

計算科学技術特論B (2016) 第14回

大規模MD並列化の技術1

名古屋大学 工学研究科
附属計算科学連携教育研究センター
特任講師

安藤 嘉倫

講義の主旨

- **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, FX10 などで有効な技術

→ 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.

[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

- 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

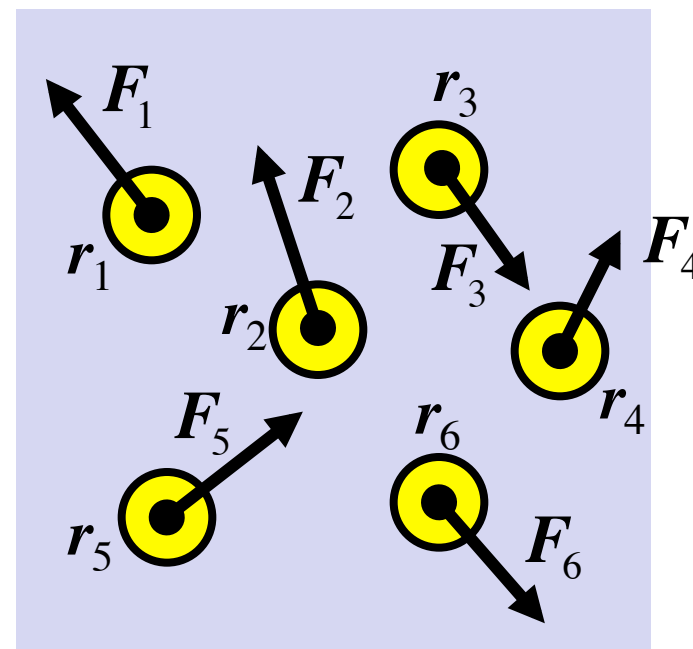
m_i : 原子 i の質量

\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

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

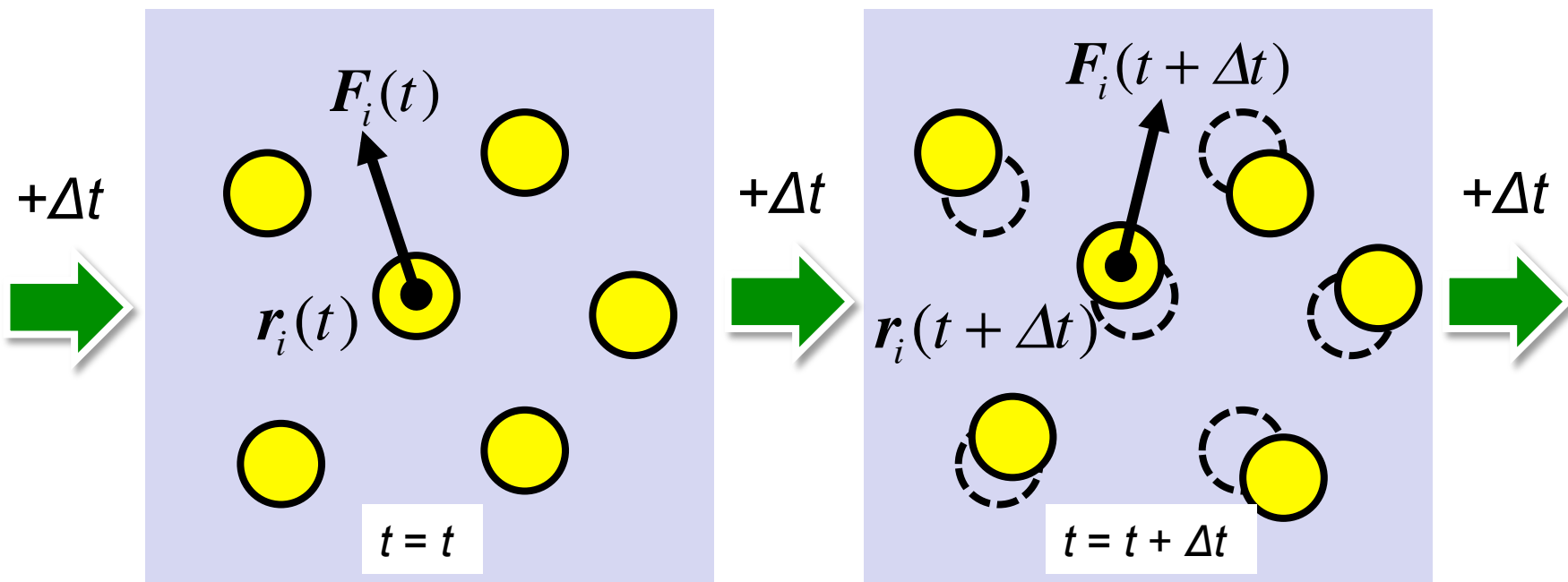
$$r_i(t + \Delta t) = r_i(t) + \frac{dr_i(t)}{dt} \Delta t + \frac{1}{2!} \frac{d^2r_i(t)}{dt^2} \Delta t^2 + \dots = r_i(t) + v_i(t) \Delta t + \frac{1}{2!} \frac{F_i(t)}{m} \Delta t^2 + \dots \quad \text{Taylor 展開 } +\Delta t$$

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

$$r_i(t + \Delta t) = 2r_i(t) + r_i(t - \Delta t) + \frac{F_i(t)}{m} \Delta t^2 + O(\Delta t^4) \quad \longrightarrow \quad \text{現在は「速度ベルレ法」}$$

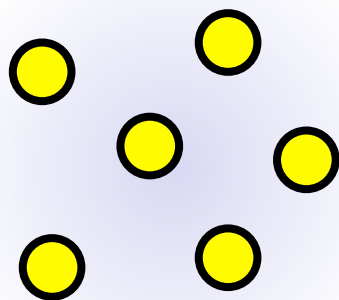
ベルレの差分式

による差分化が標準的



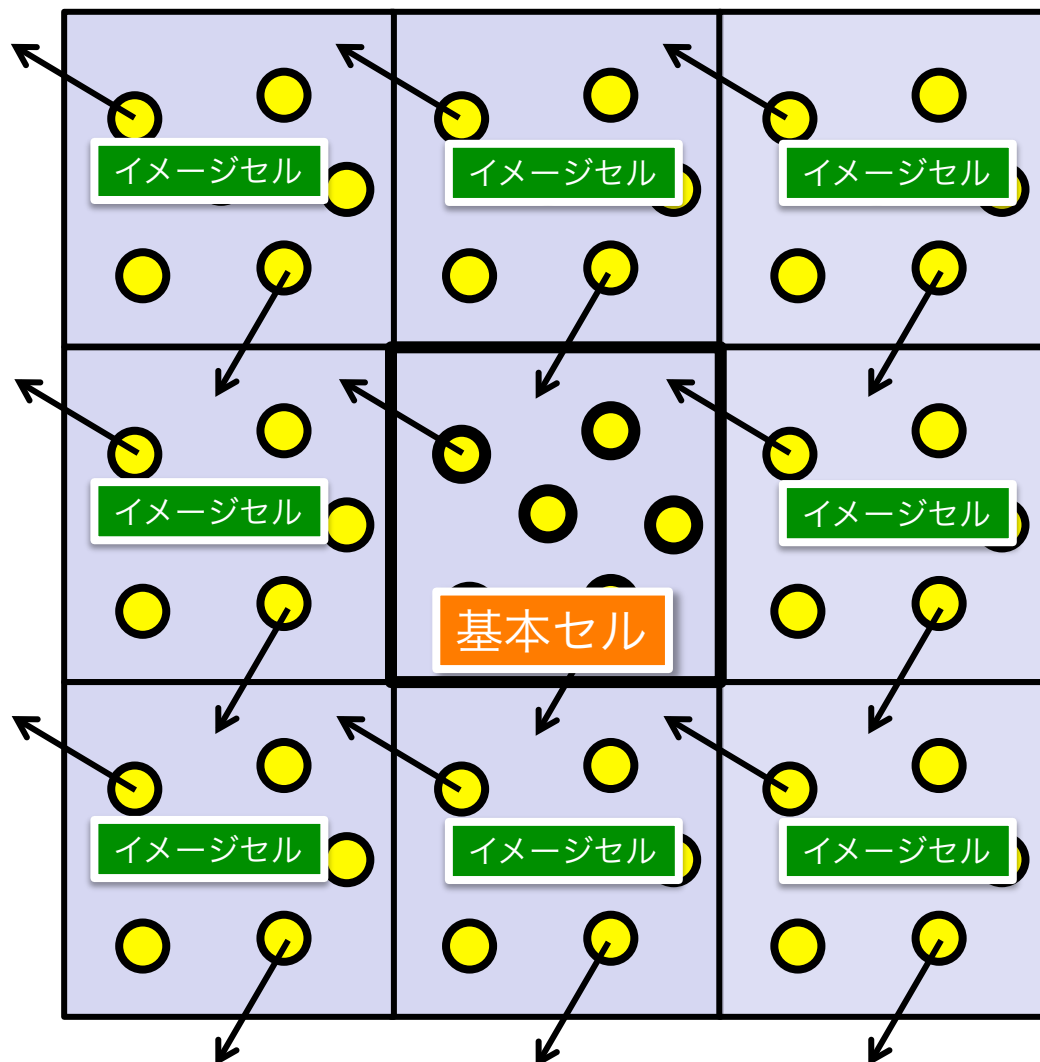
分子動力学法(3) 座標に対する境界条件

自由境界条件



真空中での孤立系 (NVE)

周期境界条件



バルクでの孤立系 (NVE)

分子動力学法(4) 原子間相互作用

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

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

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \mathbf{F}_i = - \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} \Phi(\mathbf{r}^N)$$

分子動力学法(4) 原子間相互作用

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

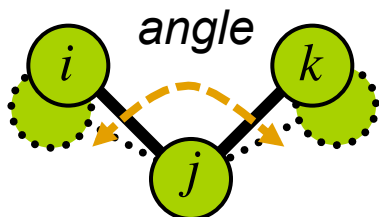
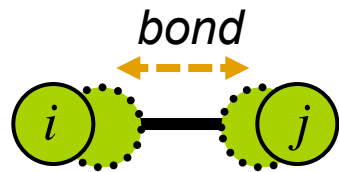
$$\begin{aligned}
 \Phi(\mathbf{r}^N) = & \sum_{\text{bonds}} K_b (b(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) - b_0)^2 + \sum_{\text{angles}} K_\theta (\theta(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \mathbf{r}_k) - \theta_0)^2 \\
 & + \sum_{\text{dihedrals}} K_\phi [1 + \cos(n\phi(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \mathbf{r}_k, \mathbf{r}_l) - \delta)] + \sum_{\text{impropers}} K_\psi (\psi(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \mathbf{r}_k, \mathbf{r}_l) - \psi_0)^2 \\
 & + \sum_{\text{nonbonds}} \left[4\varepsilon \left\{ \left(\frac{\sigma}{r(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)} \right)^6 \right\} + \frac{q_i q_j}{r(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)} \right]
 \end{aligned}$$

Lennard-Jones
Coulomb

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

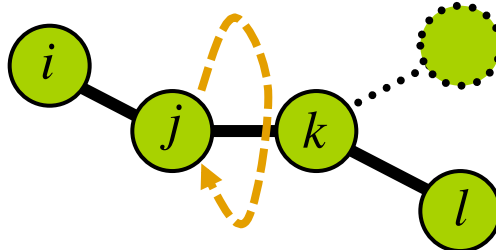
分子動力学法(5) 分子内 bonded 相互作用

$$K_b (b(r_i, r_j) - b_0)^2$$



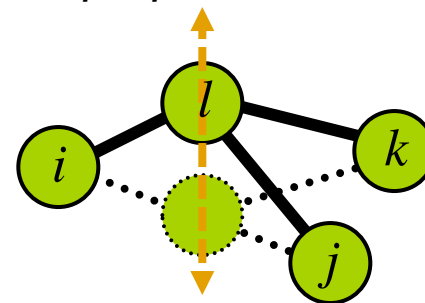
$$K_\theta (\theta(r_i, r_j, r_k) - \theta_0)^2$$

dihedral



$$K_\phi [1 + \cos(n\phi(r_i, r_j, r_k, r_l) - \delta)]$$

improper dihedral



$$K_\psi (\psi(r_i, r_j, r_k, r_l) - \psi_0)^2$$

コーディングイメージ

do n=1, nbonds

b=b(ri, rj)

$\phi_{bond,ij}$ の計算

$\phi_{bond} = \phi_{bond} + \phi_{bond,ij}$

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)

$\phi_{angle,ijk}$ の計算

$\phi_{angle} = \phi_{angle} + \phi_{angle,ijk}$

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)

$\phi_{dihedral,ijkl}$ の計算

$\phi_{dihedral} = \phi_{dihedral} + \phi_{dihedral,ijkl}$

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)

$\phi_{improper,ijkl}$ の計算

$\phi_{improper} = \phi_{improper} + \phi_{improper,ijkl}$

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



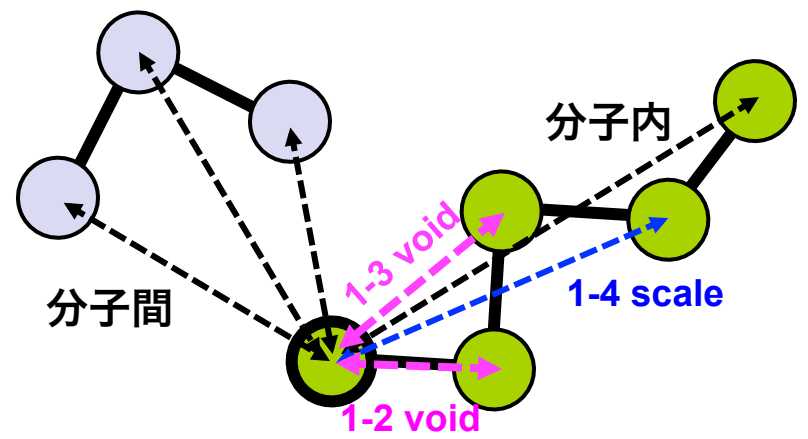
分子動力学法(6) 分子内・分子間 nonbonded 相互作用

10/174

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

$$4\epsilon \left\{ \left(\frac{\sigma}{r(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)} \right)^6 \right\} + \frac{q_i q_j}{r(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)}$$

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



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 = { 0 if 1-2,-3 void
      s if 1-4 scale
      1 else
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
```

分子内 nonbond 項計算の注意点:

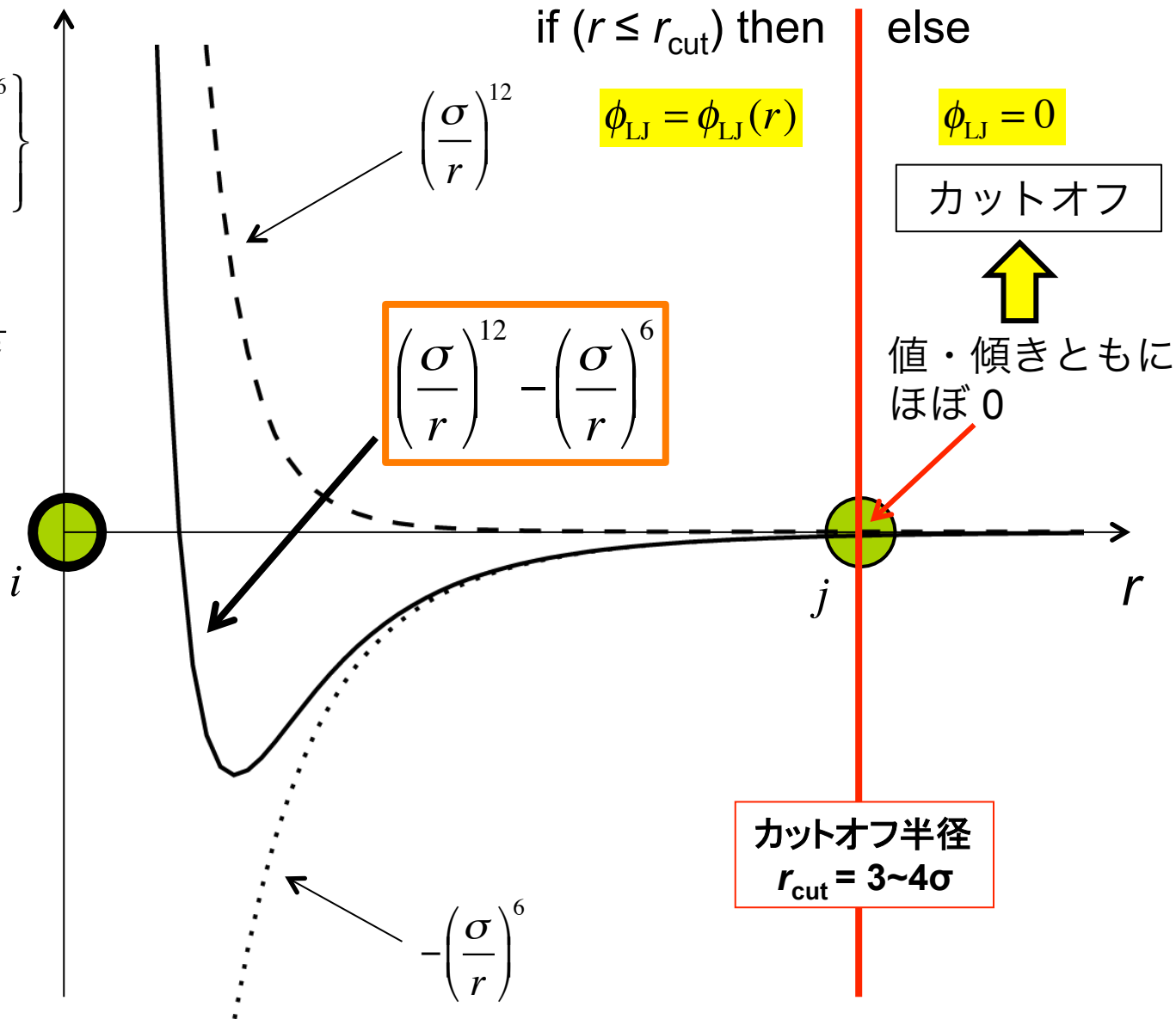
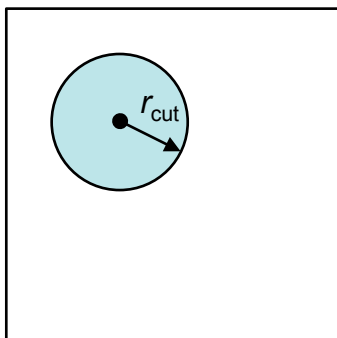
- ・1番目および2番目の隣接原子とは相互作用しない (1-2, 1-3 void)
- ・3番目の隣接原子との相互作用は因子 s でスケールする (1-4 scale) [s は LJ, Coulomb べつ]
- ・4番目以降の隣接原子とは通常の相互作用

分子動力学法(7) LJ 相互作用のカットオフ

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

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

$r > r_{cut}$ を無視することで計算時間を削減



分子動力学法(7) LJ相互作用のカットオフ

分子系での留意事項

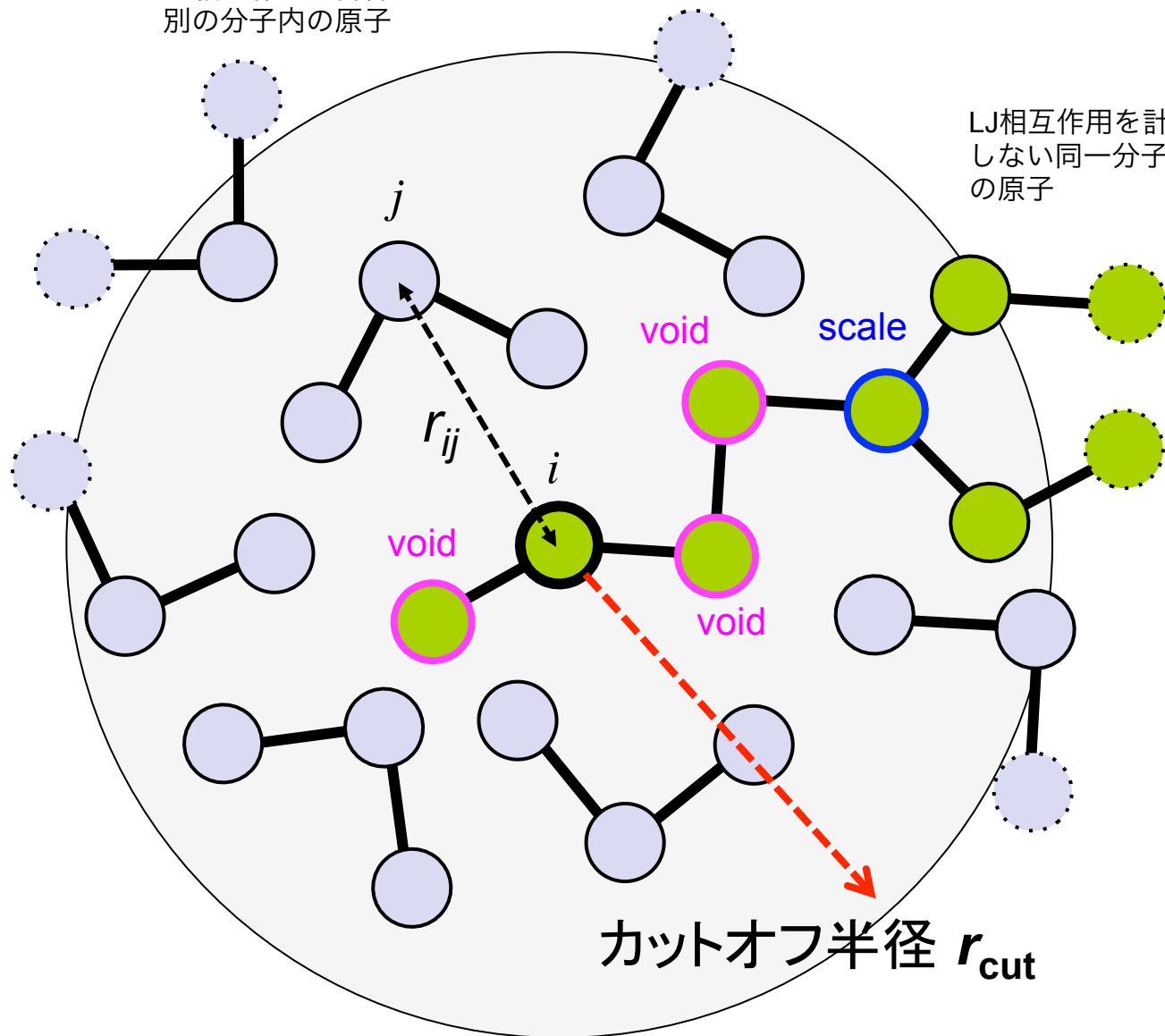
コーディングイメージ
(分子間)

