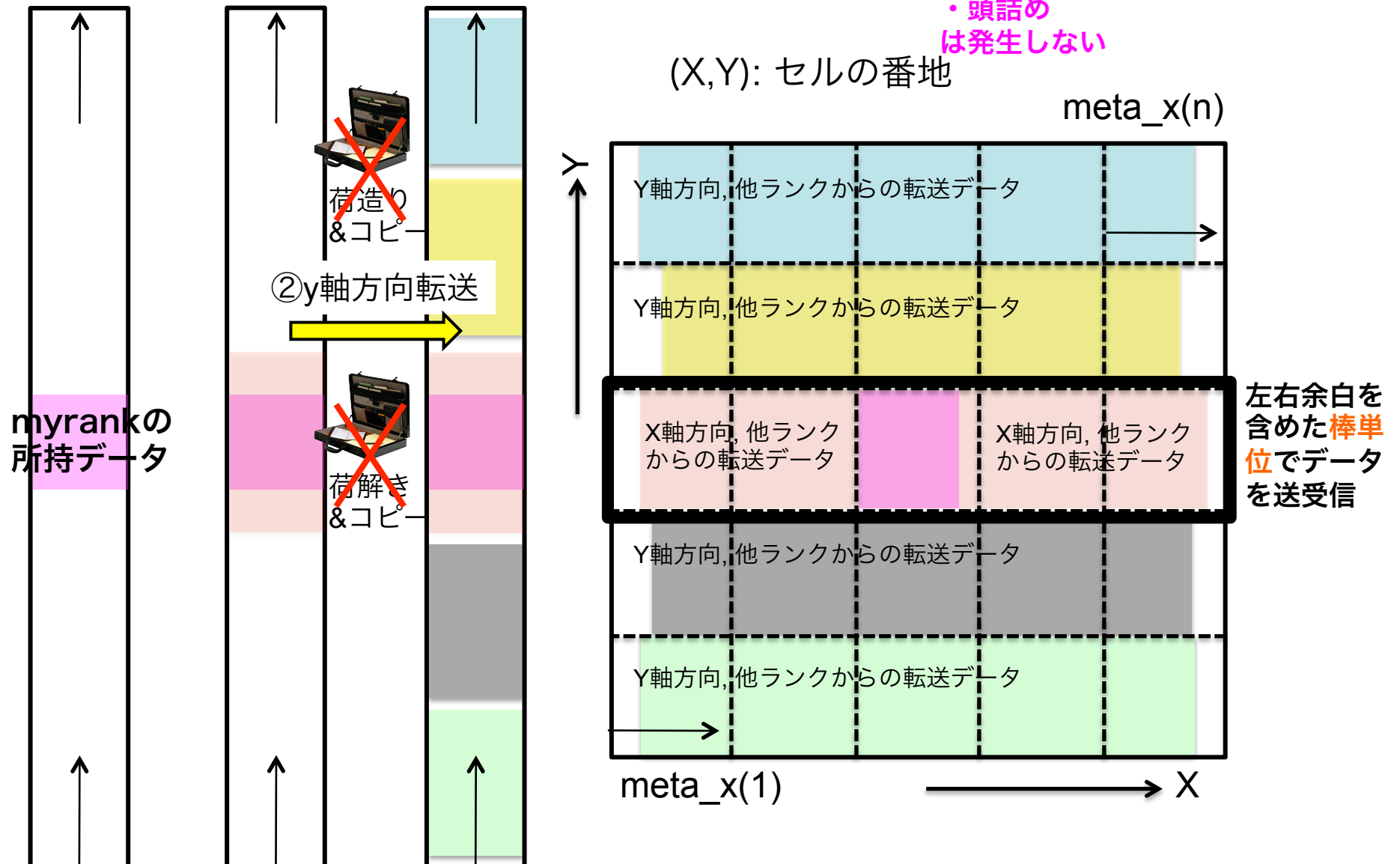
meta_x(n)



MPI 並列化技術: データ構造 [1] 座標

63 / 77

転送された座標データの格納形態



MPI 並列化技術: データ構造 [1] 座標

64 / 77

メタデータ構造

データへのアクセス方法

myrank所持データ:

$\text{tag}(3,3) \sim$
 $\text{tag}(3,3) + \text{na_per_cell}(3,3) - 1$

帯の部分のデータ:

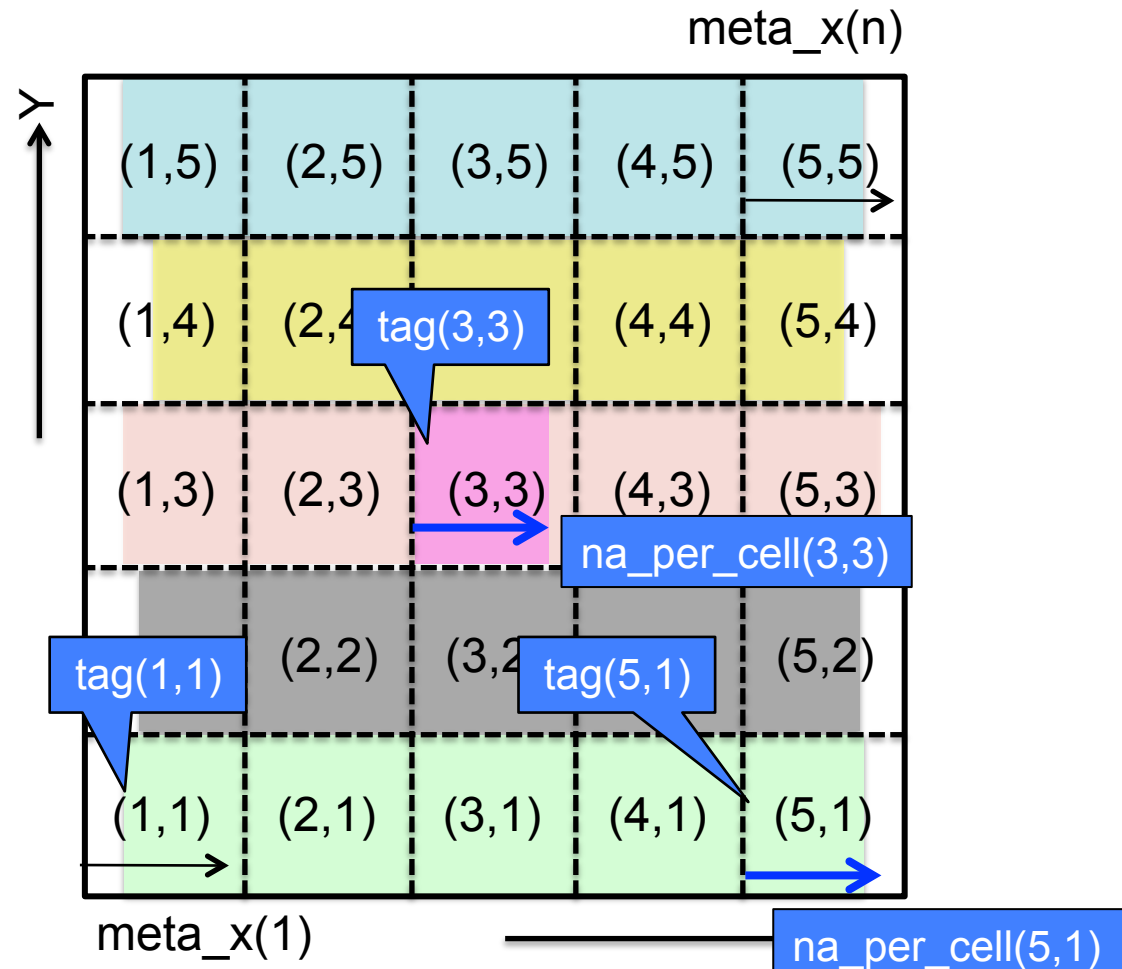
$\text{tag}(1,5) \sim$
 $\text{tag}(5,5) + \text{na_per_cell}(5,5) - 1$