```

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
 $\phi_{nonbond} = \phi_{nonbond} + \phi_{ij}$ 
Fi, Fj の計算
f(i)=f(i)+Fi
f(j)=f(j)+Fj
enddo
enddo
enddo
enddo
    
```

LJ相互作用を計算しない
別の分子内の原子

LJ相互作用を計算
しない同一分子内の
原子



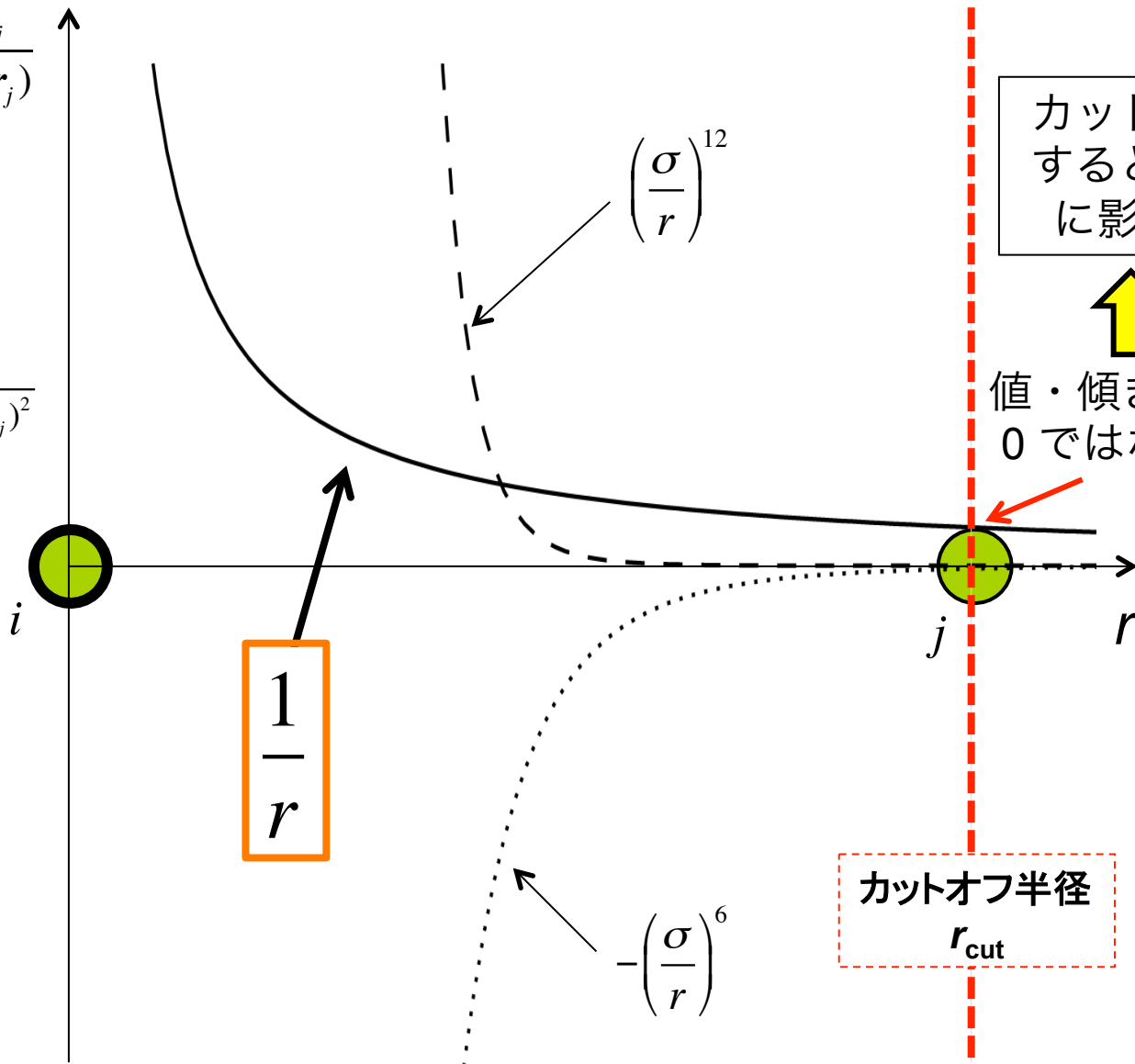
カットオフ半径 r_{cut}



分子動力学法(8) Coulomb 相互作用

$$\phi_{CL}(r) = \frac{q_i q_j}{r(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)}$$

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



カットオフ
すると結果
に影響大



値・傾きともに
0ではない

$\frac{1}{r}$

カットオフ半径
 r_{cut}

$-\left(\frac{\sigma}{r}\right)^6$

$\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12}$

分子動力学法(8) Coulomb 相互作用

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

Particle Mesh Ewald (PME) 法

FMM + 多重極子のEwald法

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

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:

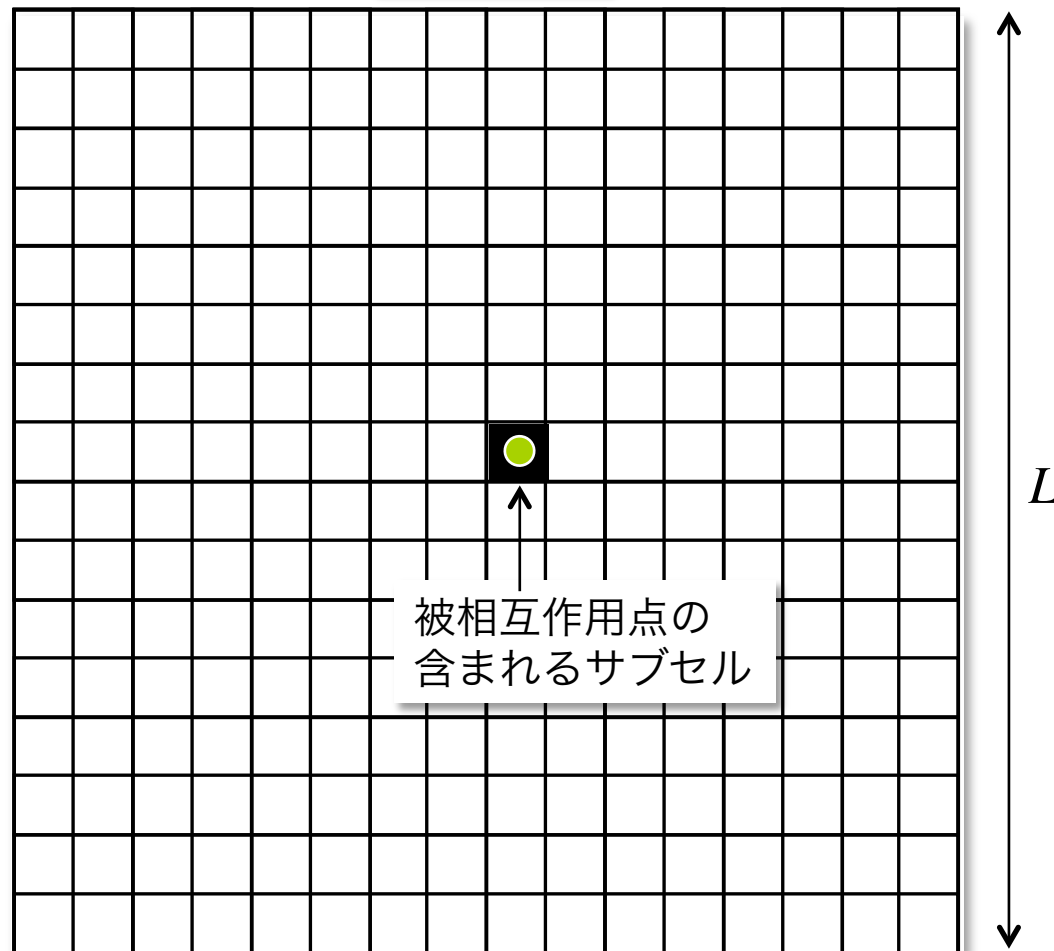
レベル m の分割セル (一辺 $l \times 2^m$)

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.

基本セル

$$l = L/2^n$$

↔



□: レベル0

分子動力学法(8) Coulomb 相互作用

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:

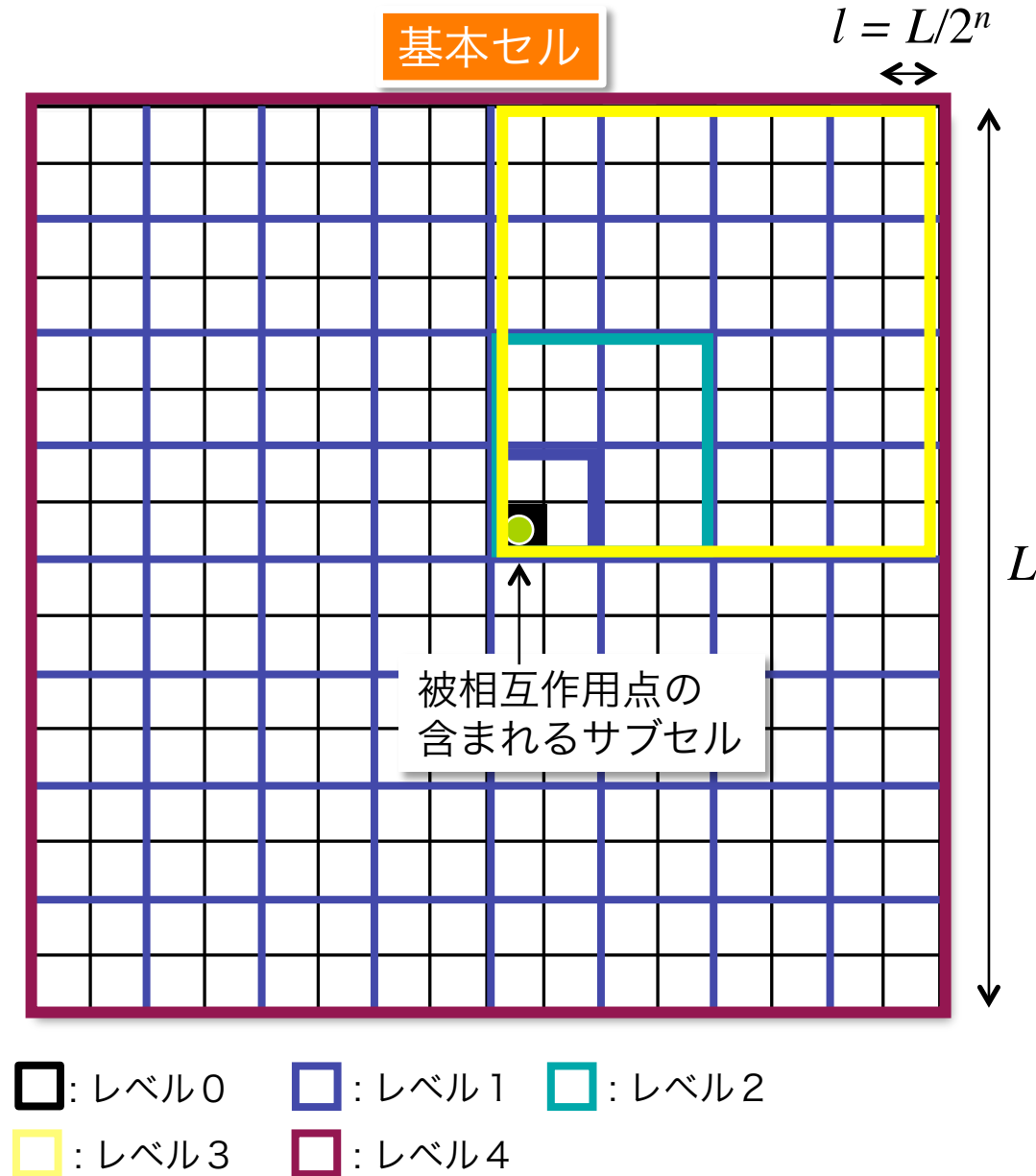
レベル0の分割セル (一辺 $l = L/2^n$)

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

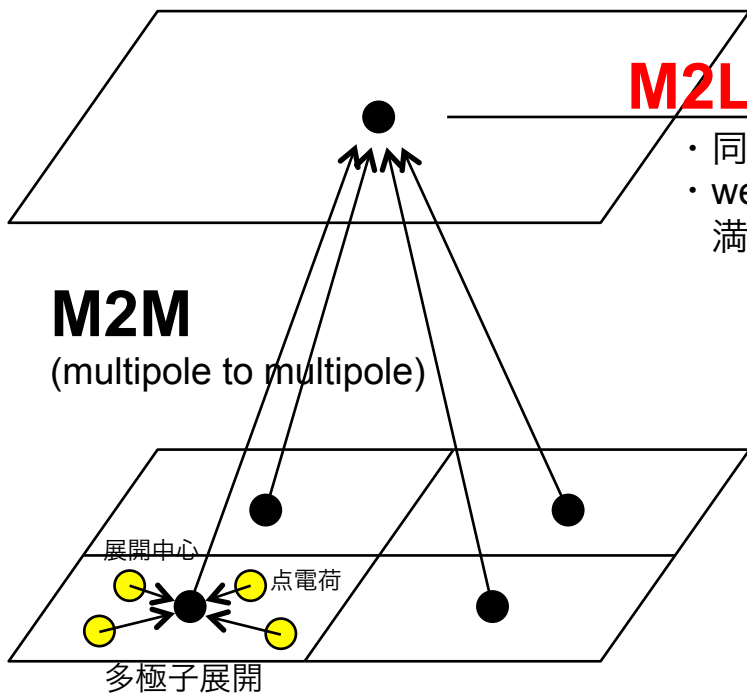




分子動力学法(8) Coulomb 相互作用

FMM 基本演算

多極子エwald法
(無限遠からの寄与)



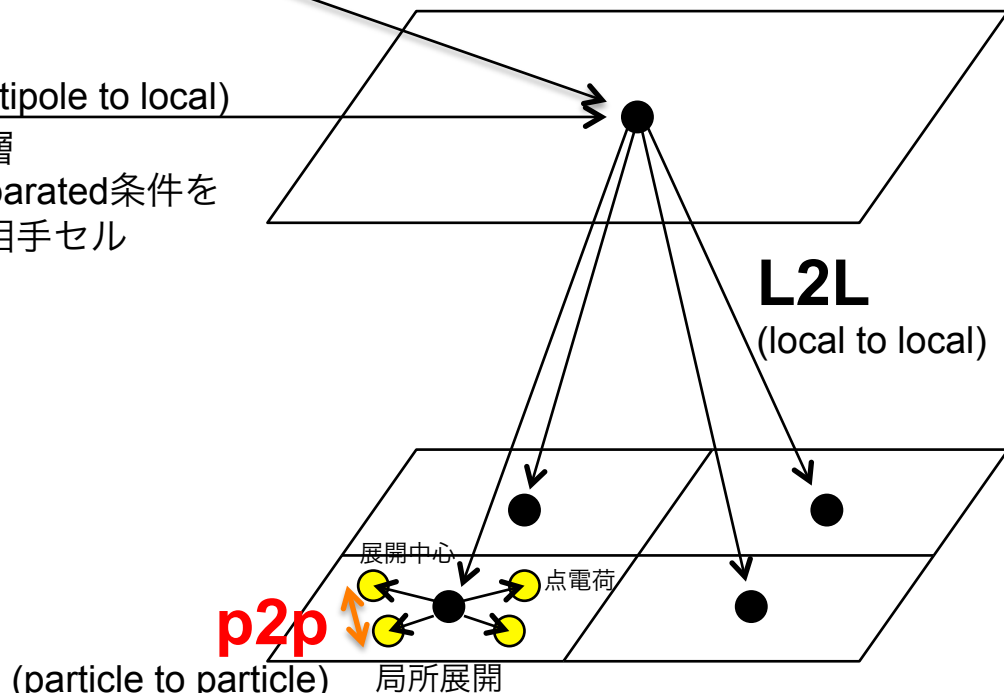
M2M
(multipole to multipole)

p2M (particle to multipole)

p2M : 点電荷の多極子展開

M2M : 多極子のマージ

M2L : 多極子の局所展開



M2L (multipole to local)

- ・ 同じ階層
- ・ well-separated条件を満たす相手セル

L2L
(local to local)

p2p
(particle to particle) 局所展開

L2p (local to particle)

L2L : 局所展開中心の移動