$\text{tag}(1,4) \sim$
 $\text{tag}(5,4) + \text{na_per_cell}(5,4) - 1$

$\text{tag}(1,3) \sim$
 $\text{tag}(5,3) + \text{na_per_cell}(5,3) - 1$

$\text{tag}(1,2) \sim$
 $\text{tag}(5,2) + \text{na_per_cell}(5,2) - 1$

$\text{tag}(1,1) \sim$
 $\text{tag}(5,1) + \text{na_per_cell}(5,1) - 1$



連続アクセス

例) 40原子x5サブセル=200原子 (5KB)

→ L1キャッシュ(~32KB)に乗り, かつSIMD並列に十分な長さ

MPI 並列化技術: データ構造 [2] 多極子

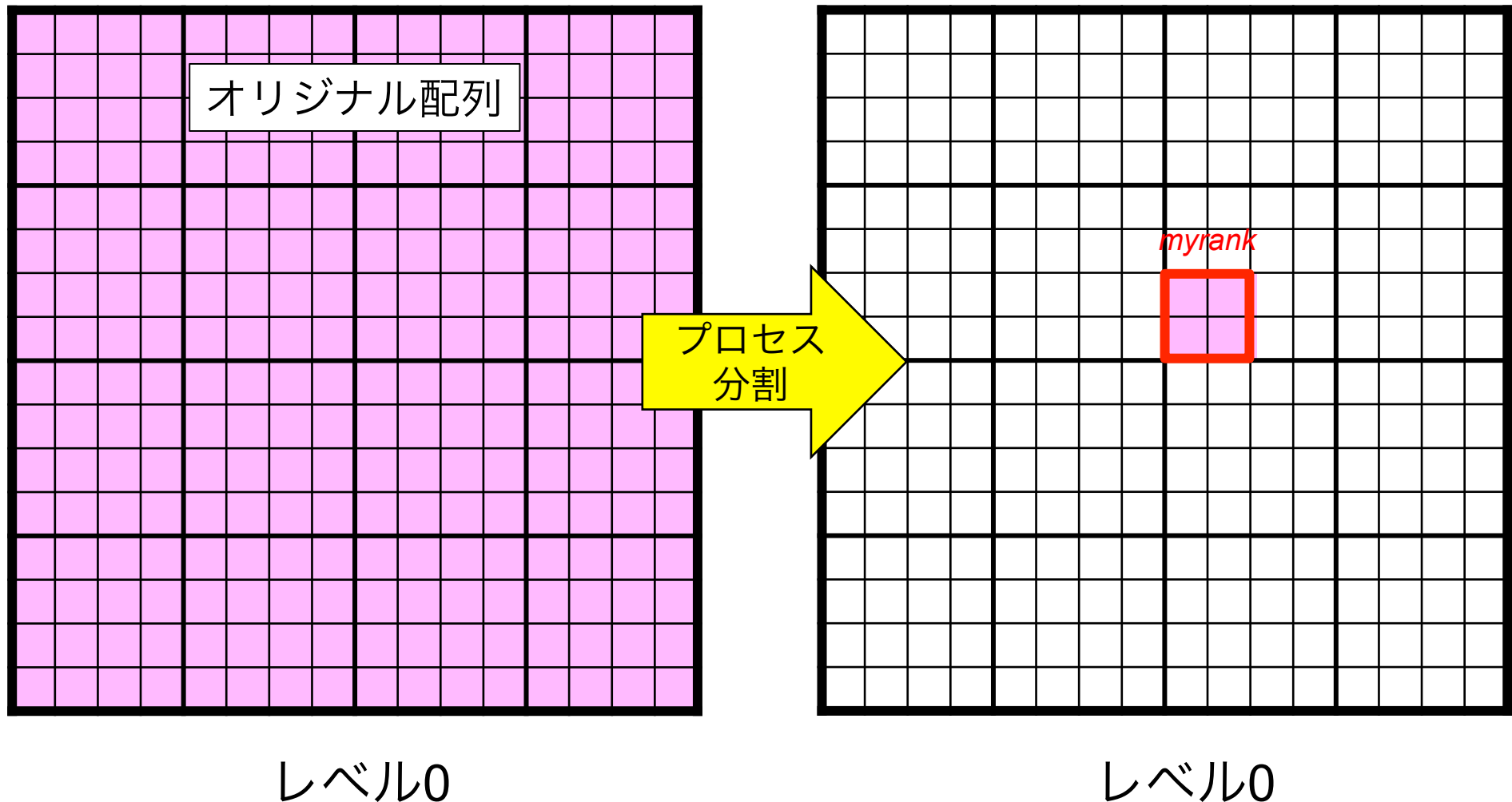
65 / 77

下位階層の多極子

wm0(:,16,16)