L2p : 点電荷上の電場の評価

p2p : 粒子対計算

Hot spots

分子動力学法(8) Coulomb 相互作用

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**

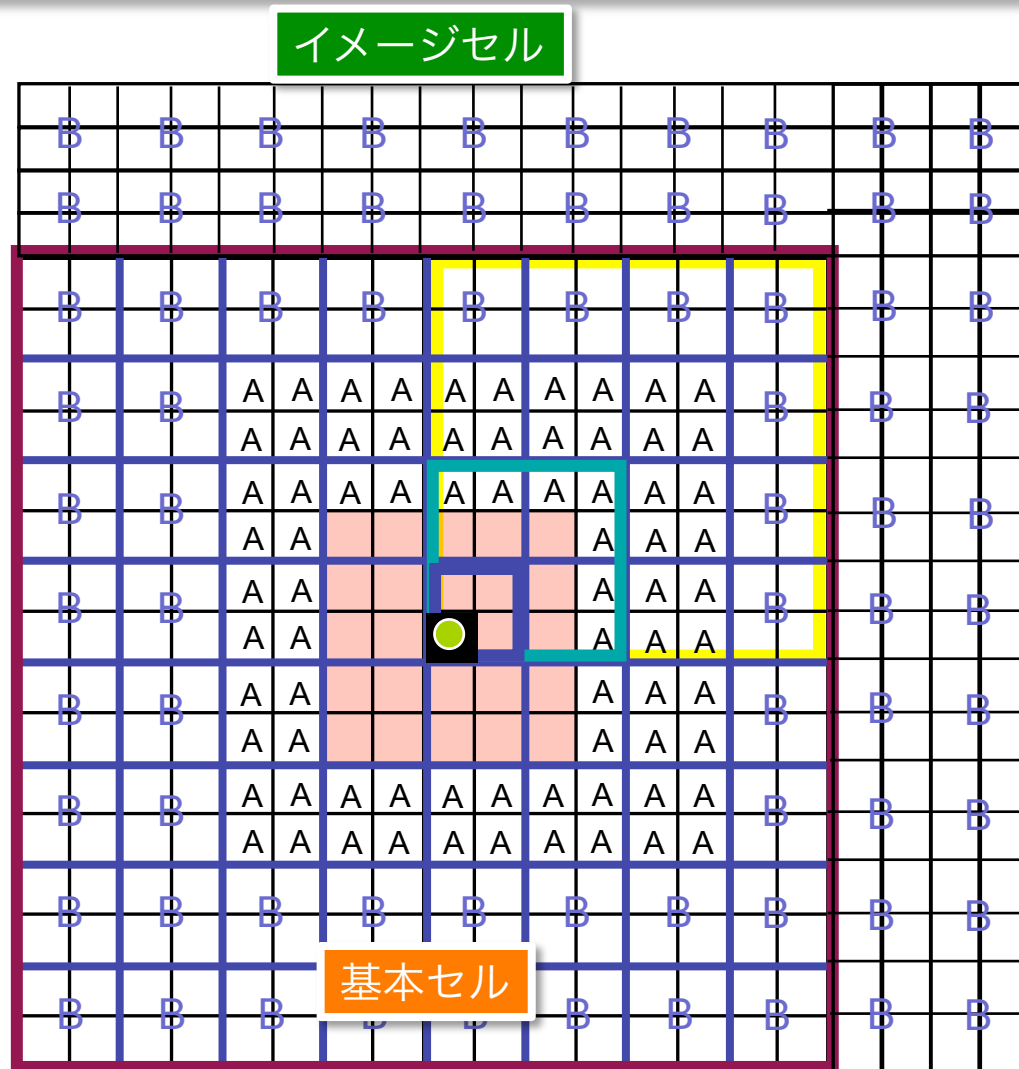
...以下同様 (入れ子構造)

最上レベル

- ・ 多重極子のEwald法, **L2L**

入れ子構造により,

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



- : レベル0
- : レベル1
- : レベル2
- : レベル3
- : レベル4
- : 粒子-粒子相互作用を計算

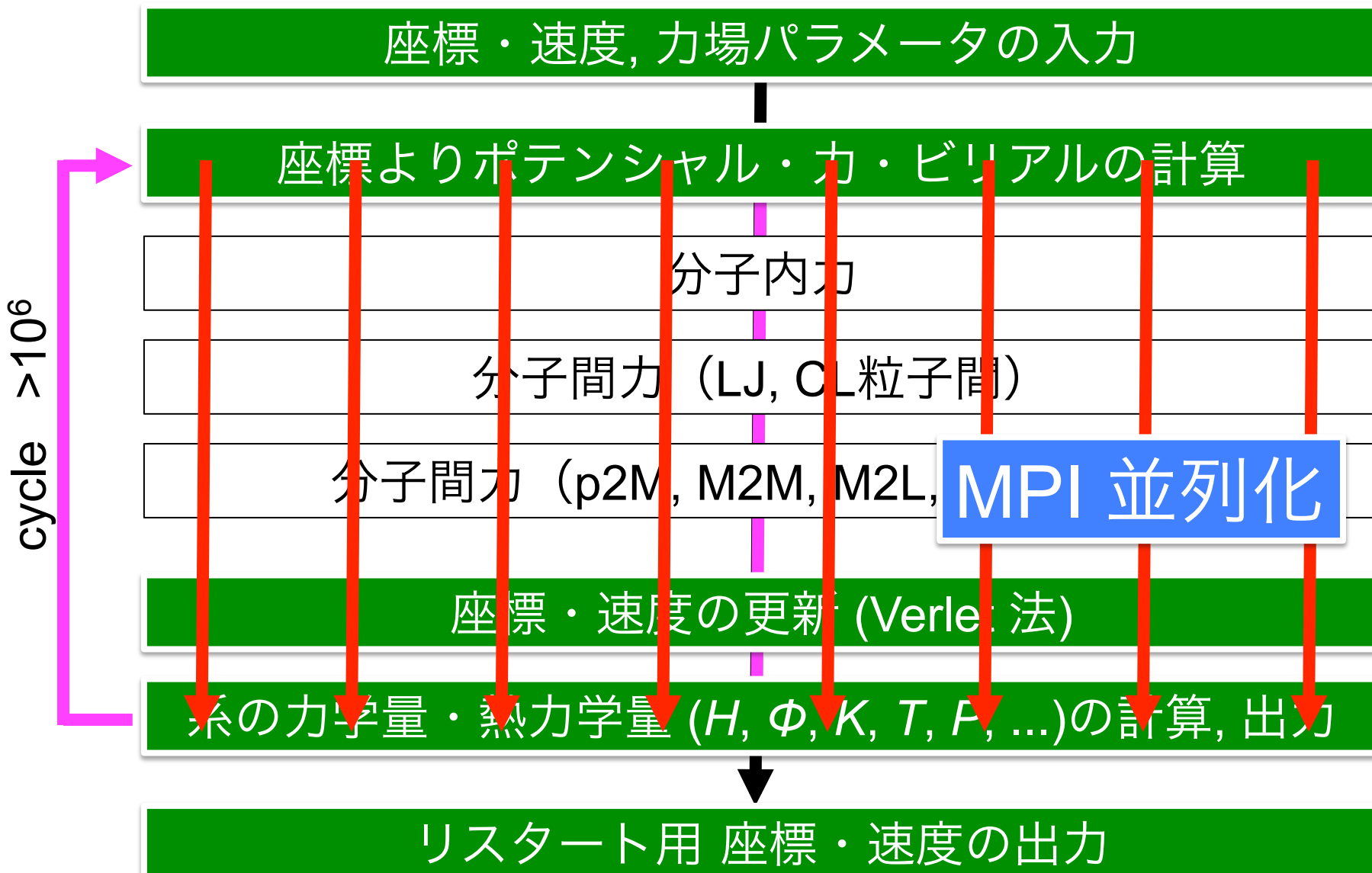
分子動力学計算の並列化特性(1)

MD 計算の処理フロー



分子動力学計算の並列化特性(1)

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

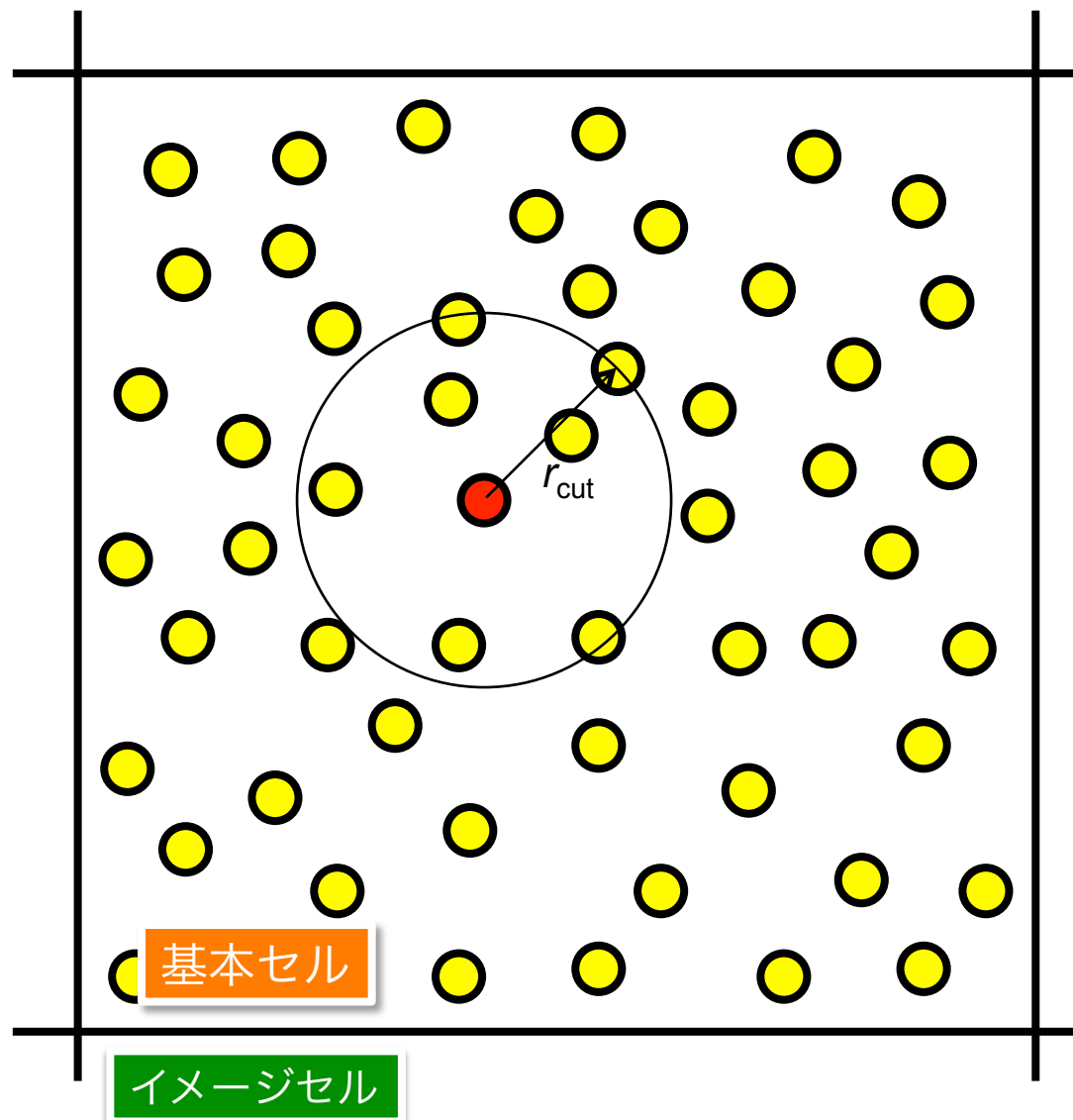
21 / 74

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

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
  座標・速度更新
  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

22/174

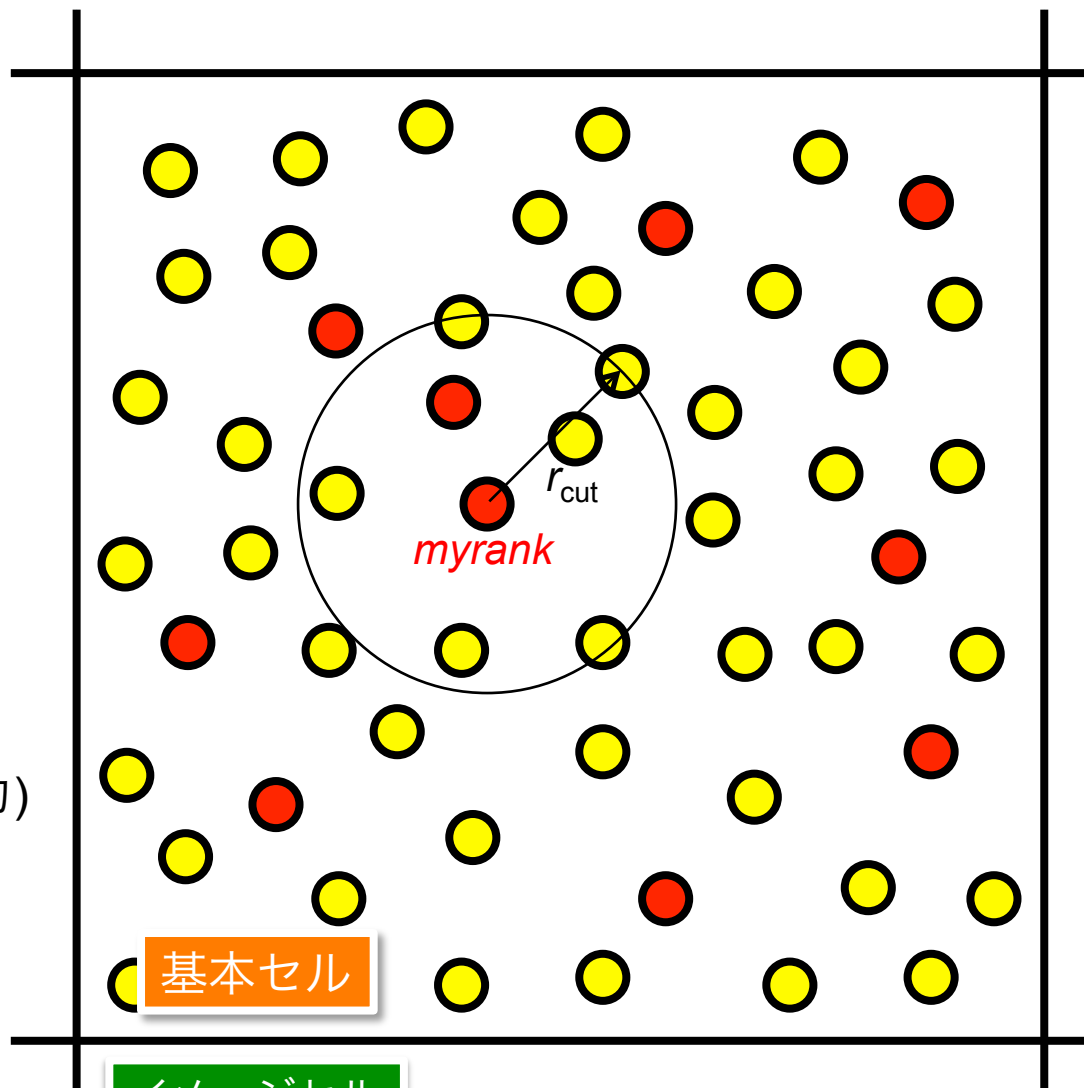
$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \mathbf{F}_i$$

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



基本セル

イメージセル

分子動力学計算の並列化特性(2) プロセス分割

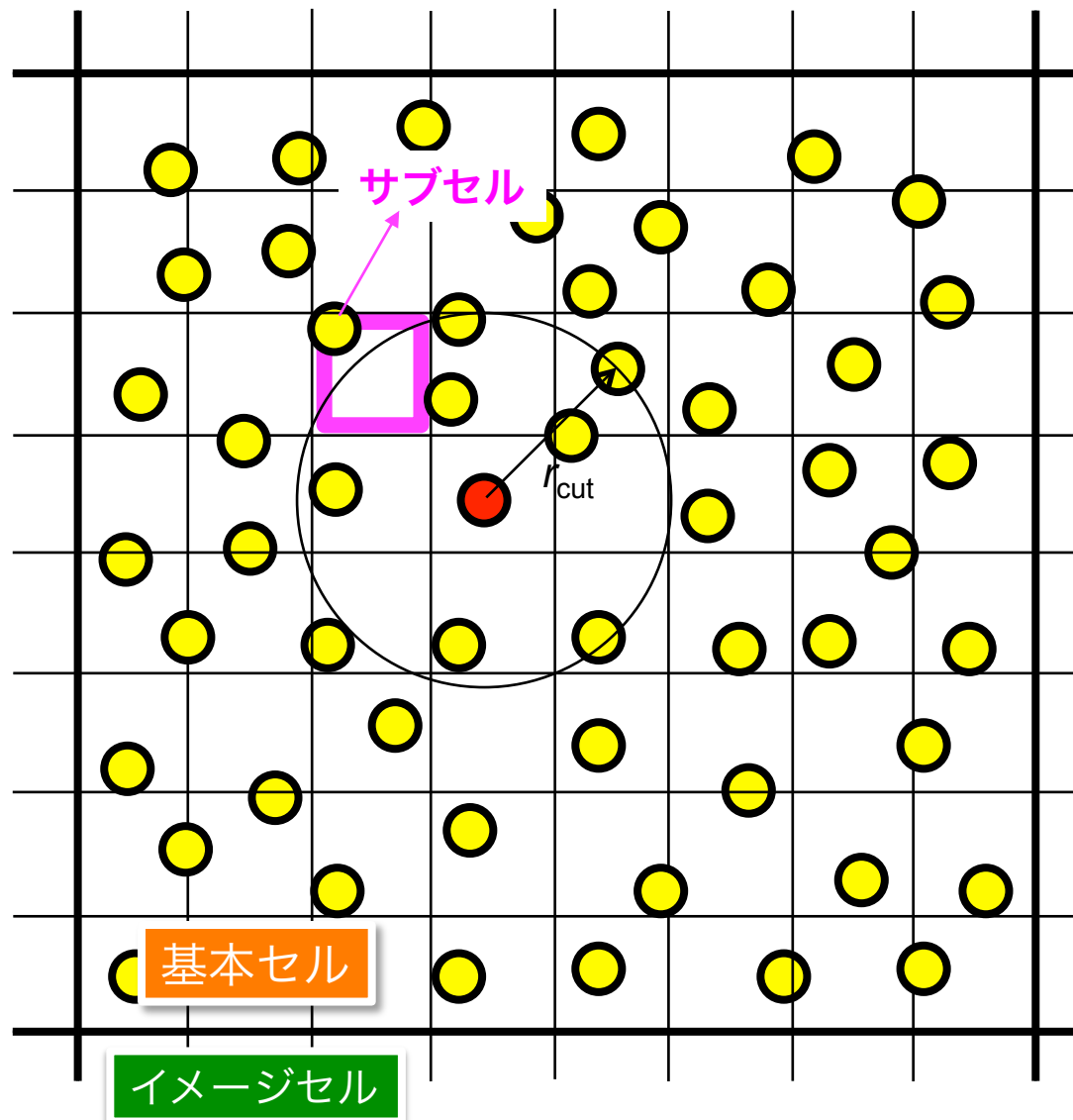
23 / 74

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

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

24 / 74

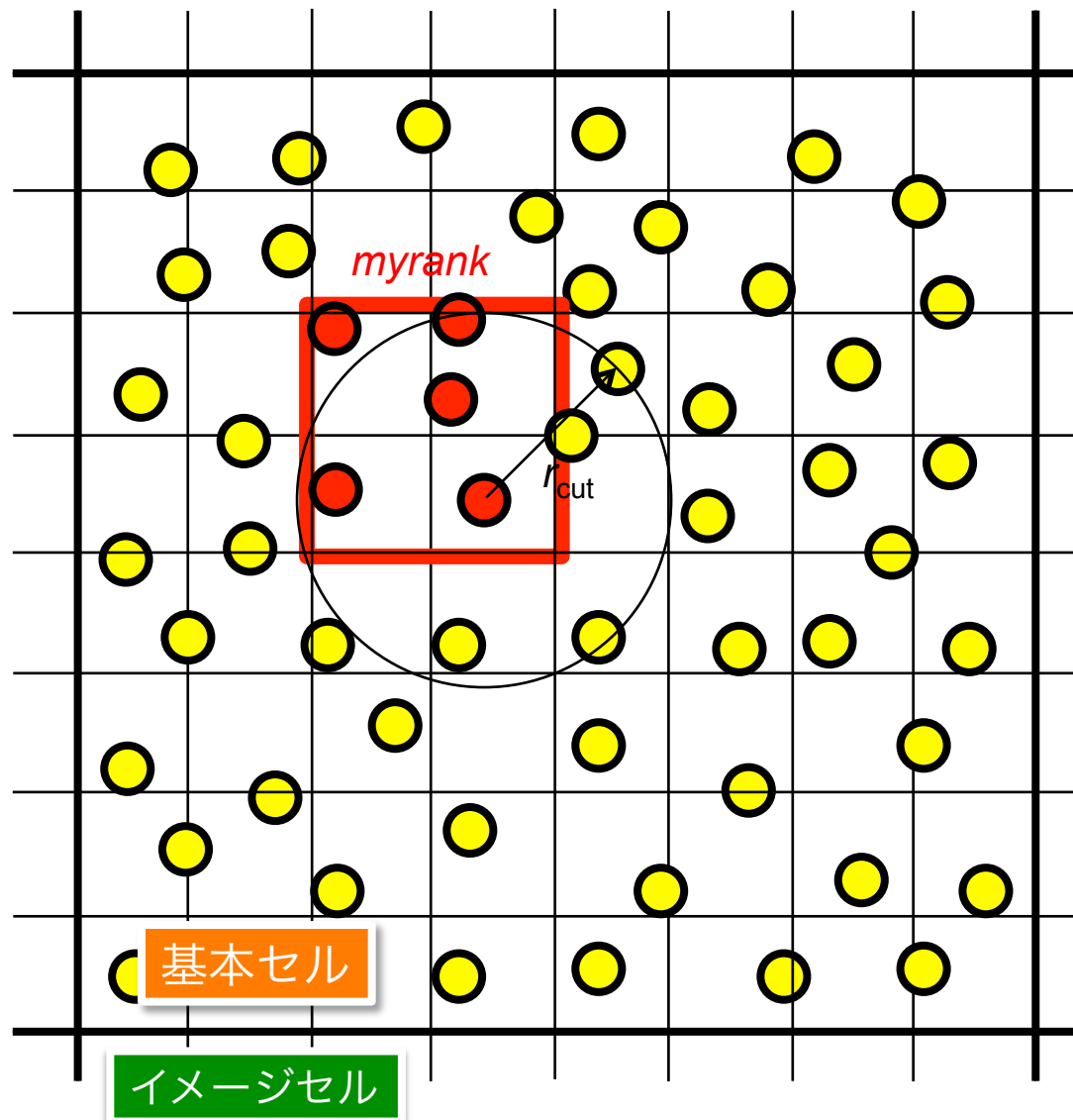
$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \mathbf{F}_i$$

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

25 / 74

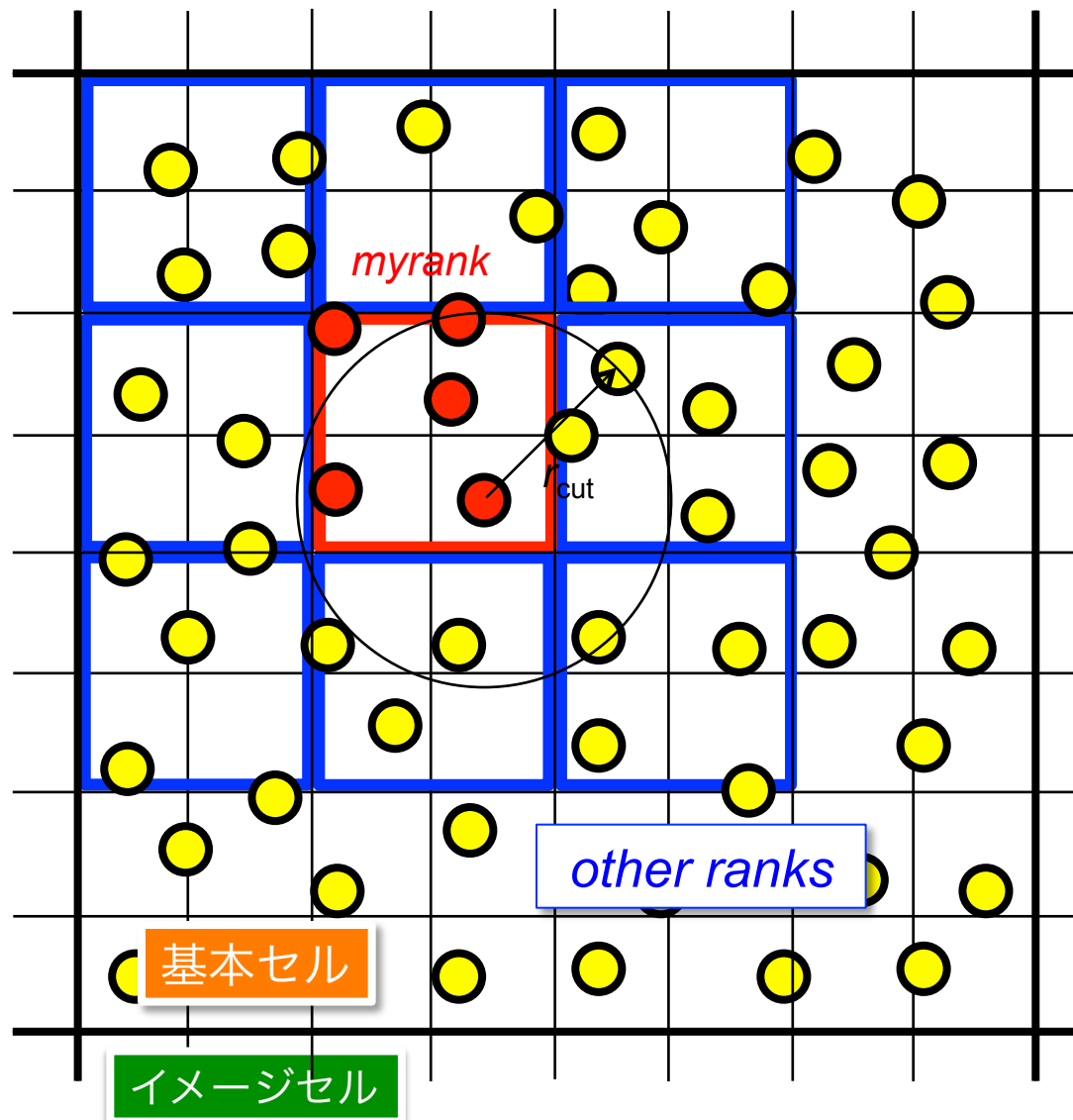
$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \mathbf{F}_i$$

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

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

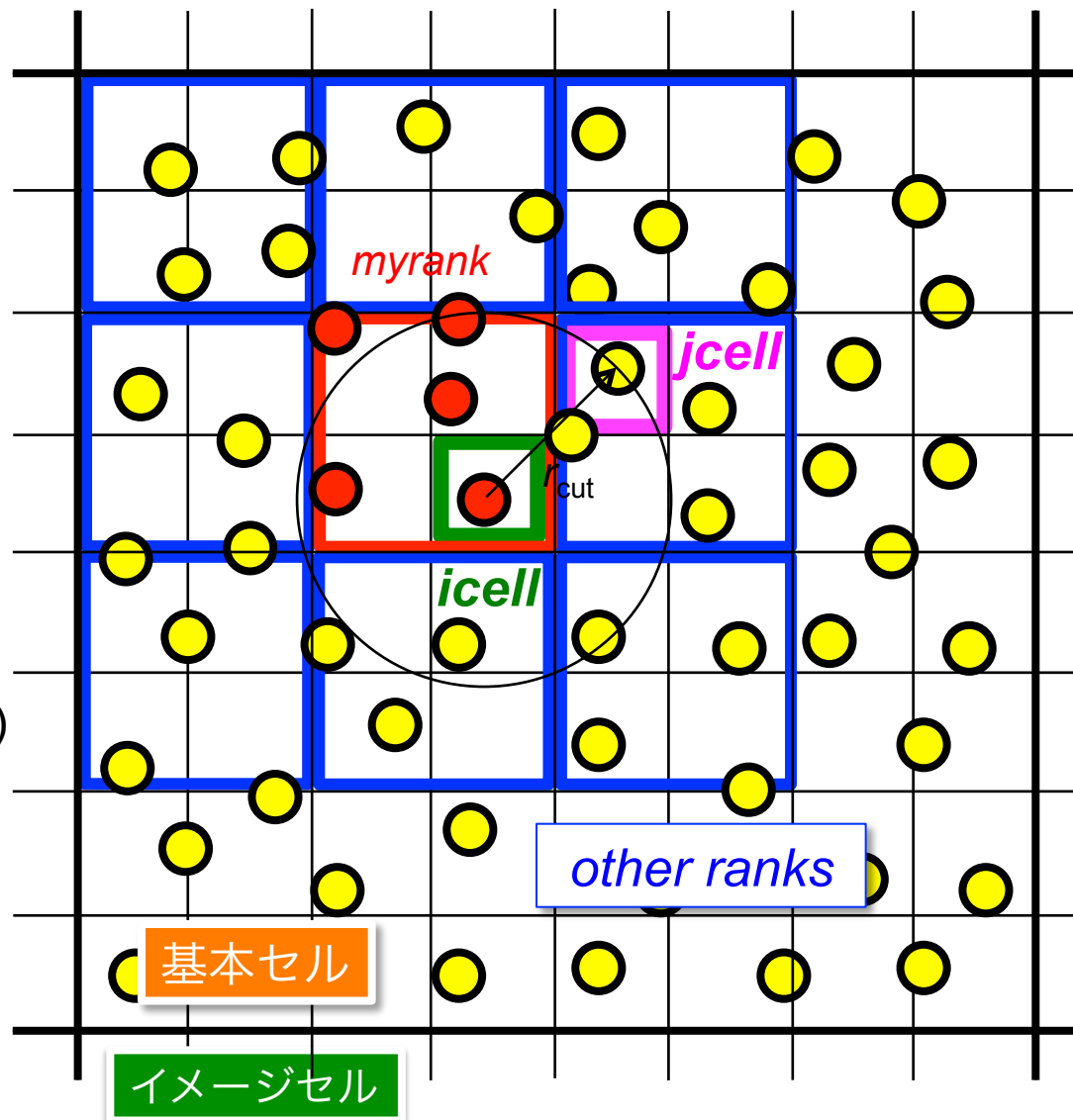
i ごと独立な演算
(粒度 N)

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
  力学・熱力学量計算
enddo
```

例) プロセスあたり 4 サブセル



基本セル

イメージセル



分子動力学計算の並列化特性(2) プロセス分割

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

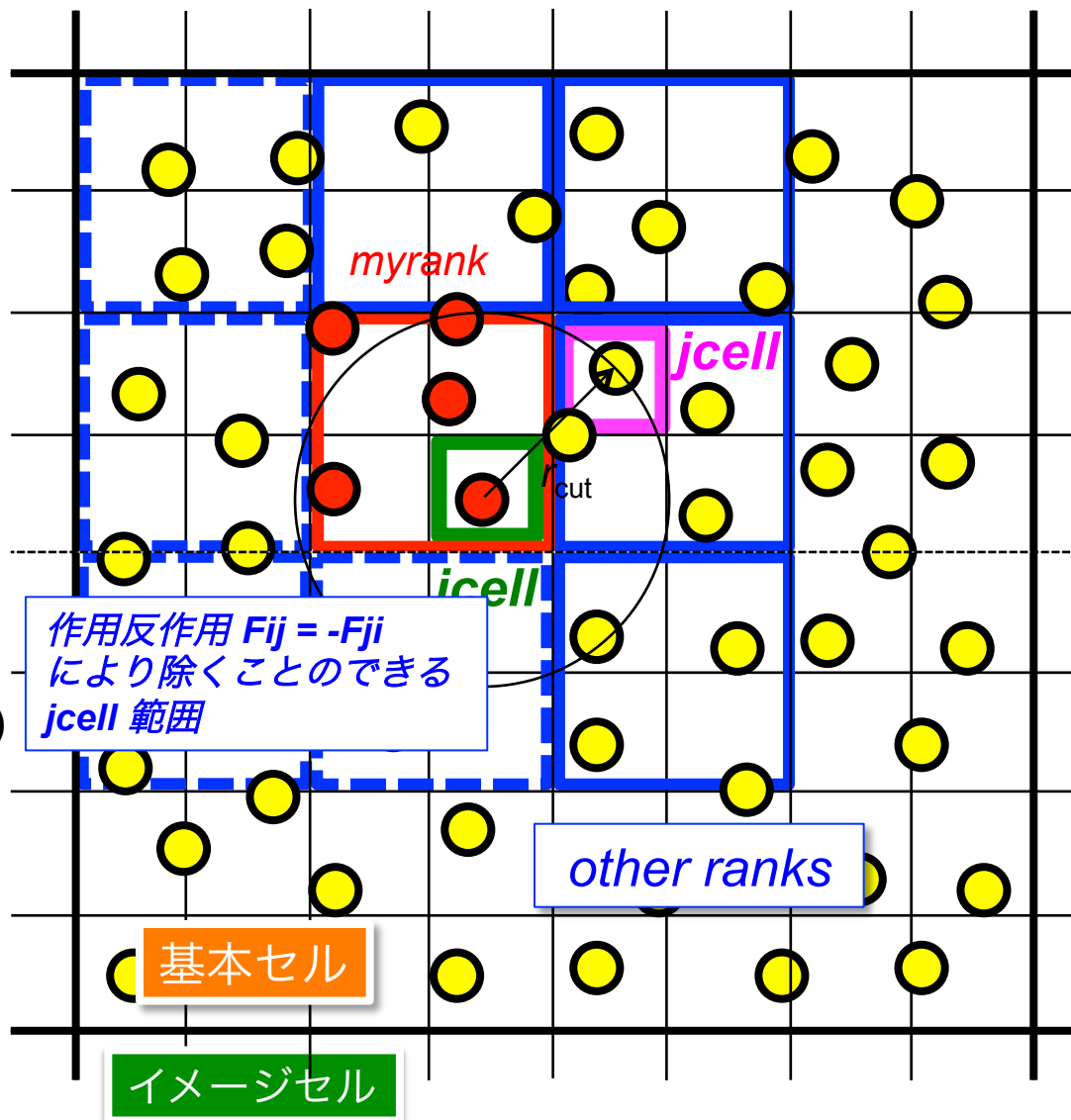
i ごと独立な演算
(粒度 N)