下位の定義: 「M2L範囲 < スーパーセル分割数」

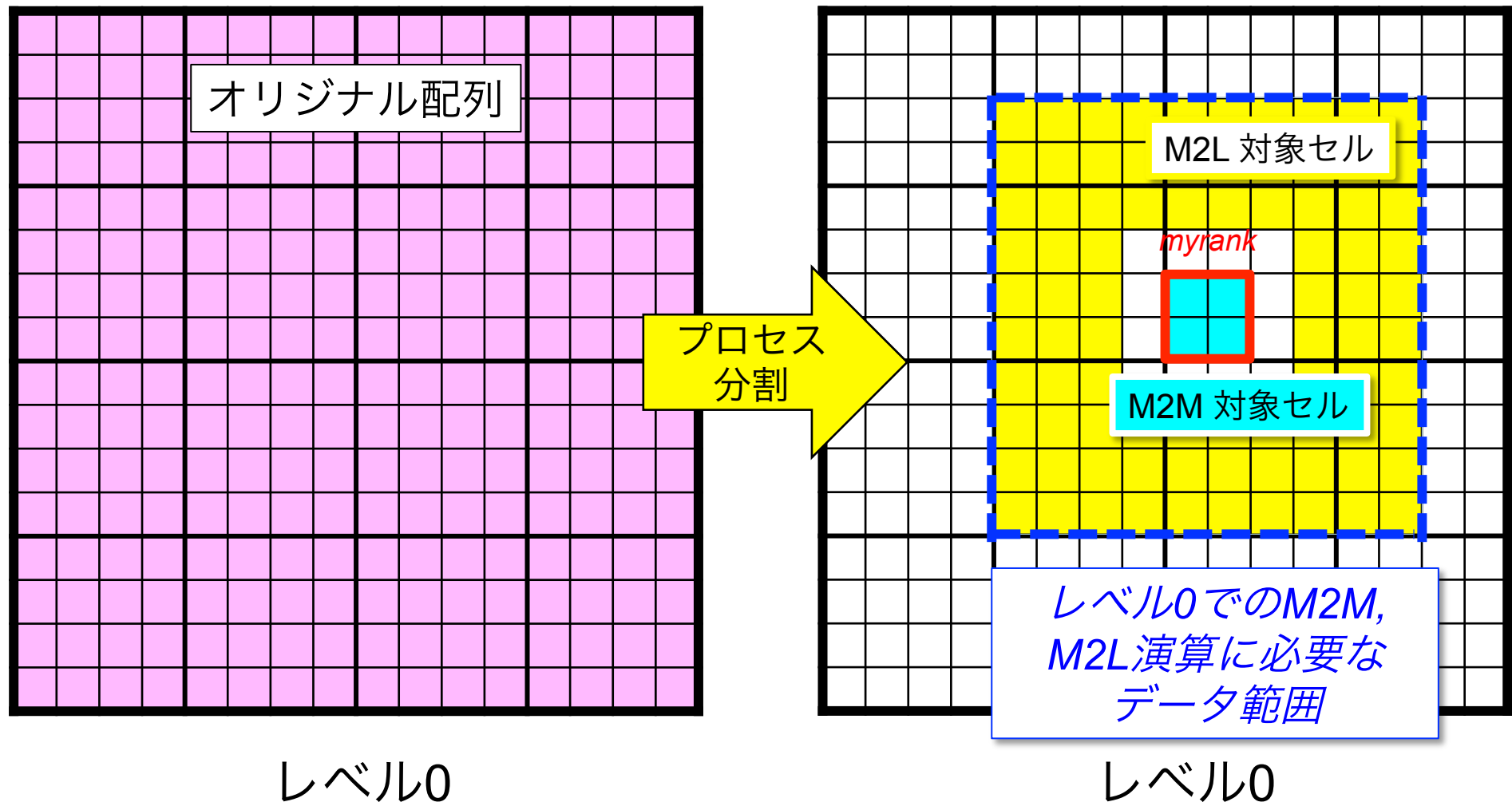
10 < 16



MPI 並列化技術: データ構造 [2] 多極子

66 / 77

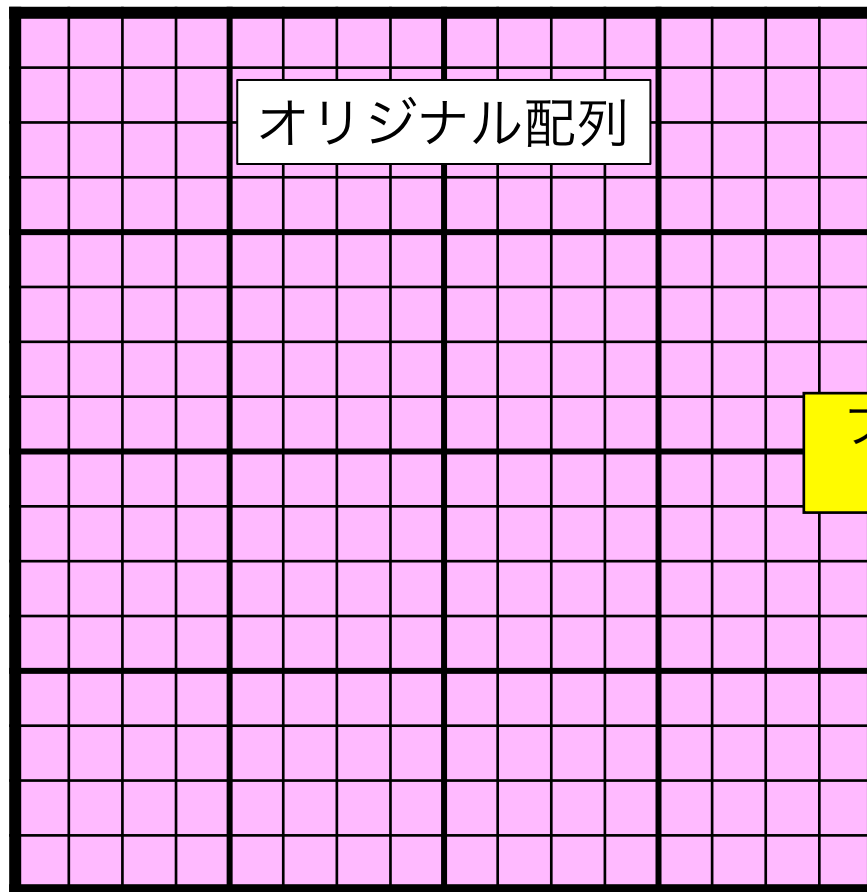
下位階層の多極子

 $wm0(:,16,16)$ 

MPI 並列化技術: データ構造 [2] 多極子

67 / 77

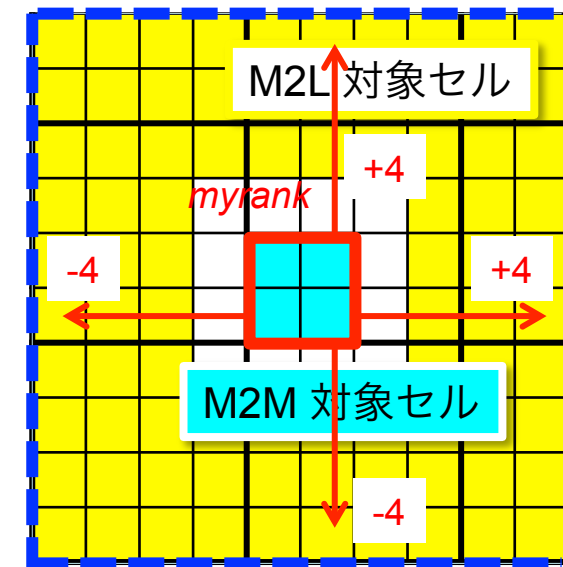
下位階層の多極子

 $wm0(:, 16, 16)$ 

プロセス
分割

レベル0

配列を袖部付きで局所化

 $wm_local0(:, 10, 10)$ x方向: $10 = 4 + 2 + 4$ y方向: $10 = 4 + 2 + 4$ 

レベル0でのM2M,
M2L演算に必要な
データ範囲

レベル0

MPI 並列化技術: データ構造 [2] 多極子

68 / 77

下位階層の多極子

メタデータ構造

(X,Y): セルの番地

wm_local0(:,10,10)

データへのアクセス方法

myrank所持データ:

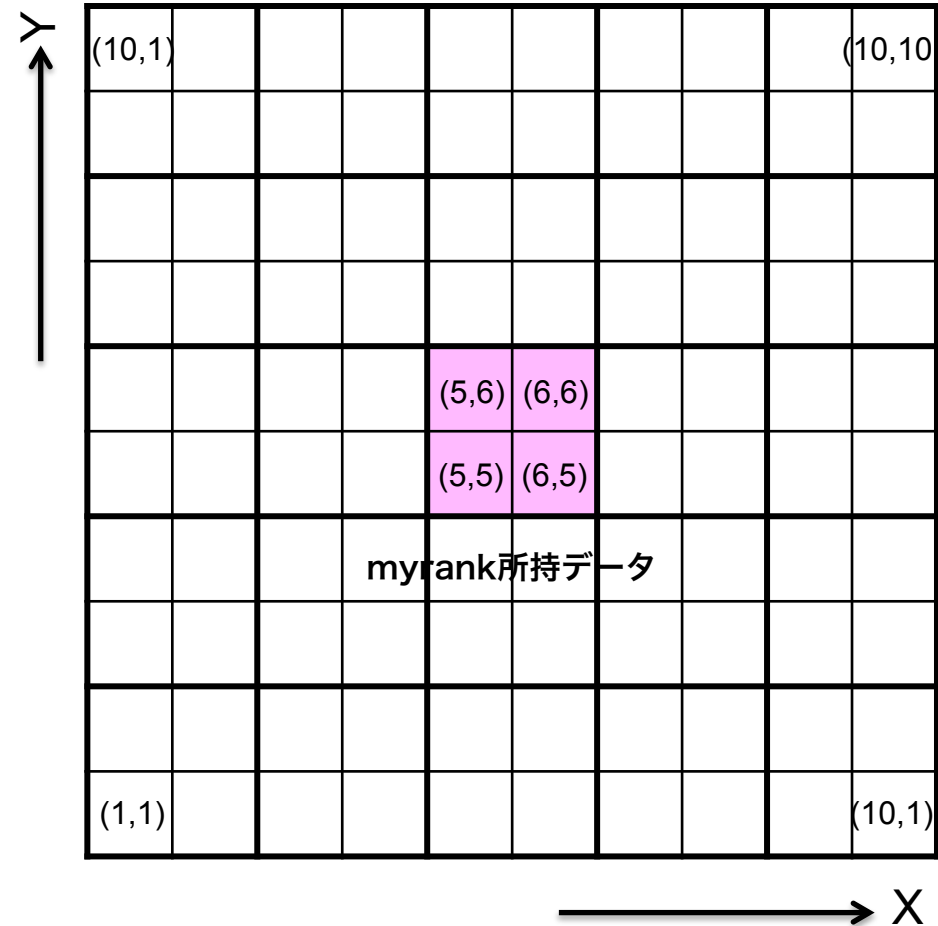
```

wm_local0(1:(nmax+1)2,5,5)
wm_local0(1:(nmax+1)2,6,5)
wm_local0(1:(nmax+1)2,5,6)
wm_local0(1:(nmax+1)2,6,6)