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
  力学・熱力学量計算
enddo
```

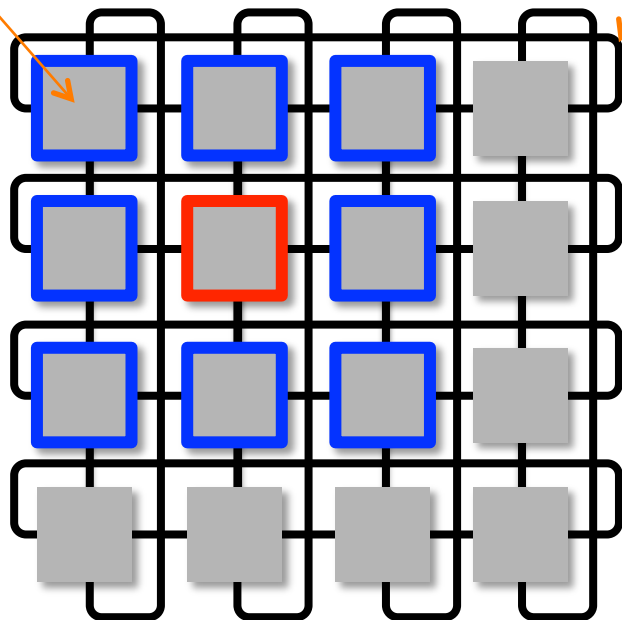
例) プロセスあたり 4 サブセル



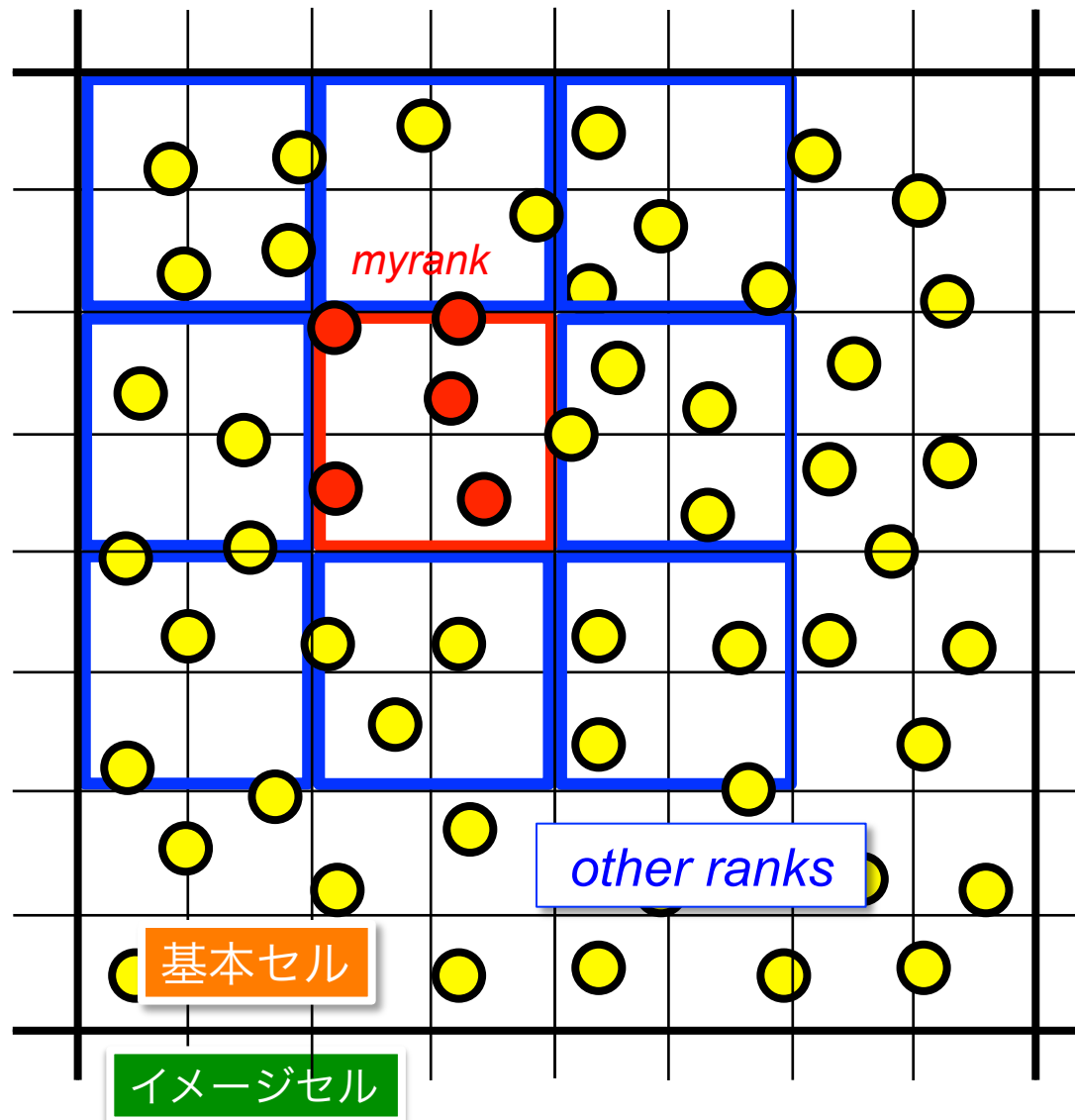
分子動力学計算の並列化特性(2) プロセス分割

計算機 (ノード)

通信ケーブル



トーラスネットワーク



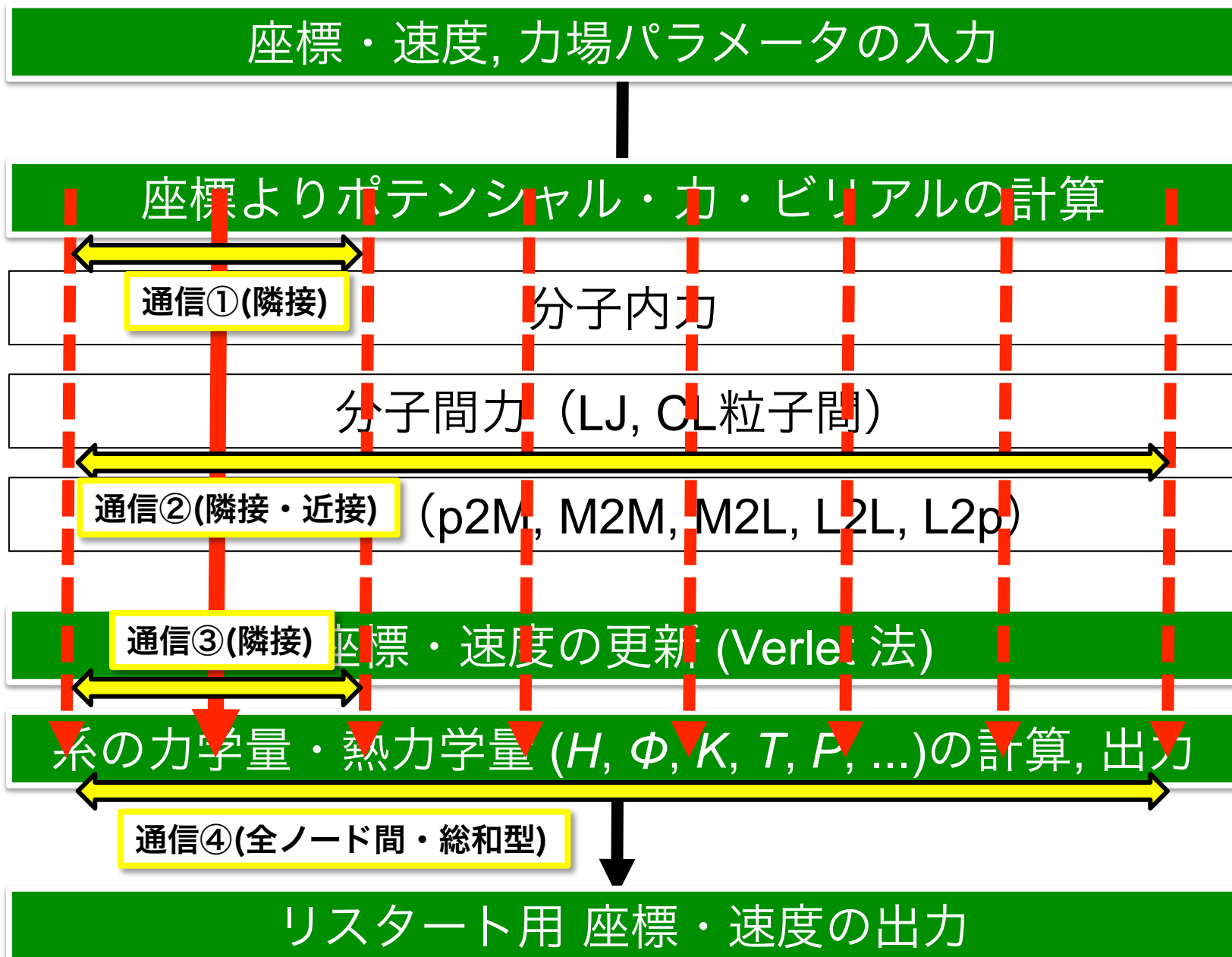
空間ドメイン分割による
MPI 並列化:

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

cycle $> 10^6$



分子動力学計算の並列化特性(3) 通信パターン

30/74

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.

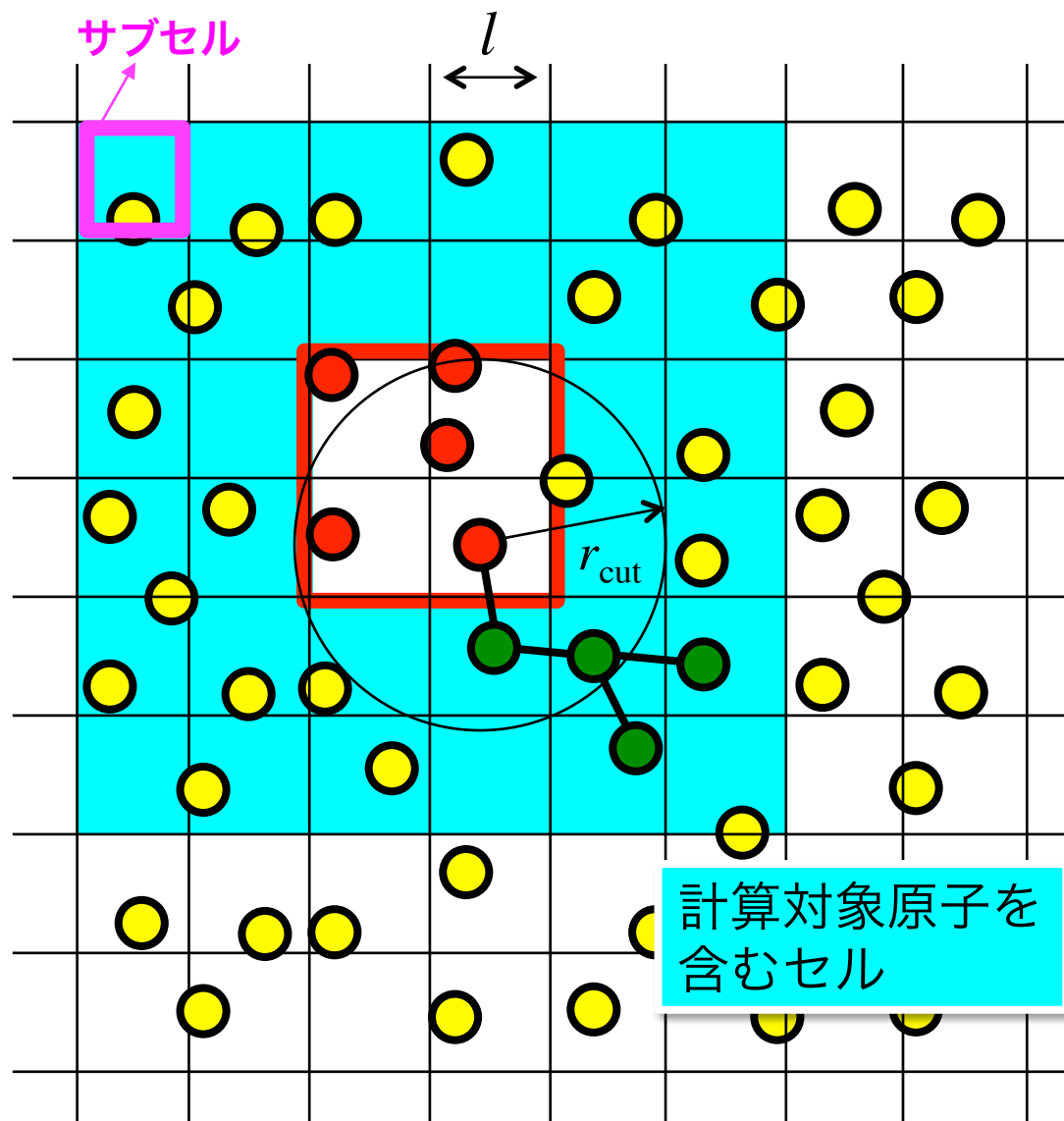
特徴:

- ・ 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,
 $8 \text{ byte}(\text{real} * 8) * 3(\text{xyz}) * 40$
 $= 1 \text{ KB/サブセル}$

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

31 / 74

通信①(隣接)

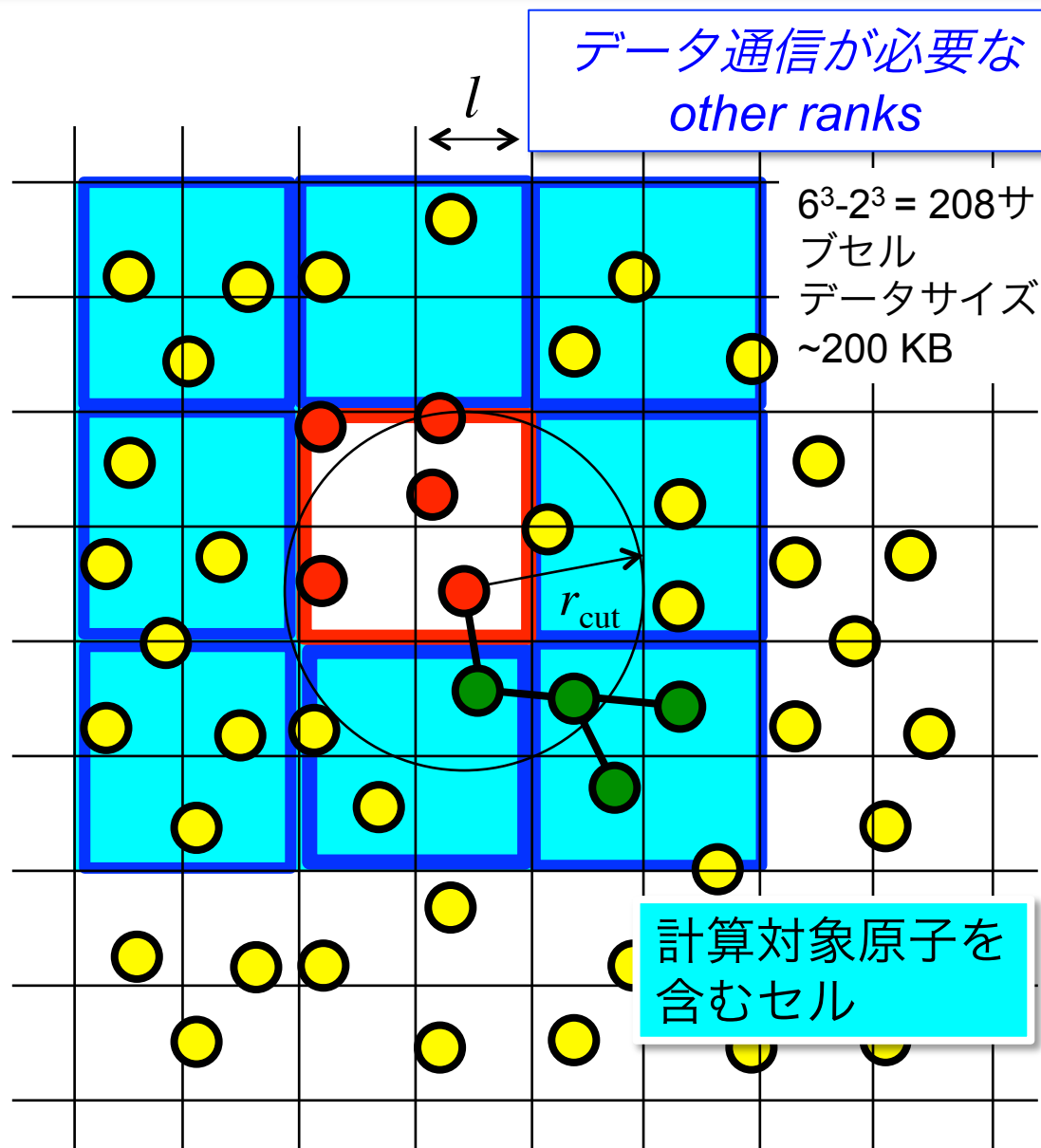
分子内力, 分子間力の計算に必要な相手原子座標 r_j, r_k, r_l の通信.

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

32 / 74

通信①(隣接)

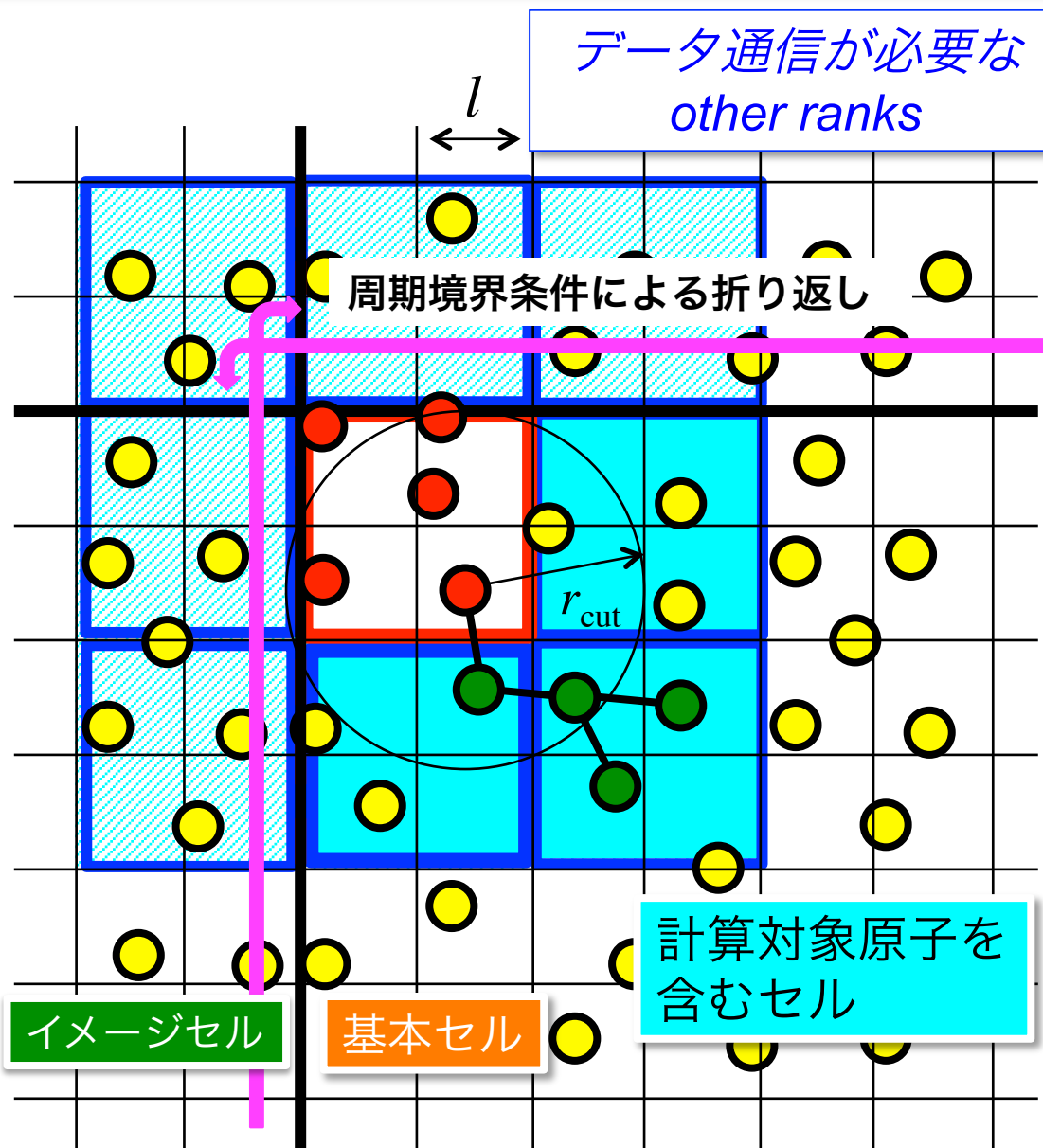
分子内力, 分子間力の計算に必要な相手原子座標 r_j, r_k, r_l の通信.

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

33 / 74

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:

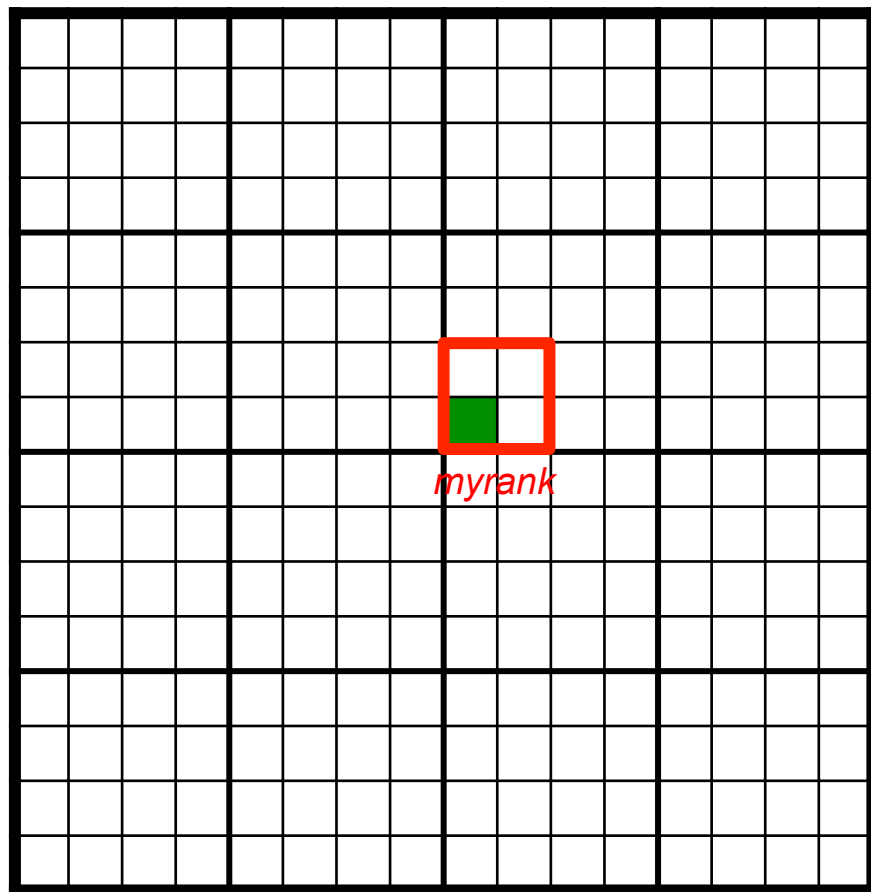
- ・ 通信対象範囲が階層ごと異なる.
上位階層ほど遠方.

- ・ 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

34 / 74

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.

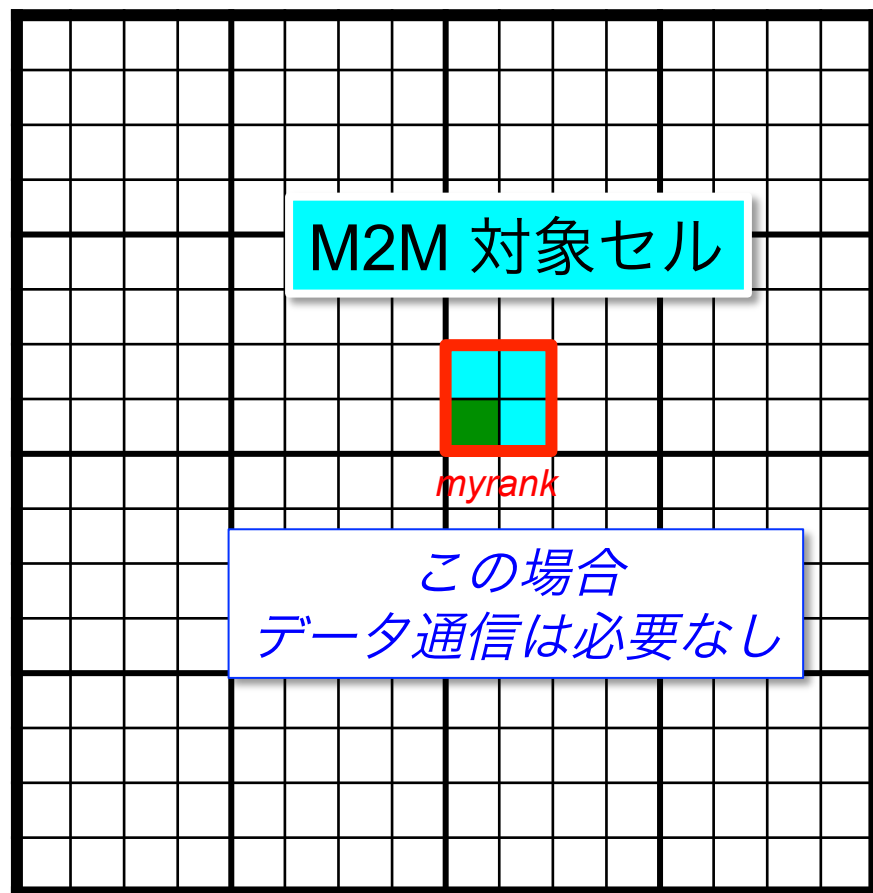
- ・ データサイズ

例) $n_{max}=4$ では

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

$$= 0.4 \text{ KB/スーパーセル}$$

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

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

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

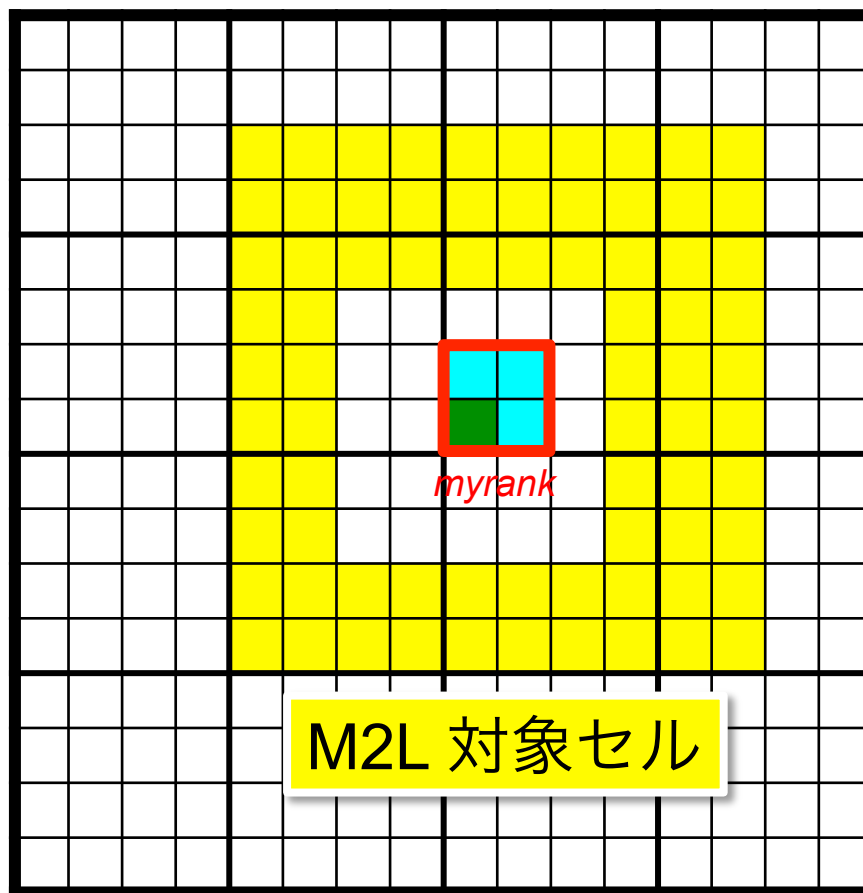
$$= 0.4 \text{ KB/スーパーセル}$$