```

注) 多極子にはもともとスーパーセルの
相対配置情報が含まれているため、
メタデータ管理配列は要らない

nmax は多重極展開次数



MPI 並列化技術: データ構造 [2] 多極子

69 / 77

下位階層の多極子

データへのアクセス方法

myrank所持データ:

```
wm_local0(1:(nmax+1)2,5,5)
wm_local0(1:(nmax+1)2,6,5)
wm_local0(1:(nmax+1)2,5,6)
wm_local0(1:(nmax+1)2,6,6)
```

x,y軸方向転送

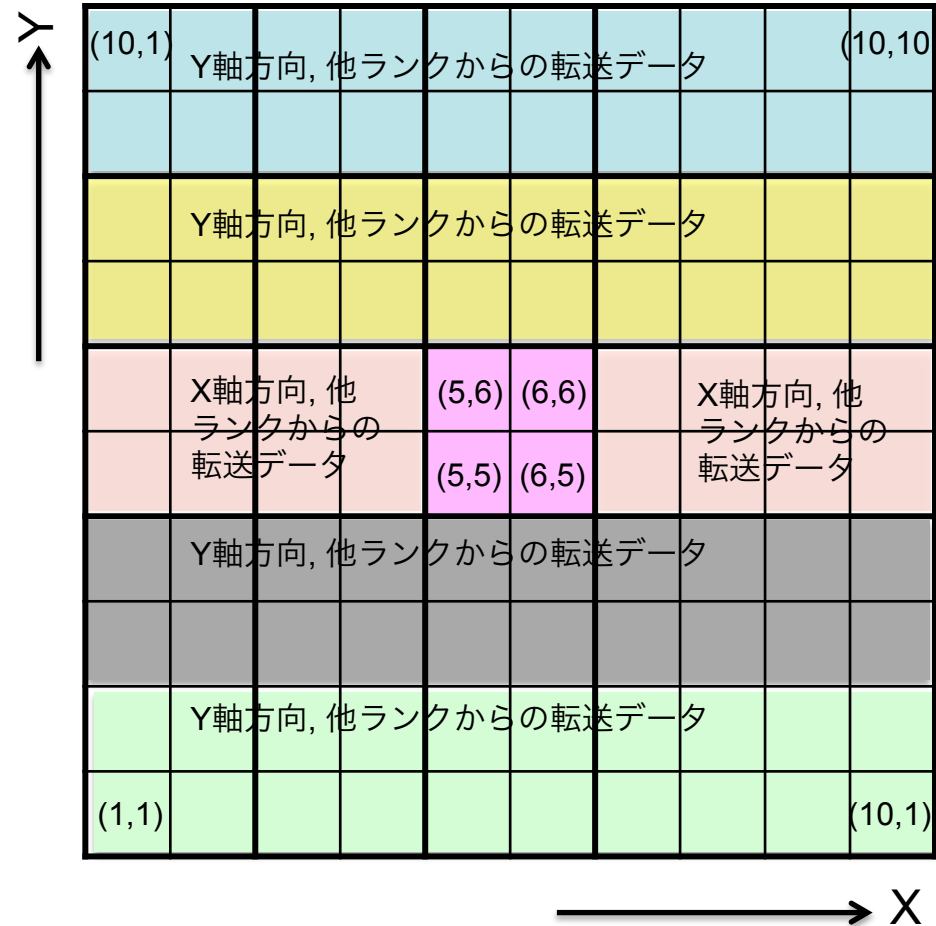


other ranks所持データ:

```
wm_local0(1:(nmax+1)2,1:10,9:10)
wm_local0(1:(nmax+1)2,1:10,7:8)
wm_local0(1:(nmax+1)2,1:10,5:6)
wm_local0(1:(nmax+1)2,1:10,3:4)
wm_local0(1:(nmax+1)2,1:10,1:2)
```

x,y軸方向通信ともに
・荷解き&コピー
・頭詰め
は発生しない

メタデータ構造

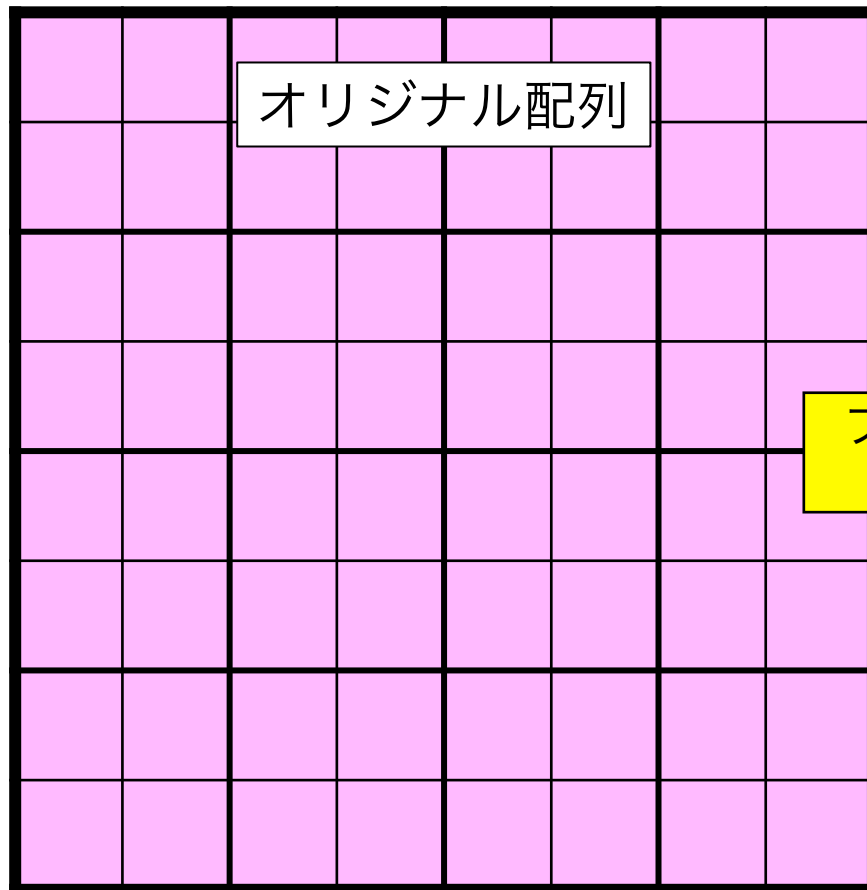


全範囲に連続アクセス

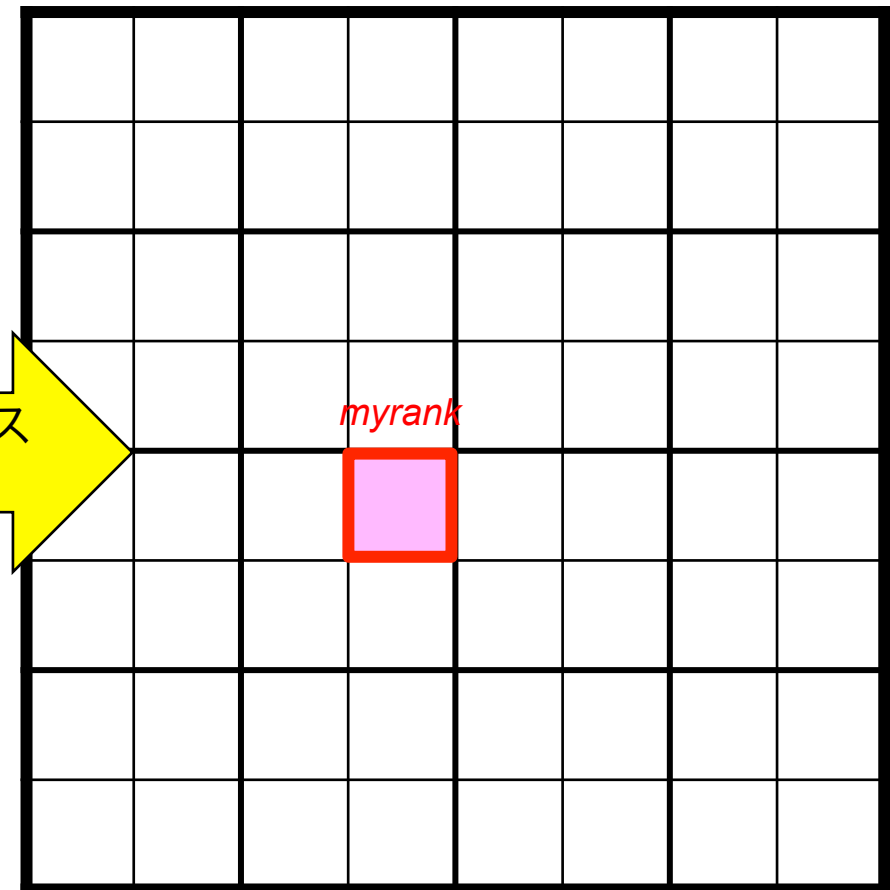
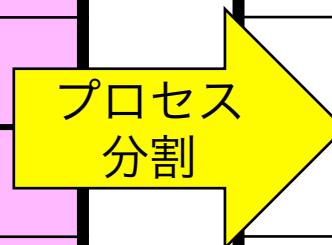
MPI 並列化技術: データ構造 [2] 多極子