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

レベル 0

注意

プロセス内自セル位置
(0,0), (1,0), (0,1), (1,1)



M2L 対象セル

分子動力学計算の並列化特性(3) 通信パターン

36 / 74

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

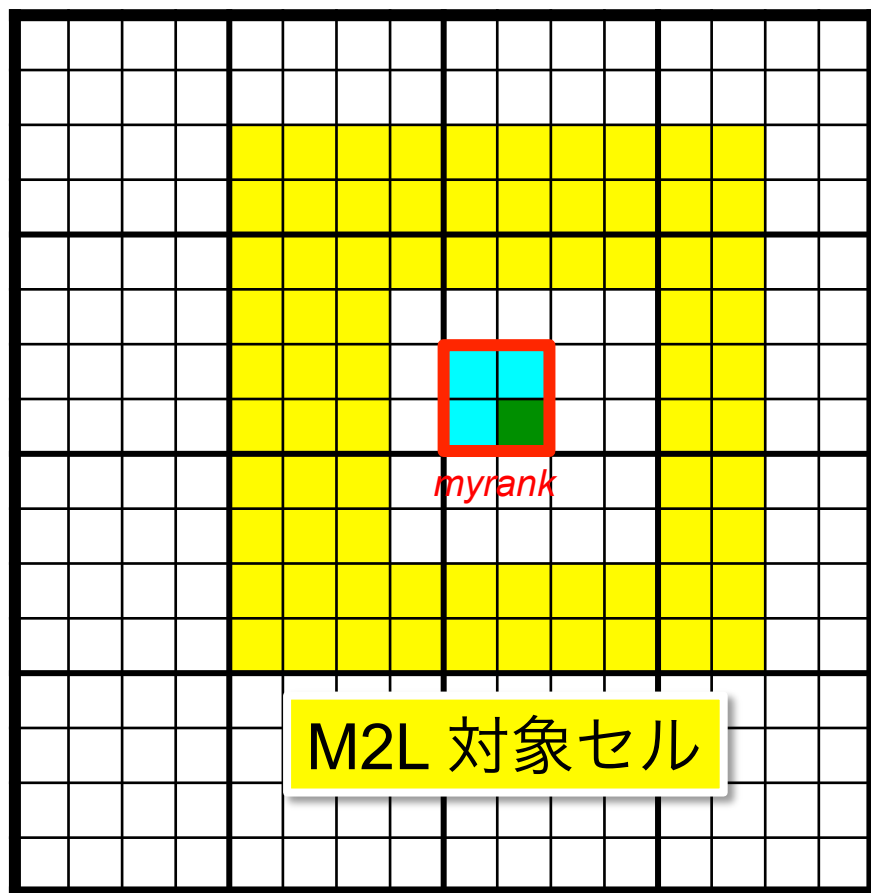
$$16 \text{ byte}(\text{complex} * 8) * (4+1)^2$$

$$= 0.4 \text{ KB/スーパーセル}$$

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

37 / 74

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

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

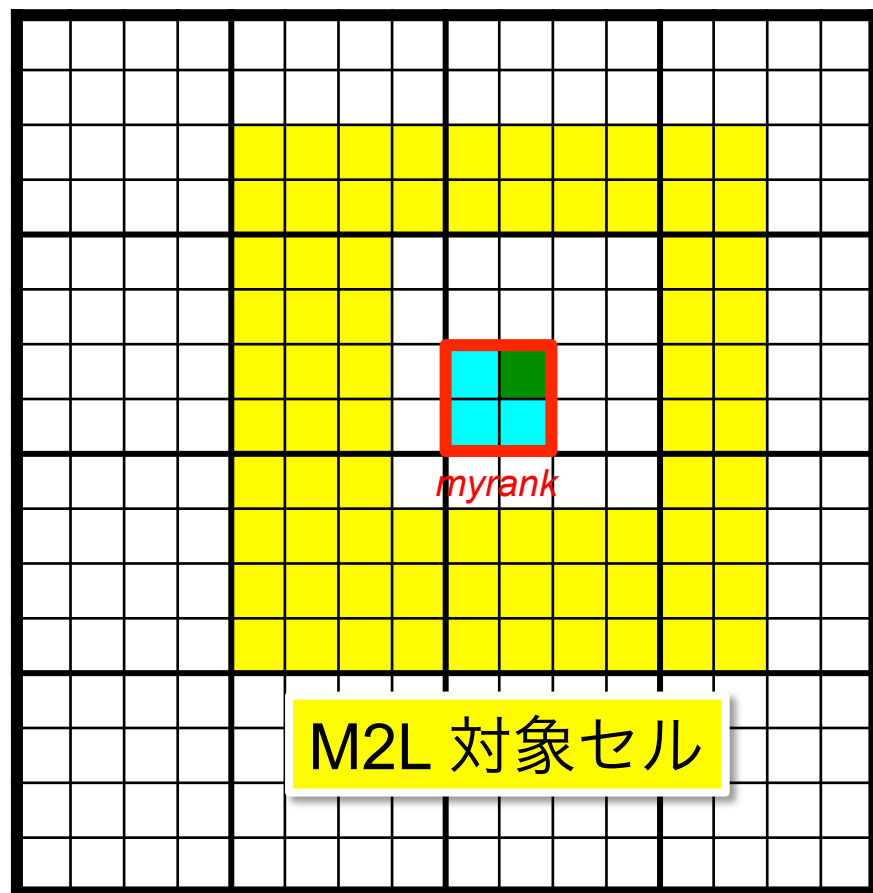
$$= 0.4 \text{ KB/スーパーセル}$$

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

38 / 74

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

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

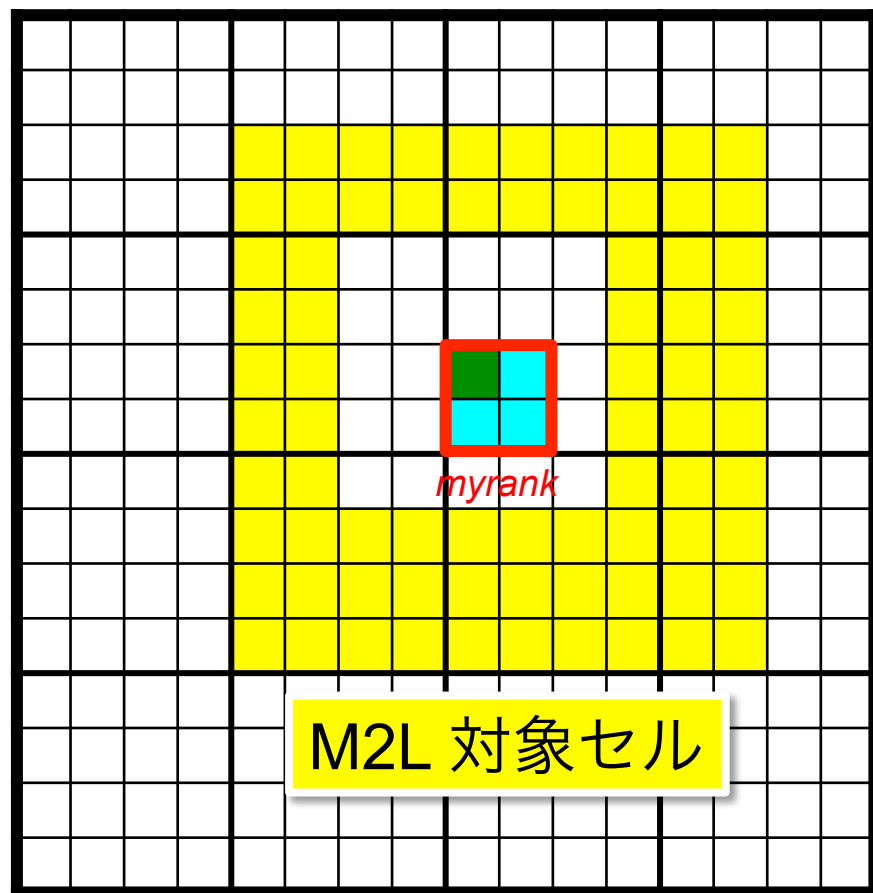
$$= 0.4 \text{ KB/スーパーセル}$$

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

39 / 74

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

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

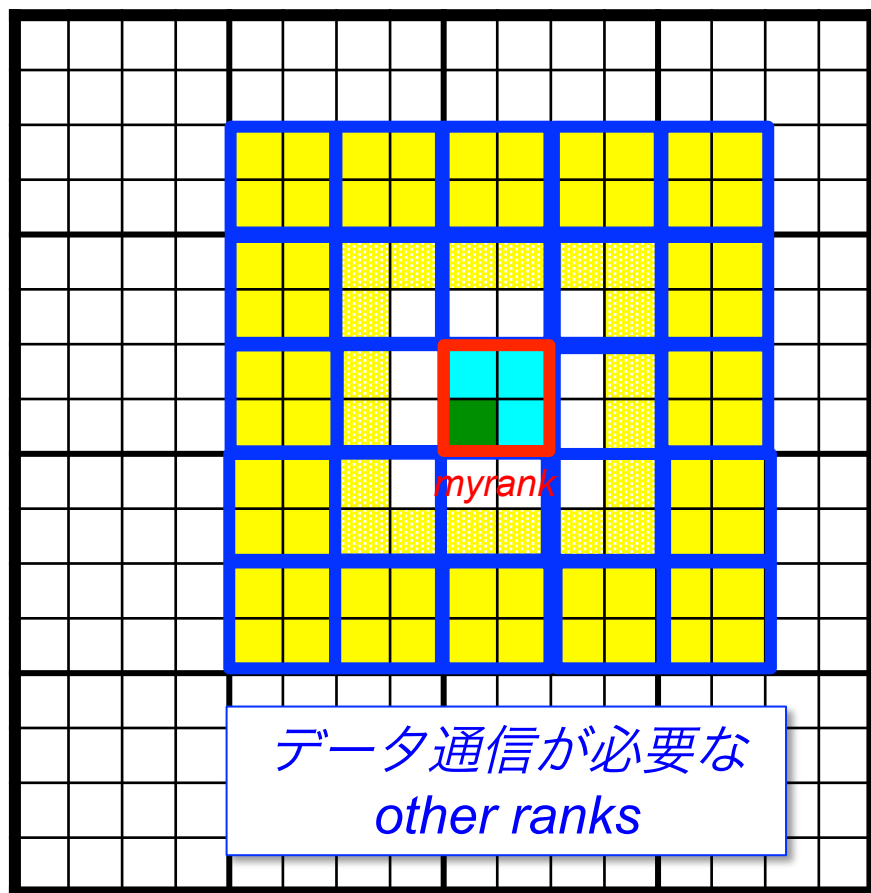
$$= 0.4 \text{ KB/スーパーセル}$$

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

40 / 74

レベル 1

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.

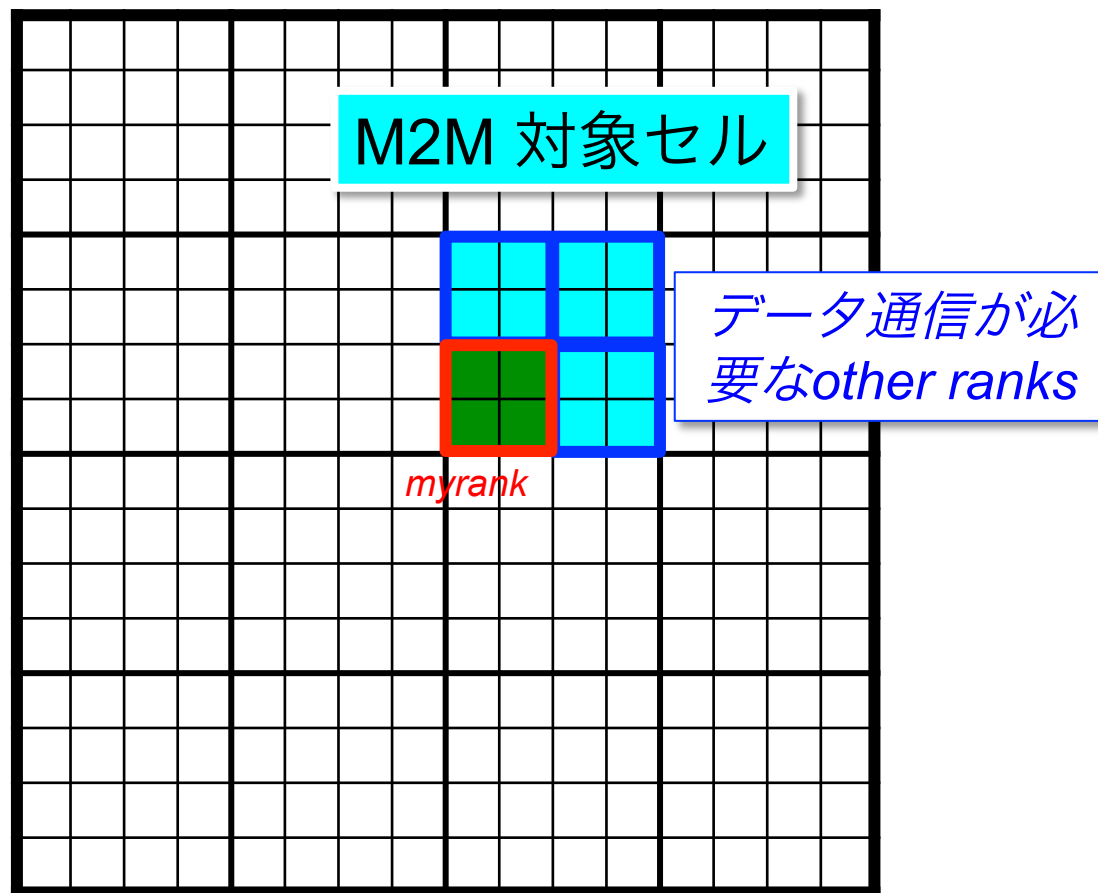
- ・データサイズ

例) $n_{max}=4$ では

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

$$= 0.4 \text{ KB/スーパーセル}$$

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

41 / 74

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

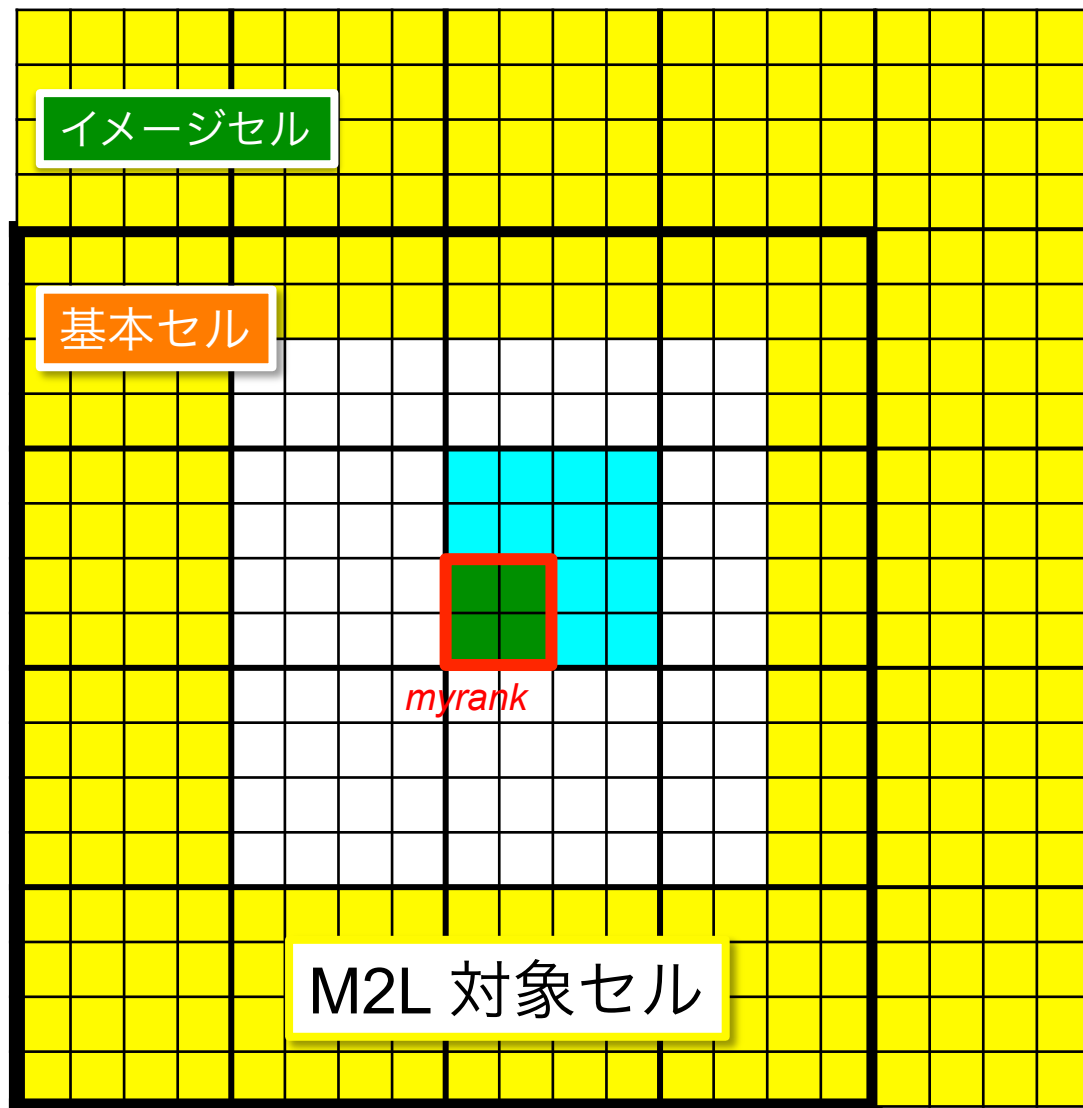
例) $n_{max}=4$ では

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

$$= 0.4 \text{ KB/スーパーセル}$$

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

レベル 1



分子動力学計算の並列化特性(3) 通信パターン

42 / 74