70 / 77

上位階層の多極子

 $wm1(:,8,8)$ 上位の定義: 「M2L範囲 $\geq$ スーパーセル分割数」 $10 > 8$ 

レベル1



レベル1

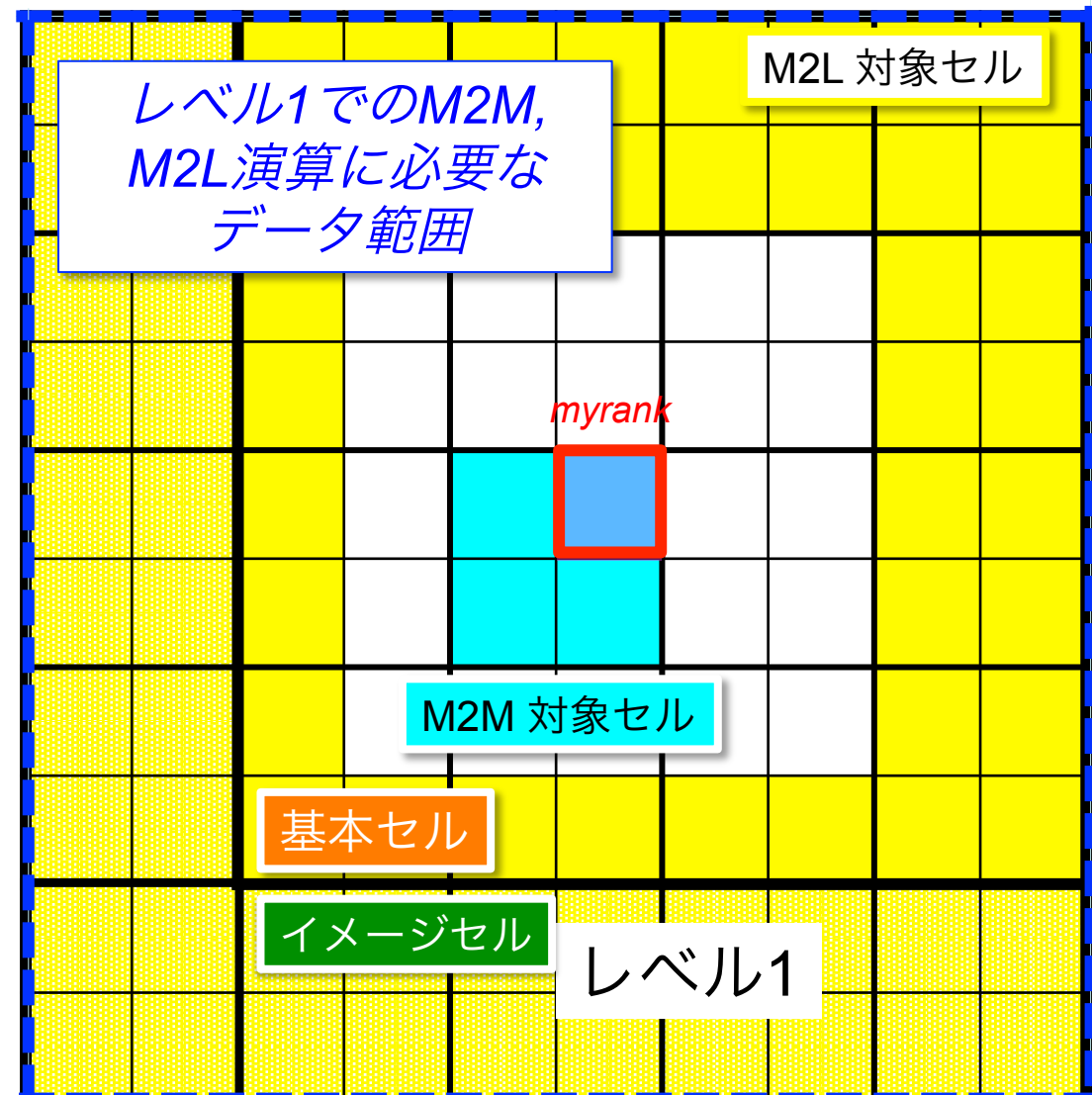
MPI 並列化技術: データ構造 [2] 多極子

71 / 77

上位階層の多極子

オリジナル配列

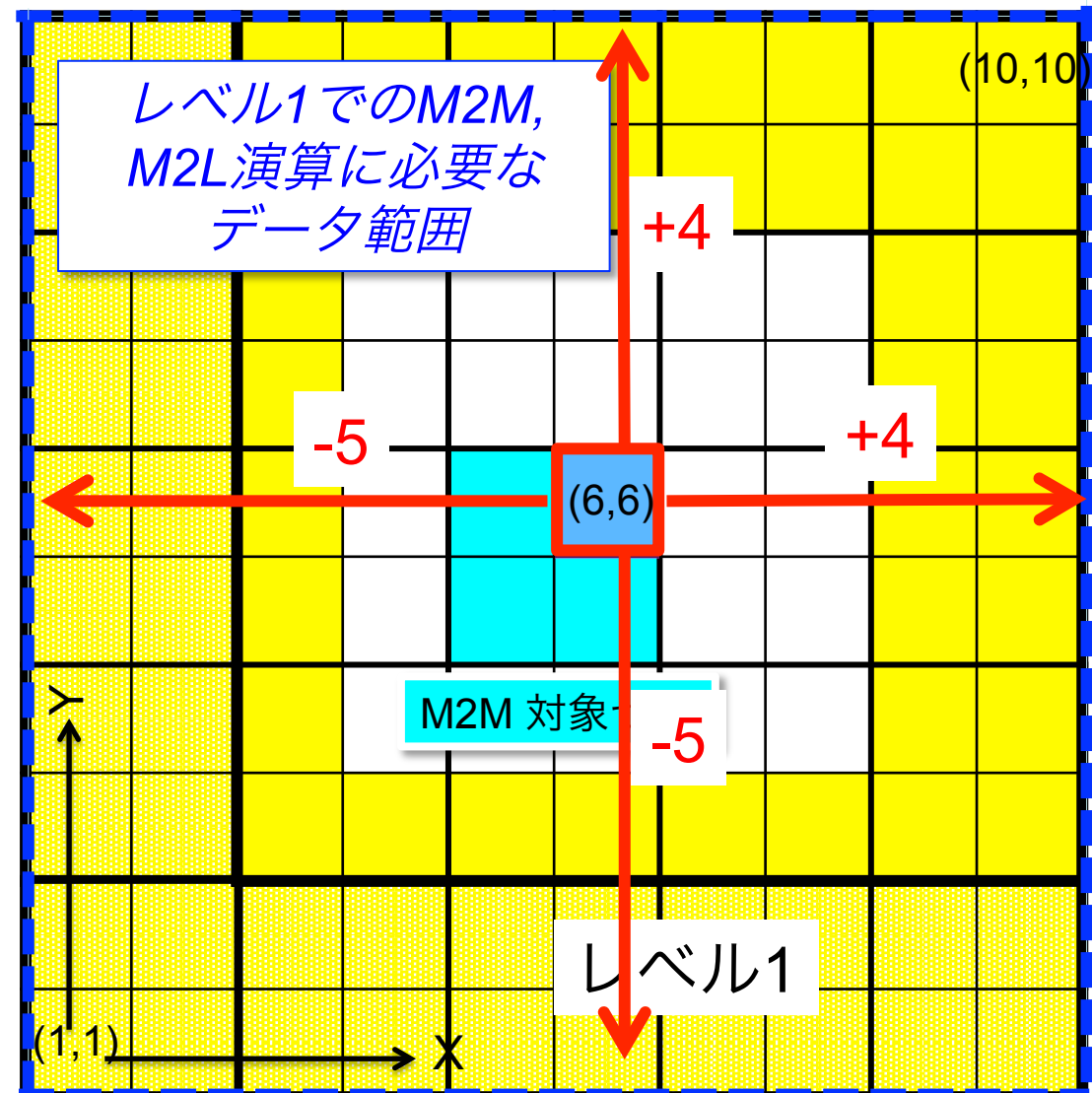
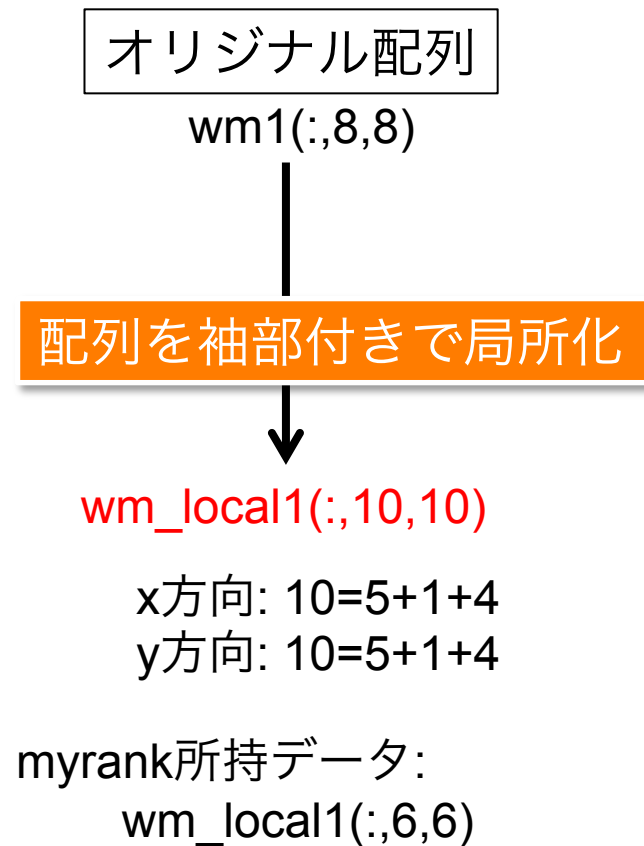
`wm1(:,8,8)`



MPI 並列化技術: データ構造 [2] 多極子

72 / 77

上位階層の多極子

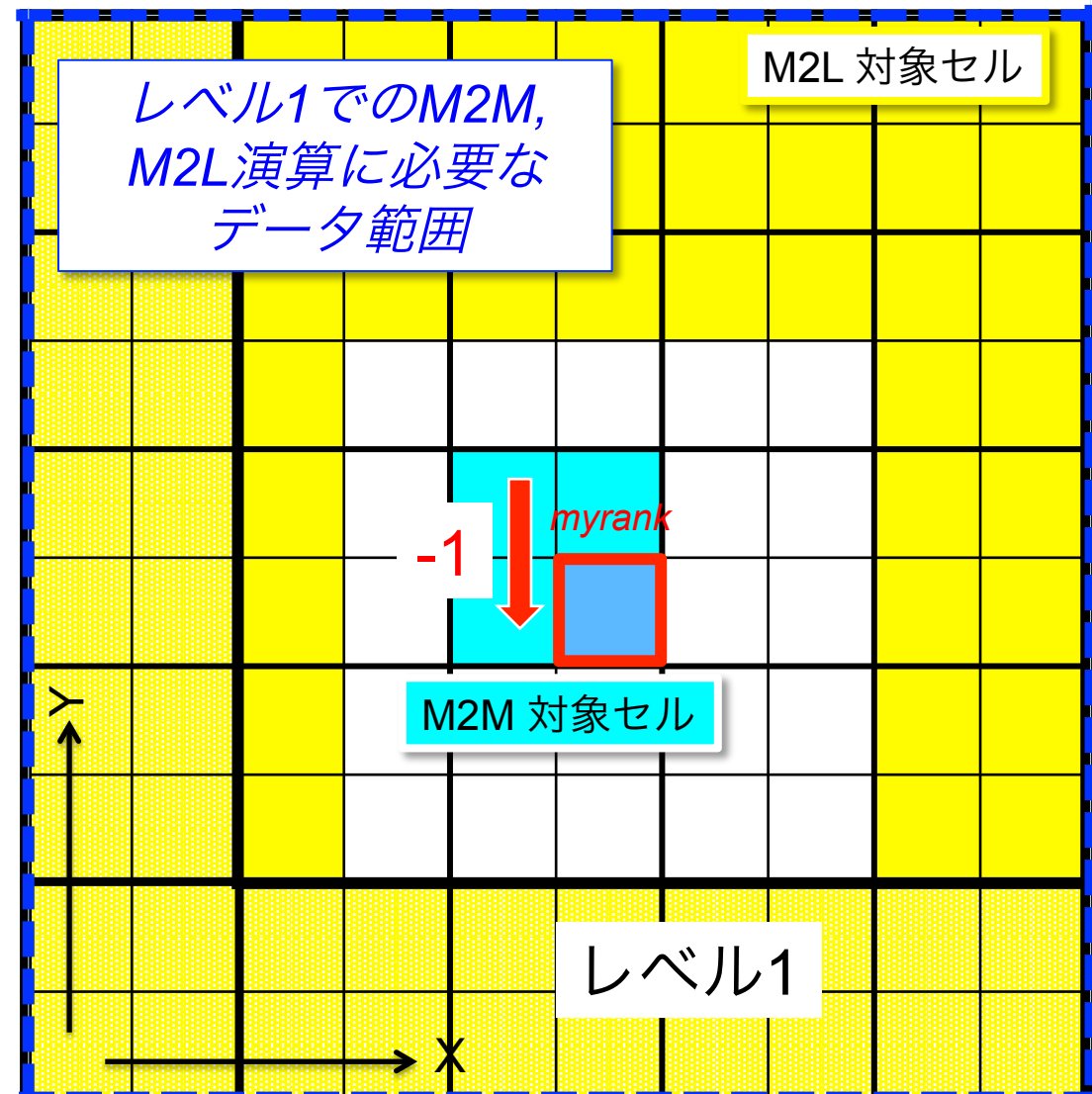


MPI 並列化技術: データ構造 [2] 多極子

73 / 77

上位階層の多極子

y 方向に -1 隣の
プロセスを考えると,



MPI 並列化技術: データ構造 [2] 多極子

74 / 77

上位階層の多極子

オリジナル配列

wm1(:,8,8)

配列を袖部付きで局所化

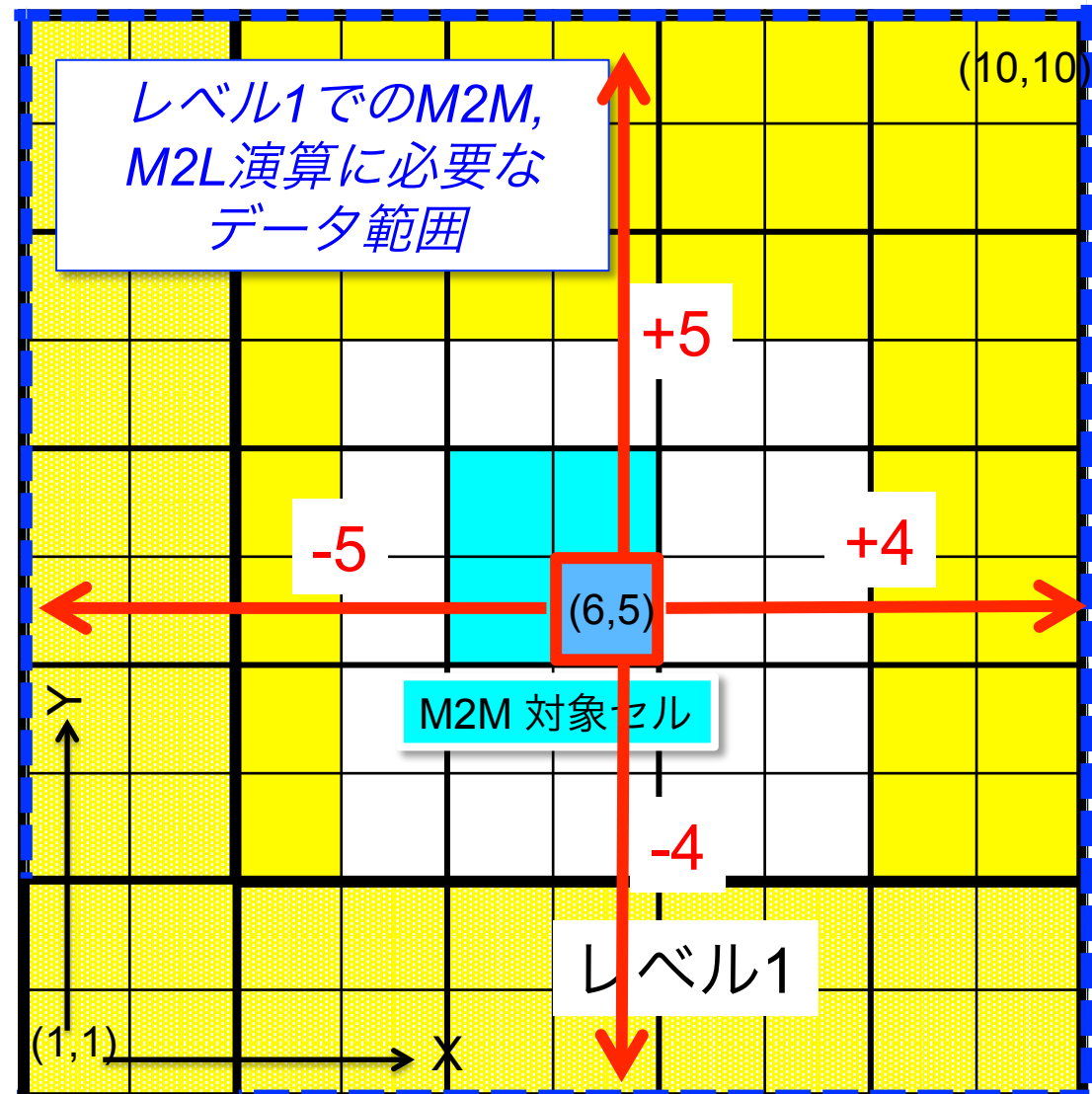
wm_local1(:,10,10)

x方向: $10 = 5 + 1 + 4$ y方向: $10 = 4 + 1 + 5$

myrank所持データ:

wm_local1(:,6,5)