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

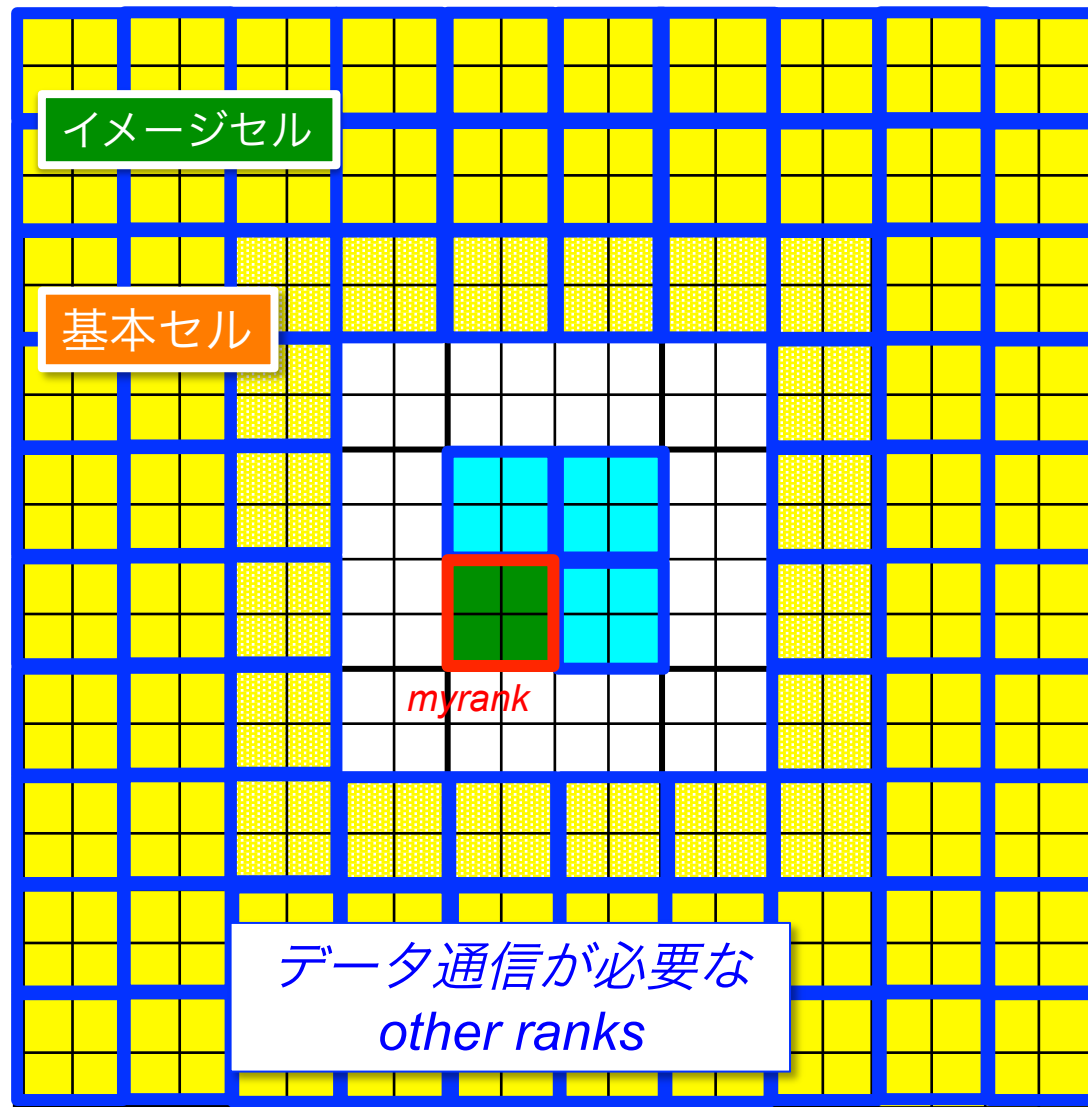
例) $n_{max}=4$ では

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

$$= 0.4 \text{ KB/スーパーセル}$$

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

レベル 1



分子動力学計算の並列化特性(3) 通信パターン

43 / 74

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

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

$$= 0.4 \text{ KB/スーパーセル}$$

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

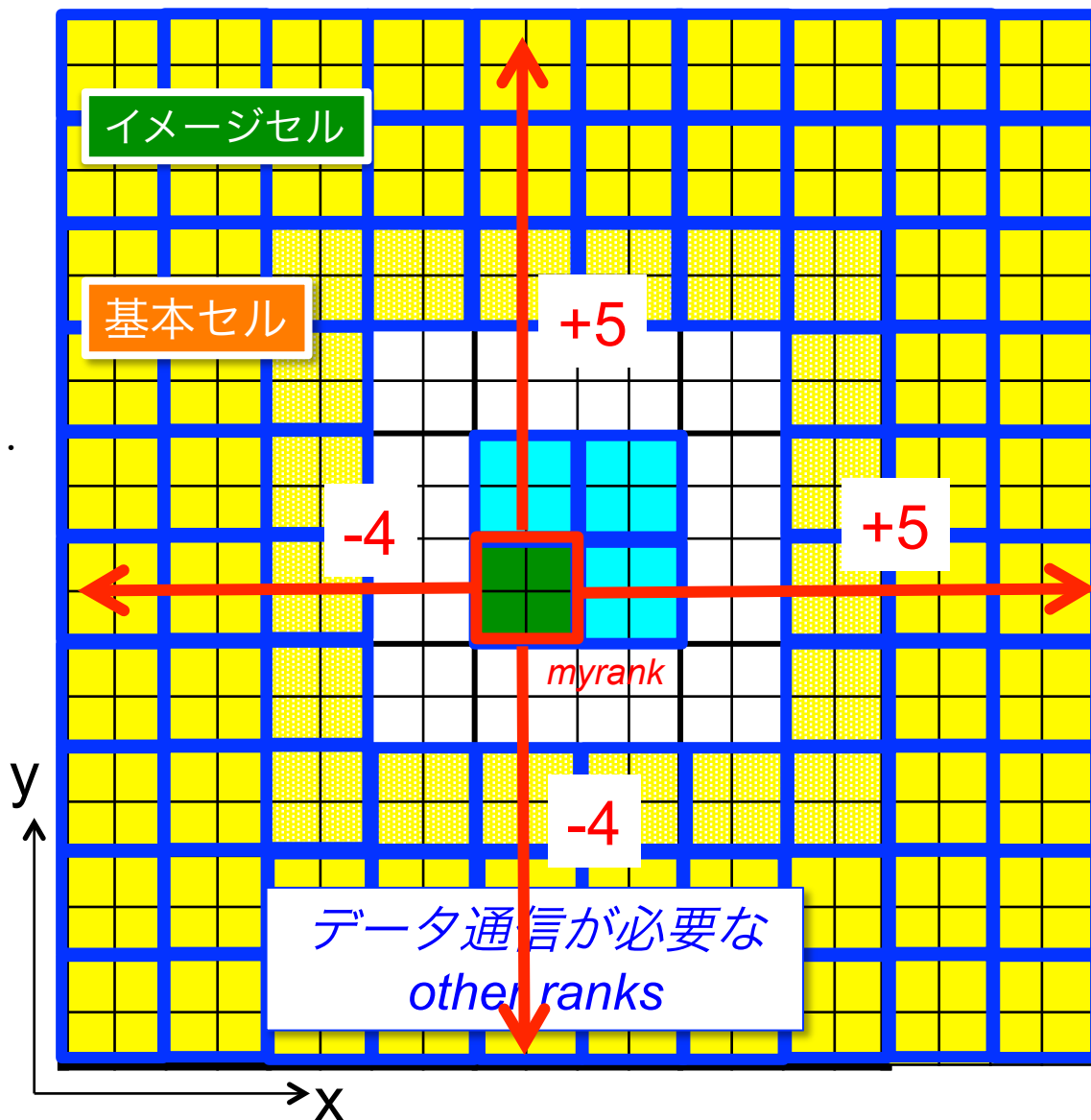
注意点 (上位階層):

- ・ 軸ごとrank参照範囲が異なる

右の例では, x方向 -4 ~ +5

y方向 -4 ~ +5

レベル 1



分子動力学計算の並列化特性(3) 通信パターン

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

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

$$= 0.4 \text{ KB/スーパーセル}$$

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

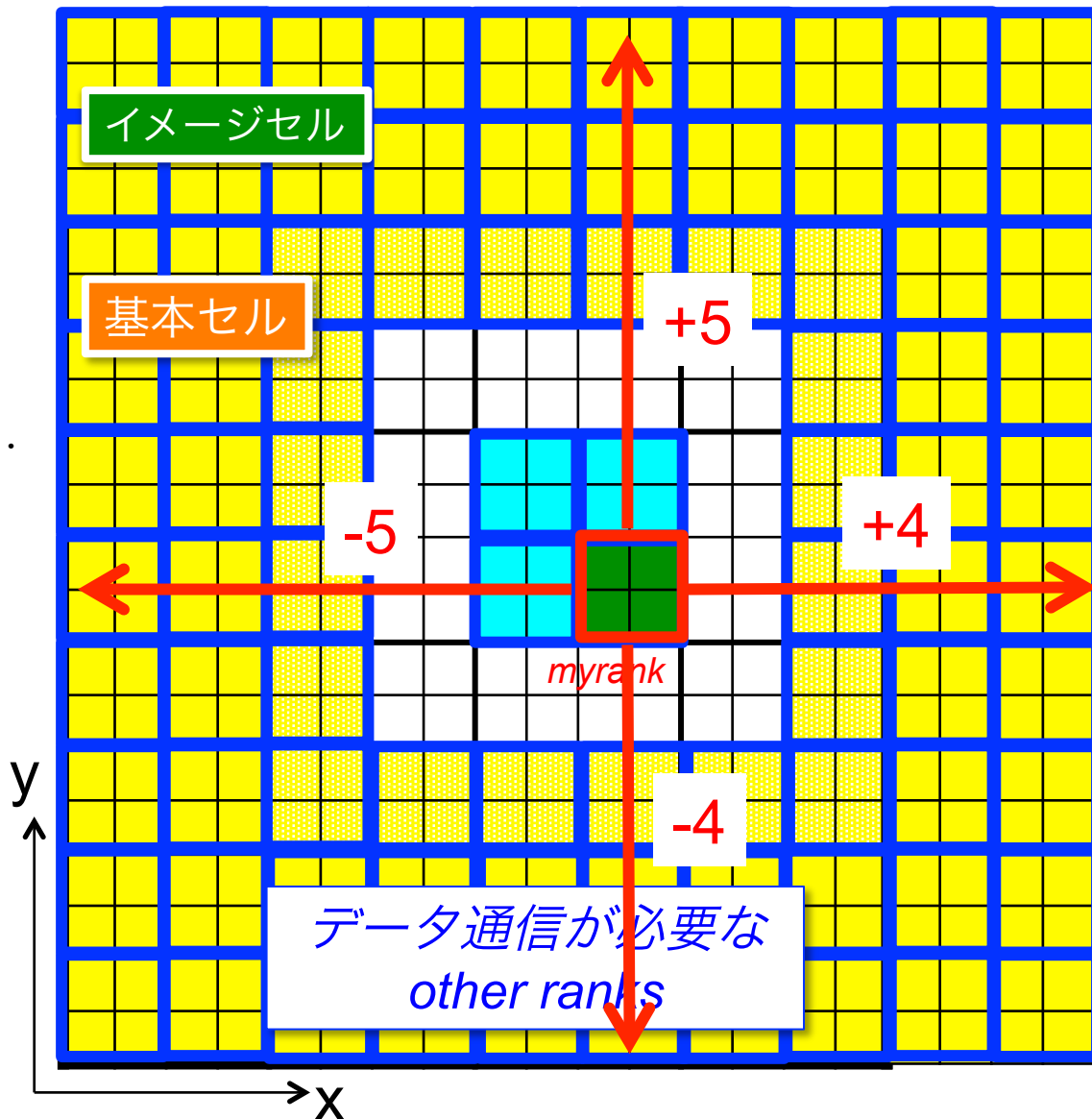
注意点 (上位階層):

- ・ 軸ごとrank参照範囲が異なる

右の例では, x方向 -5 ~ +4

y方向 -4 ~ +5

レベル 1



分子動力学計算の並列化特性(3) 通信パターン

45 / 74

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

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

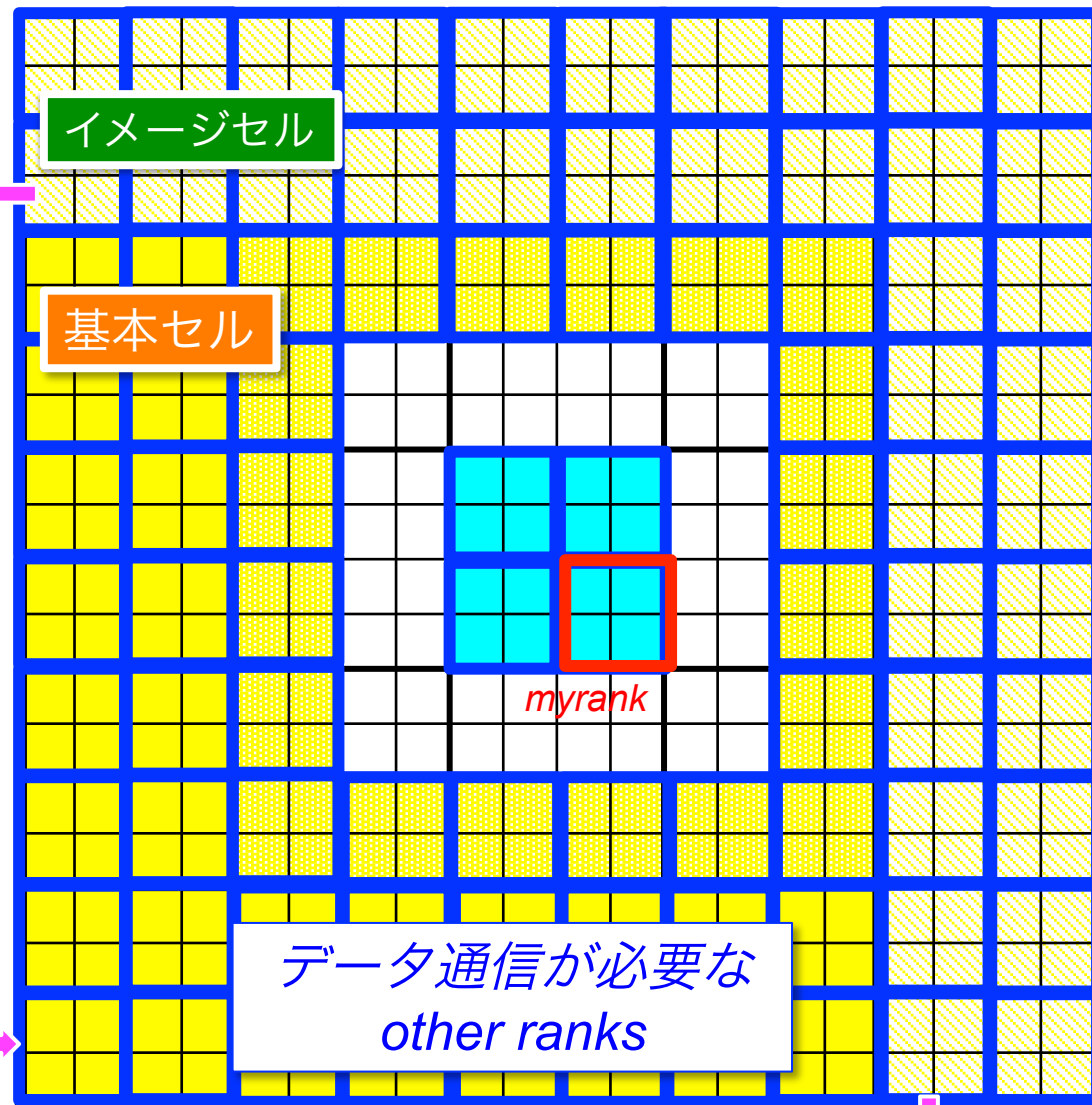
$$= 0.4 \text{ KB/スーパーセル}$$

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

注意点:

- ・ 軸ごとrank参照範囲が異なる
- ・ 周期境界条件による折り返し

レベル 1



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

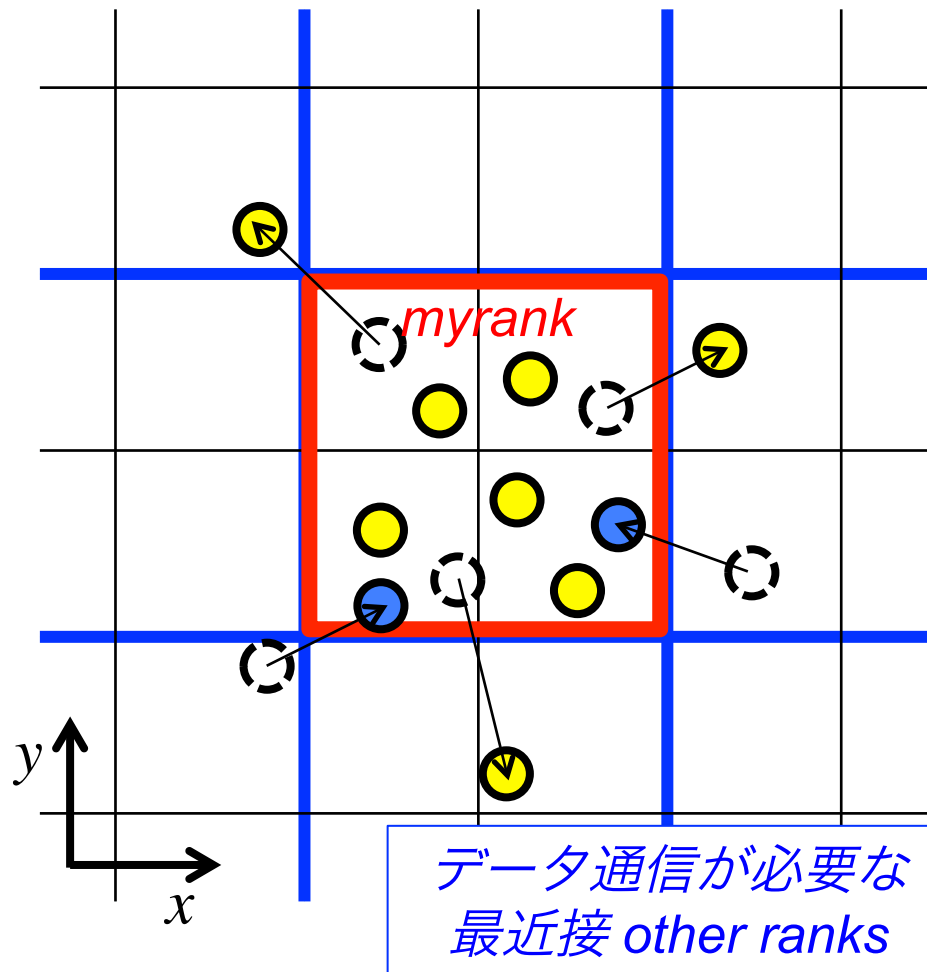
46 / 74

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

47 / 74

通信③(隣接)

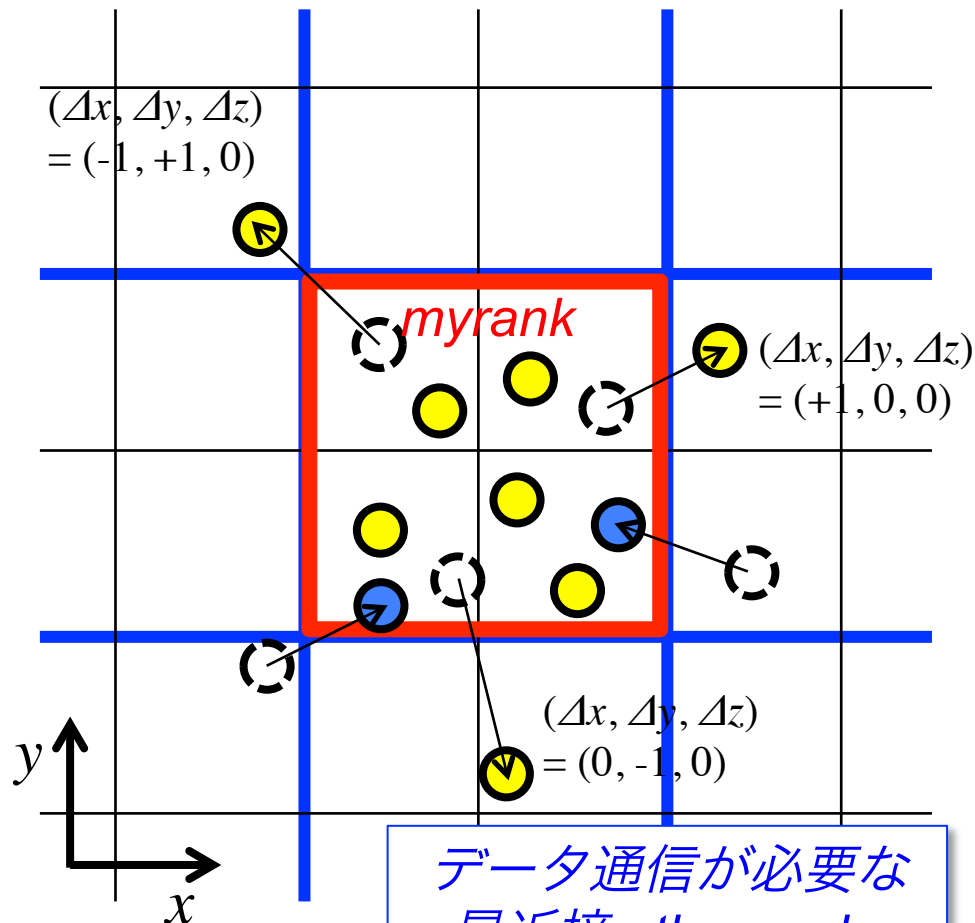
運動方程式の数値積分の結果, 原子が移動. これを各プロセスに再帰属させるための座標通信.

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

通信③(隣接)

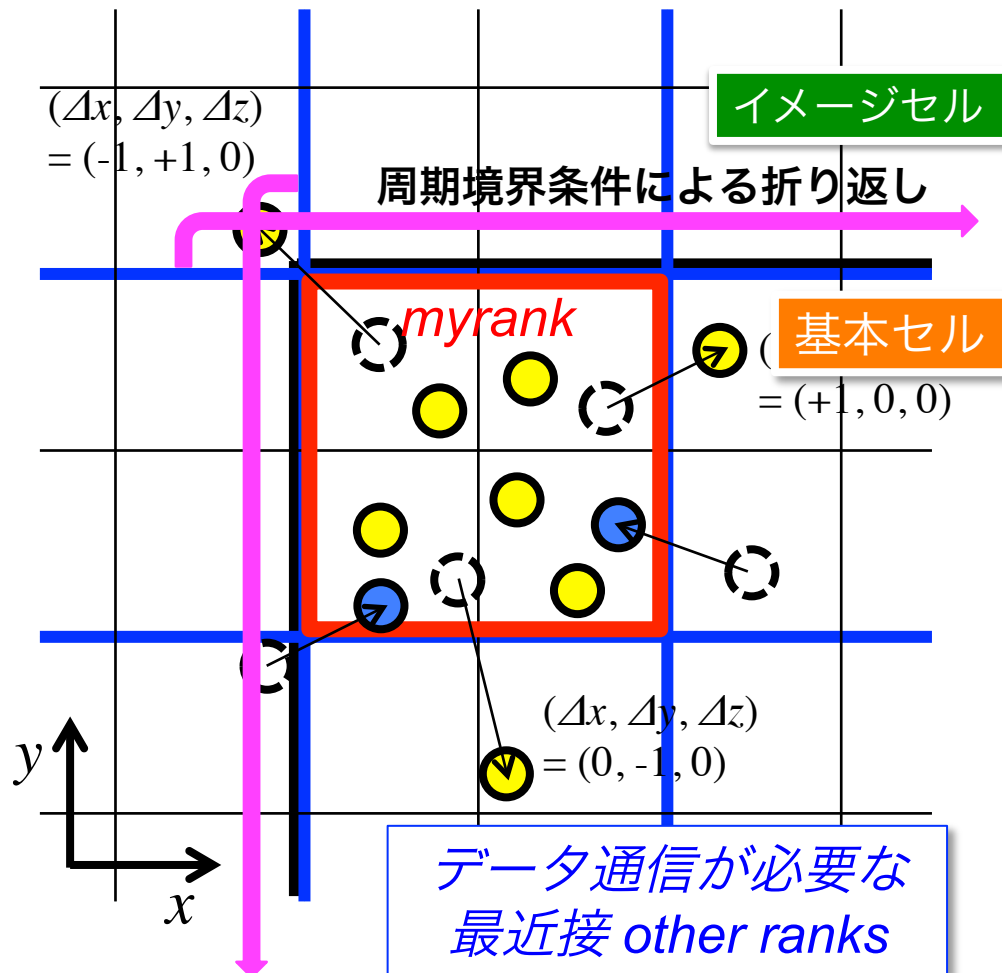
運動方程式の数値積分の結果, 原子が移動. これを各プロセスに再帰属させるための座標通信.