上位階層では, 各軸の +, - 袖部の値 (4 or 5) がプロセス位置に依存する

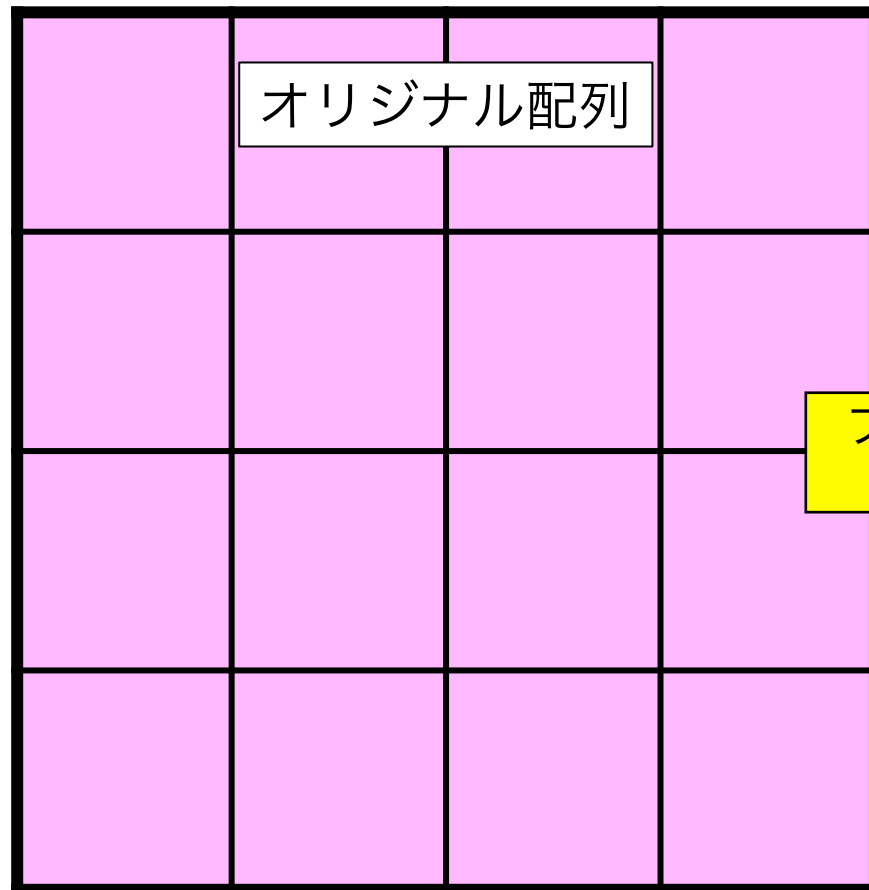


MPI 並列化技術: データ構造 [2] 多極子

75 / 77

上位階層の多極子, 通信削減の工夫

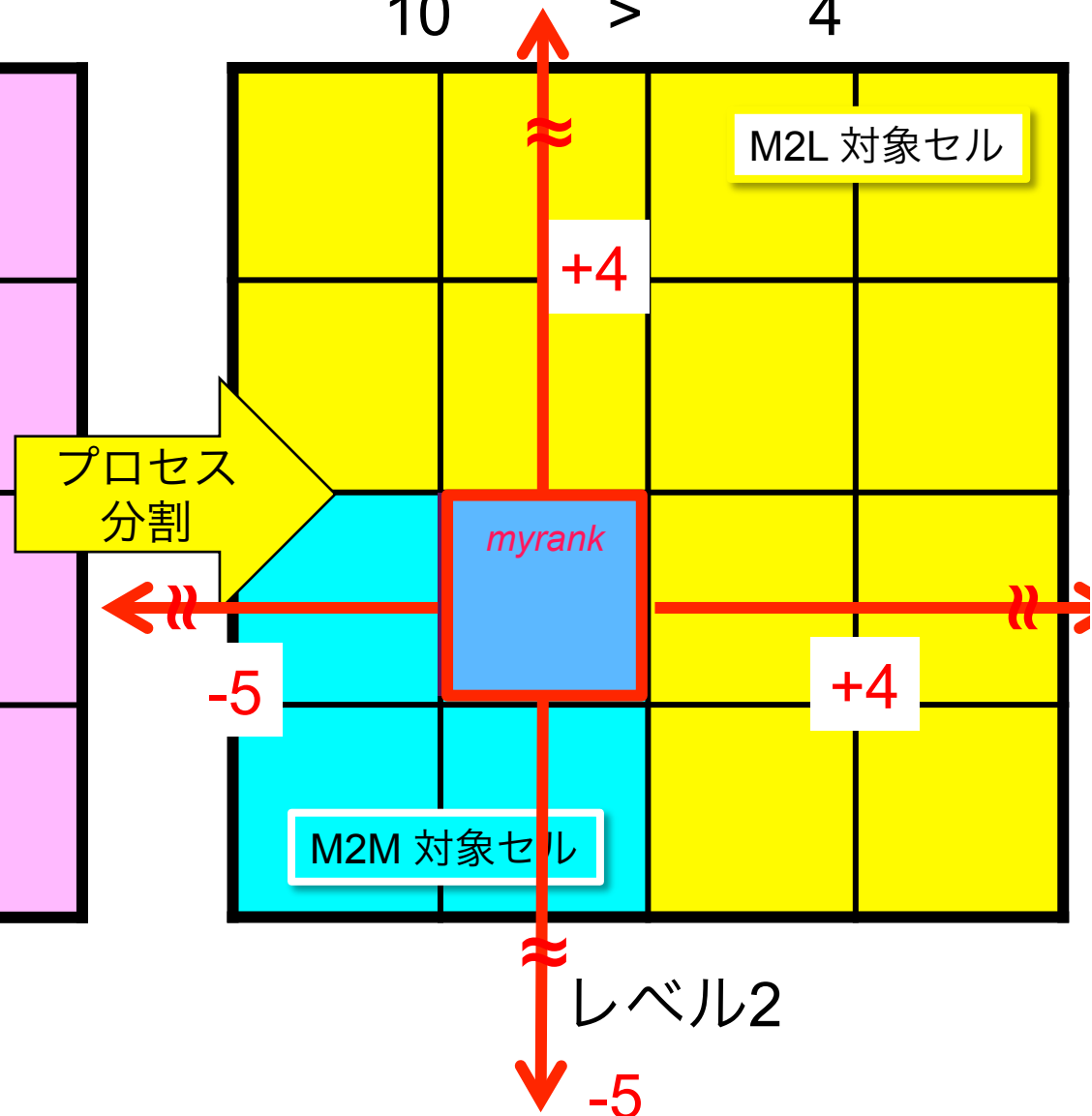
wm1(:,4,4)



レベル2

「M2L範囲 > スーパーセル分割数」

10 > 4



MPI 並列化技術: データ構造 [2] 多極子

76 / 77

上位階層の多極子, 通信削減の工夫

 $wm1(:,4,4)$

下階層のように袖部付き局所化配列にすると、

- ・ 周期境界条件による折り返し部分のデータを冗長に通信

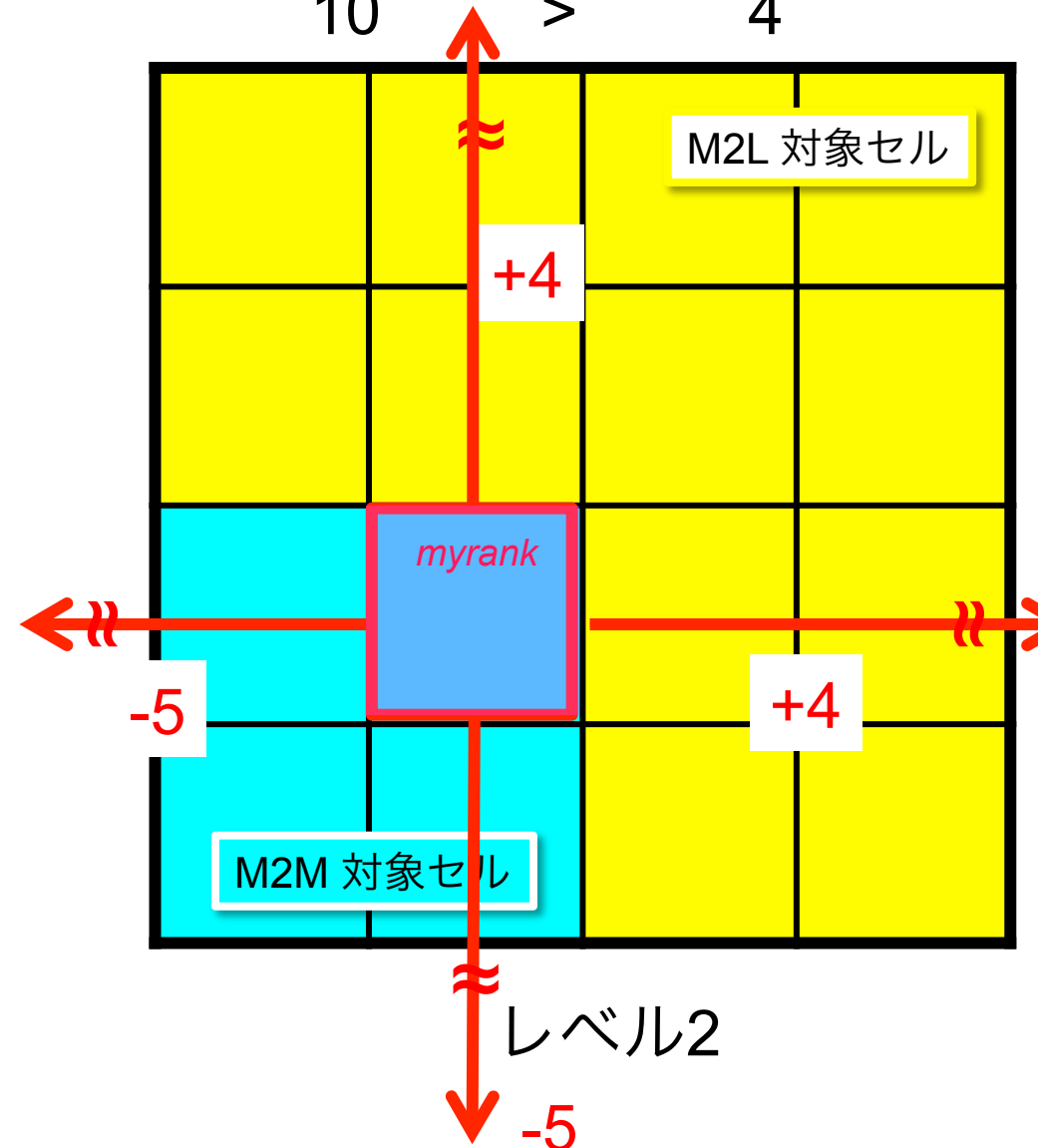


もともとの配列 $wm1(:,4,4)$ の全要素を全プロセス間通信

→ 演算部で**あたかも袖部にある**かのようにアクセスすることで通信を削減

「M2L範囲 > スーパーセル分割数」

10 > 4



まとめ

77 / 77

- ・ 分子内相互作用と分子間 nonbonded 相互作用の計算, および FMM を用いた Coulomb 相互作用の計算を含む分子動力学計算について, その並列化特性を解説した.
- ・ MPI 並列性能および演算性能を向上させるデータ構造について, 座標および多極子 (下位, 上位階層べつ) に解説した.

次回は, このデータ構造を基にした 3 次元トーラスネットワーク上での MPI 並列化技術, および OpenMP, SIMD 並列化技術を具体的に説明する.