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

49 / 74

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

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

`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

50/74

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:

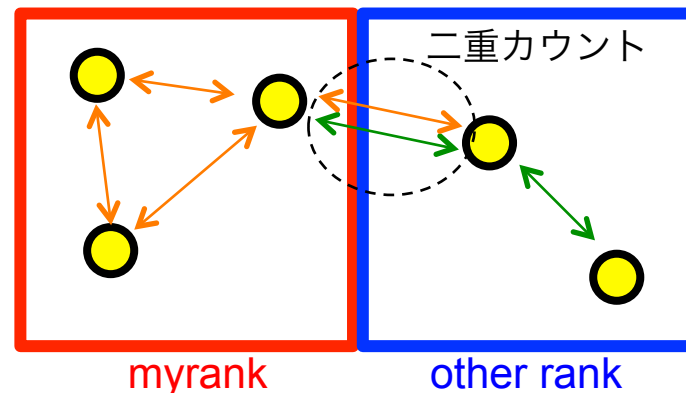
- ・ rank 間での二重カウント
特にポテンシャルエネルギーとビリアル

例) 運動エネルギー

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

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

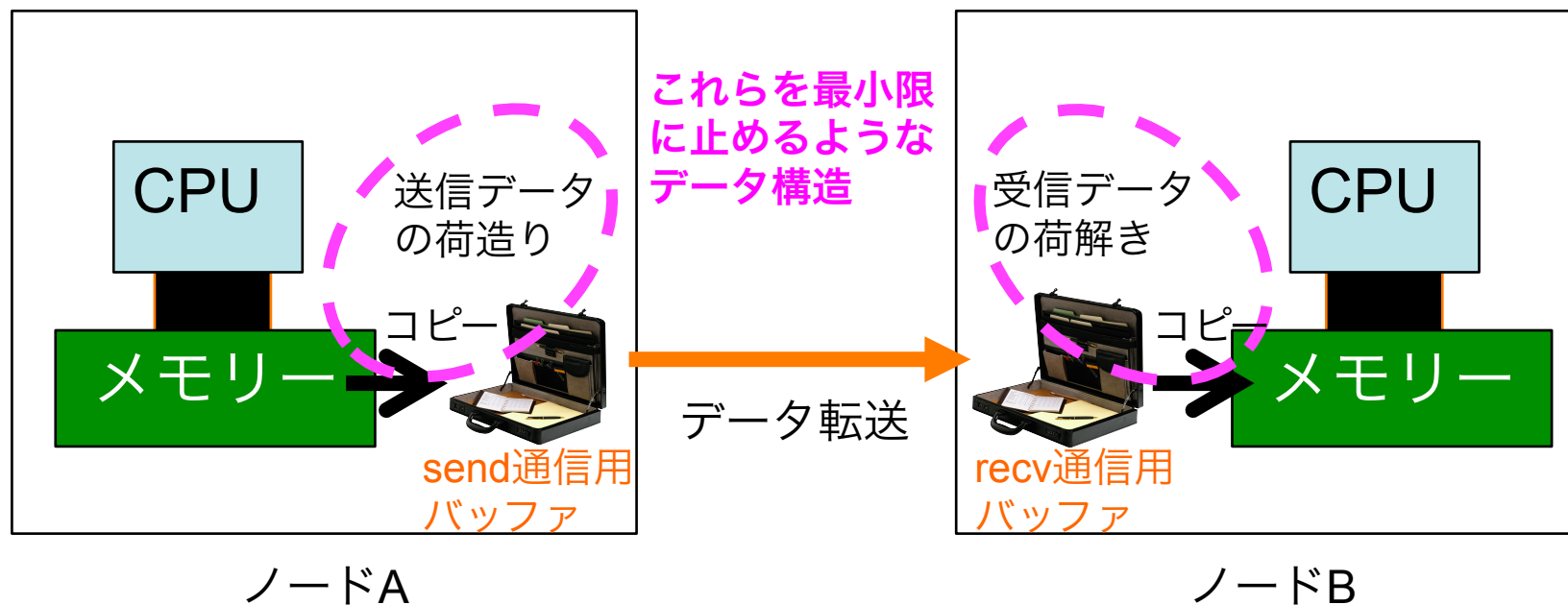
第二回

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.

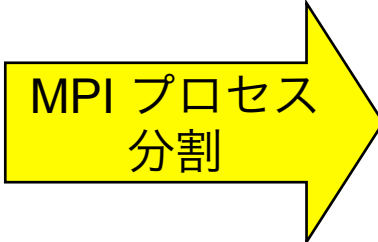
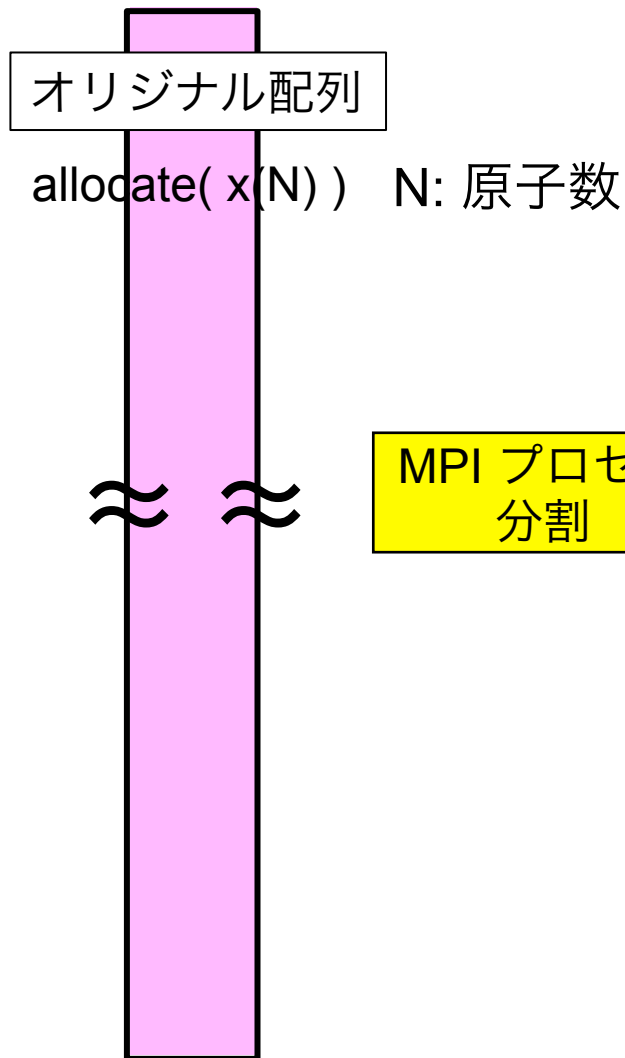
システムが大規模・複雑化する将来, アプリによらず重要になる (?).



[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イチから書き直す

MPI 並列化技術: データ構造 [1] 座標

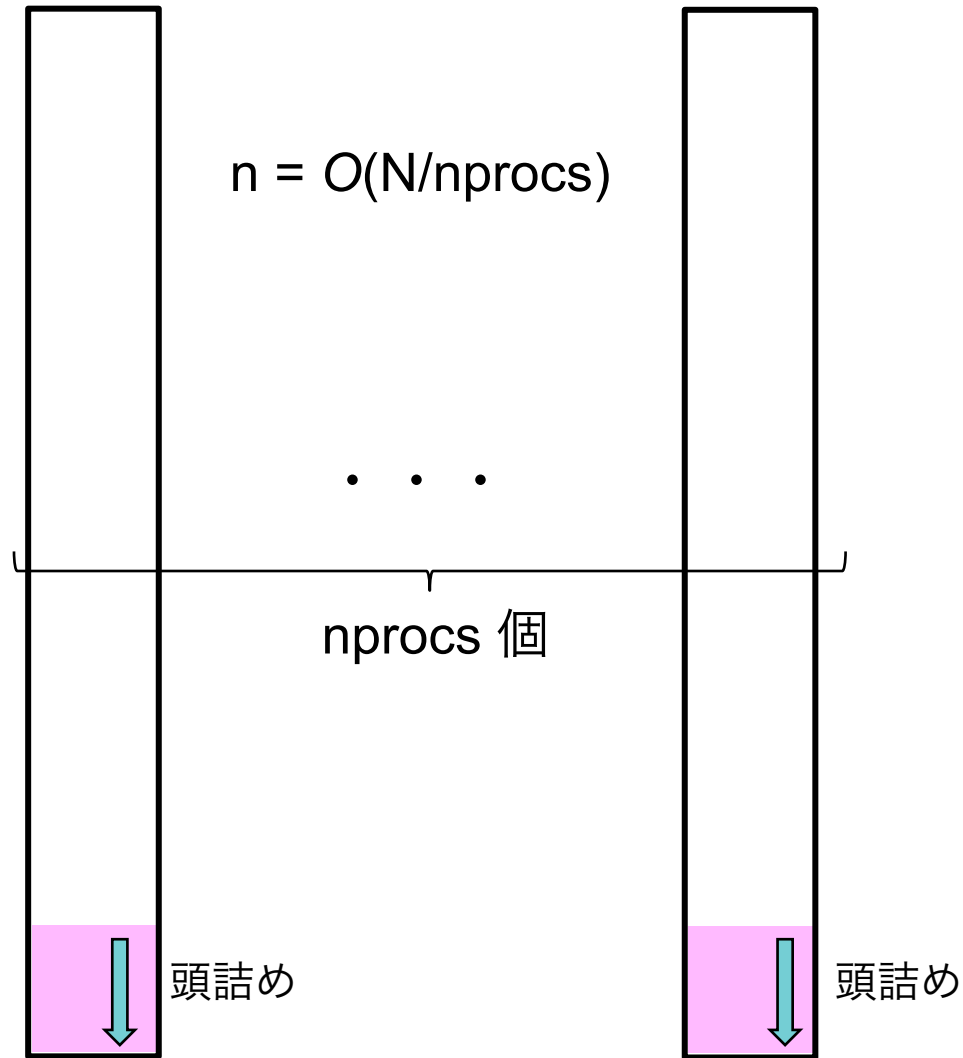
通常 of データ構造



プロセス分割した配列

`allocate(wk_x(n))`

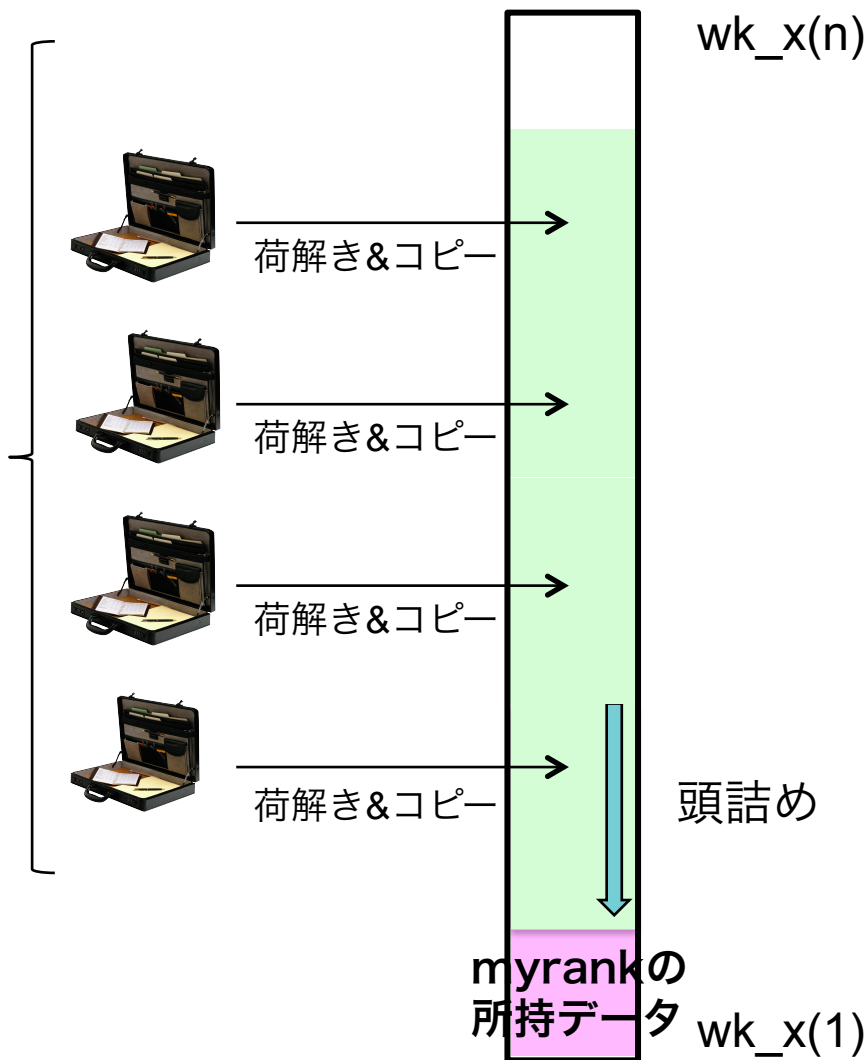
注) 実際には, 3次元の
`allocate(wk_xyz(3,n))`





転送された座標データの格納形態

other ranksからの
受信データ



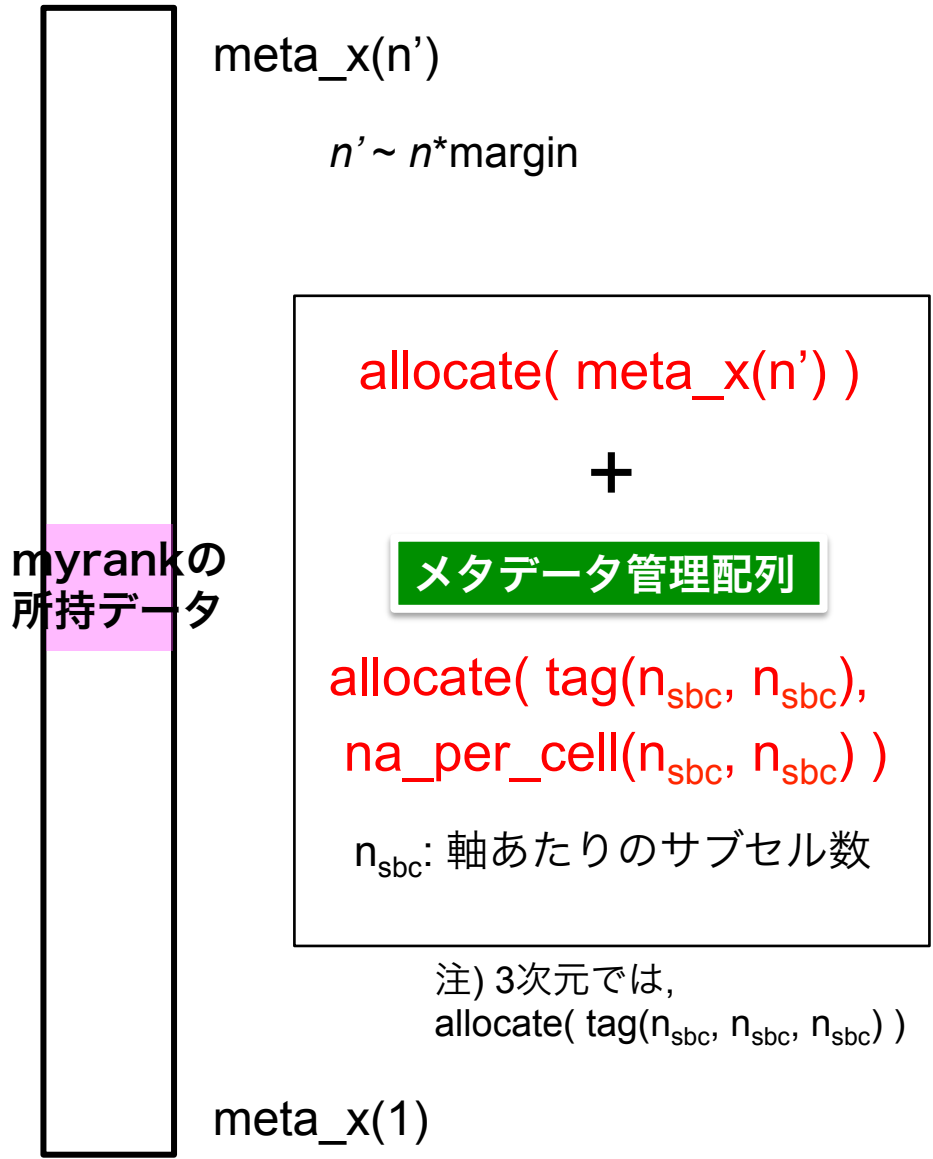


MPI 並列化技術: データ構造 [1] 座標

新しく考案した座標のデータ構造: **メタデータ構造**

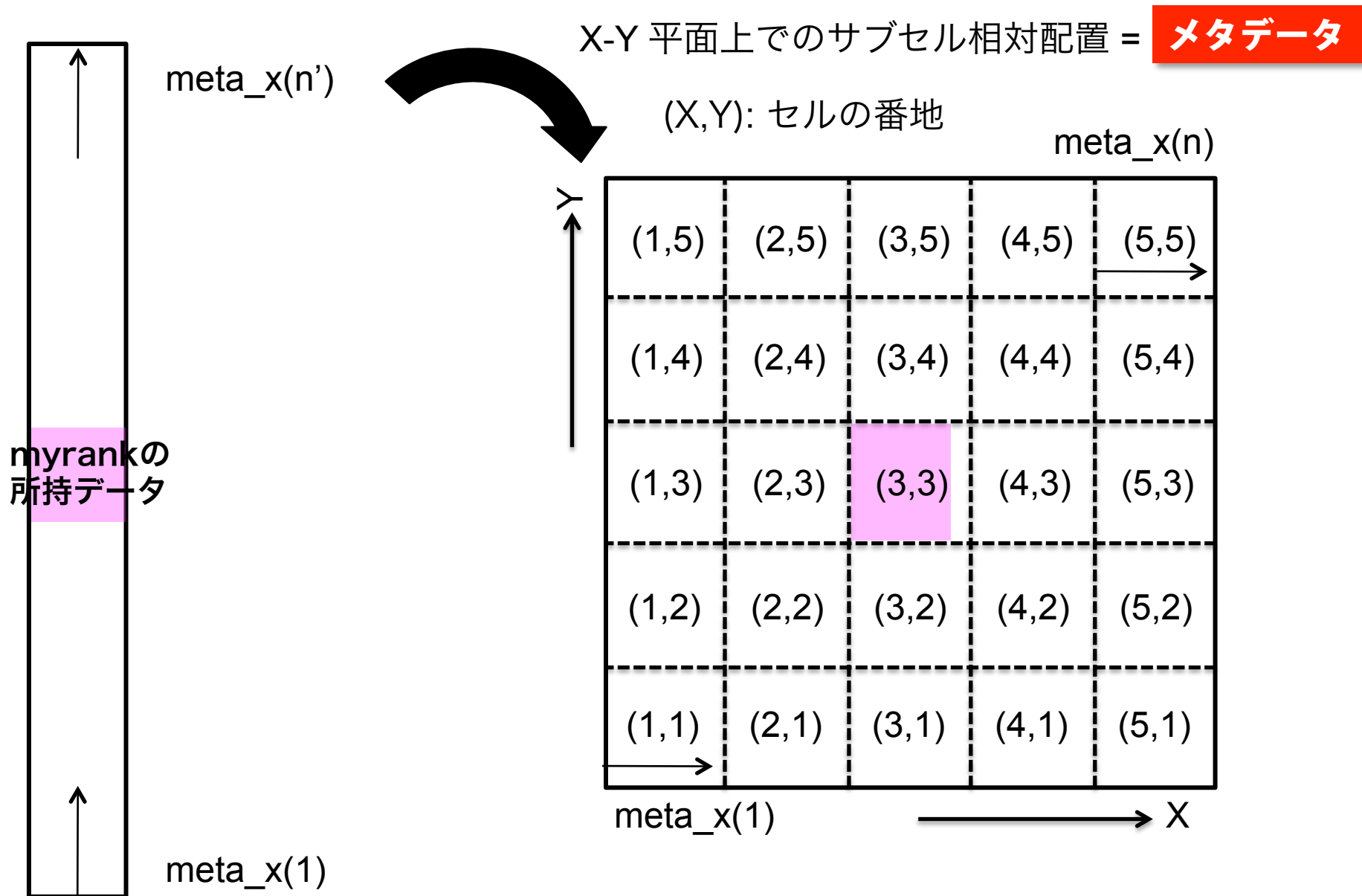
メタデータ: あるデータに関連する情報

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





MPI 並列化技術: データ構造 [1] 座標

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:

`allocate(tag(1:5,1:5))`

サブセルの格納原子数:

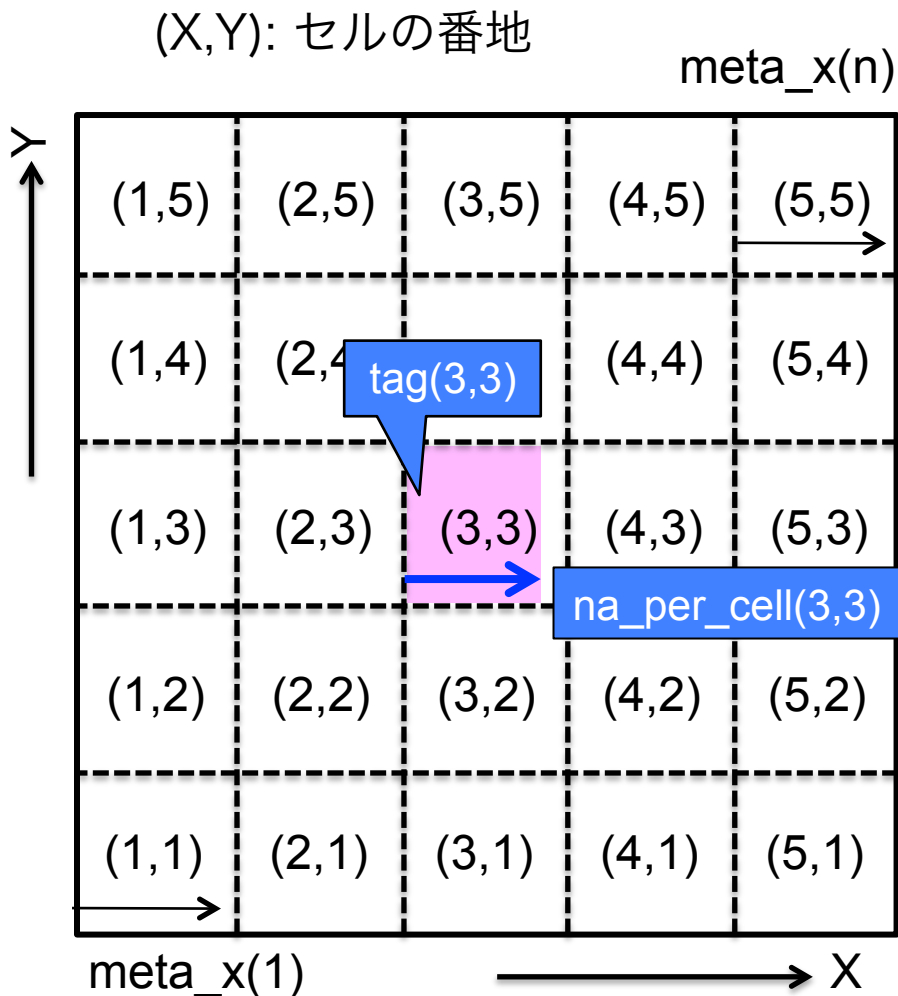
`allocate(na_per_cell(1:5,1:5))`

データへのアクセス方法

myrank所持データ:

`tag(3,3) ~`

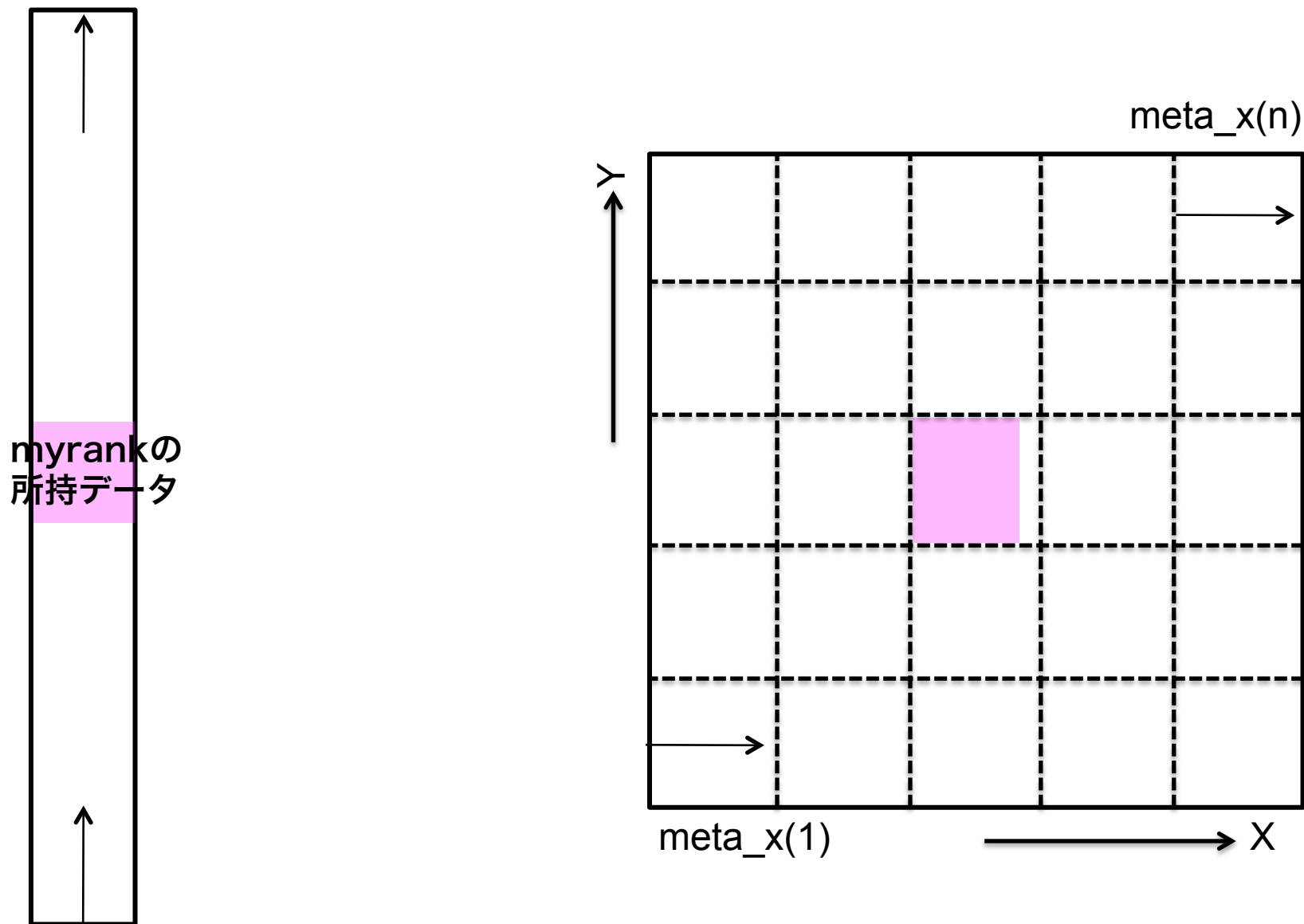
`tag(3,3)+na_per_cell(3,3)-1`



MPI 並列化技術: データ構造 [1] 座標

転送された座標データの格納形態

メタデータ構造

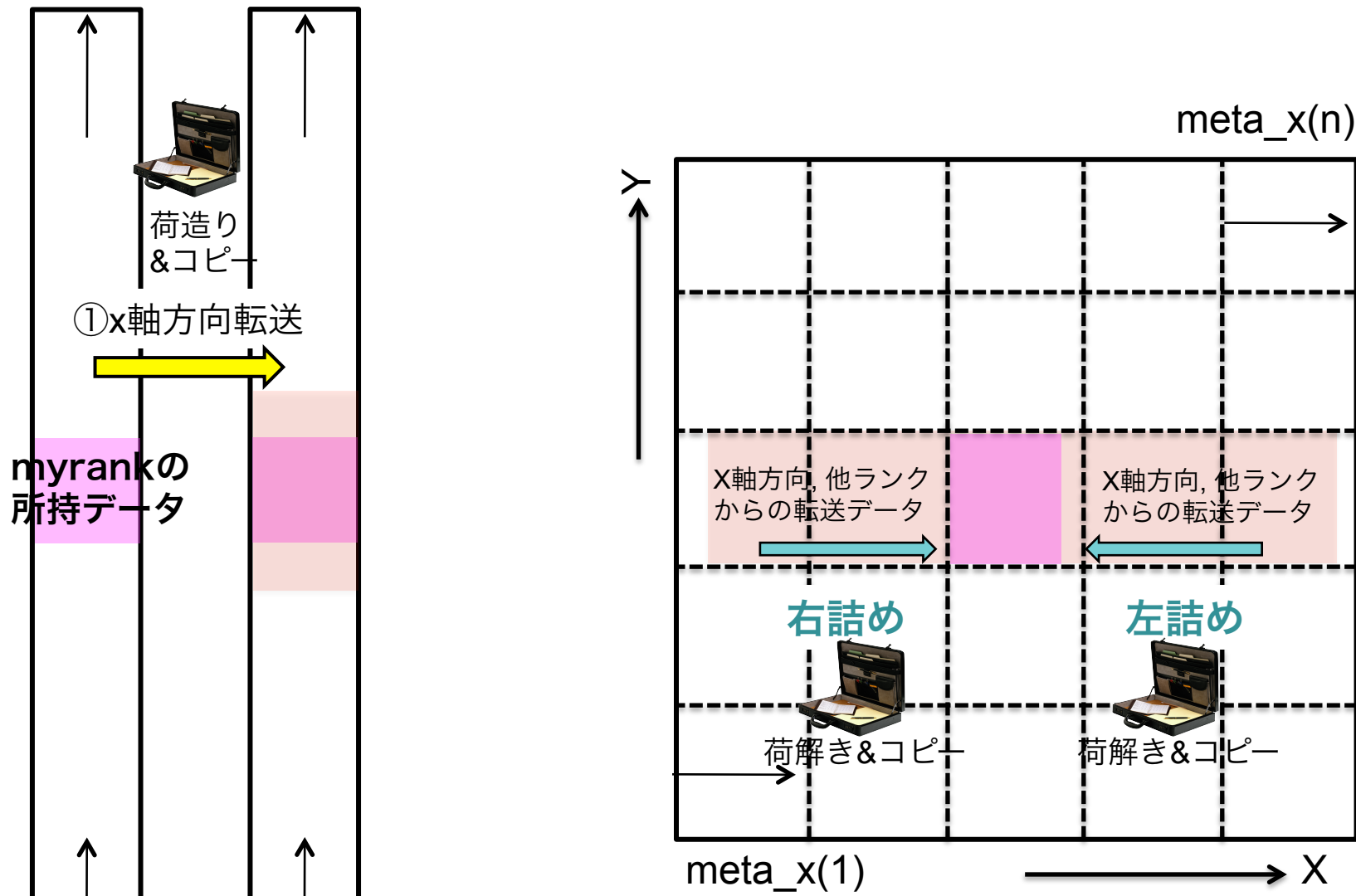




MPI 並列化技術: データ構造 [1] 座標

転送された座標データの格納形態

メタデータ構造

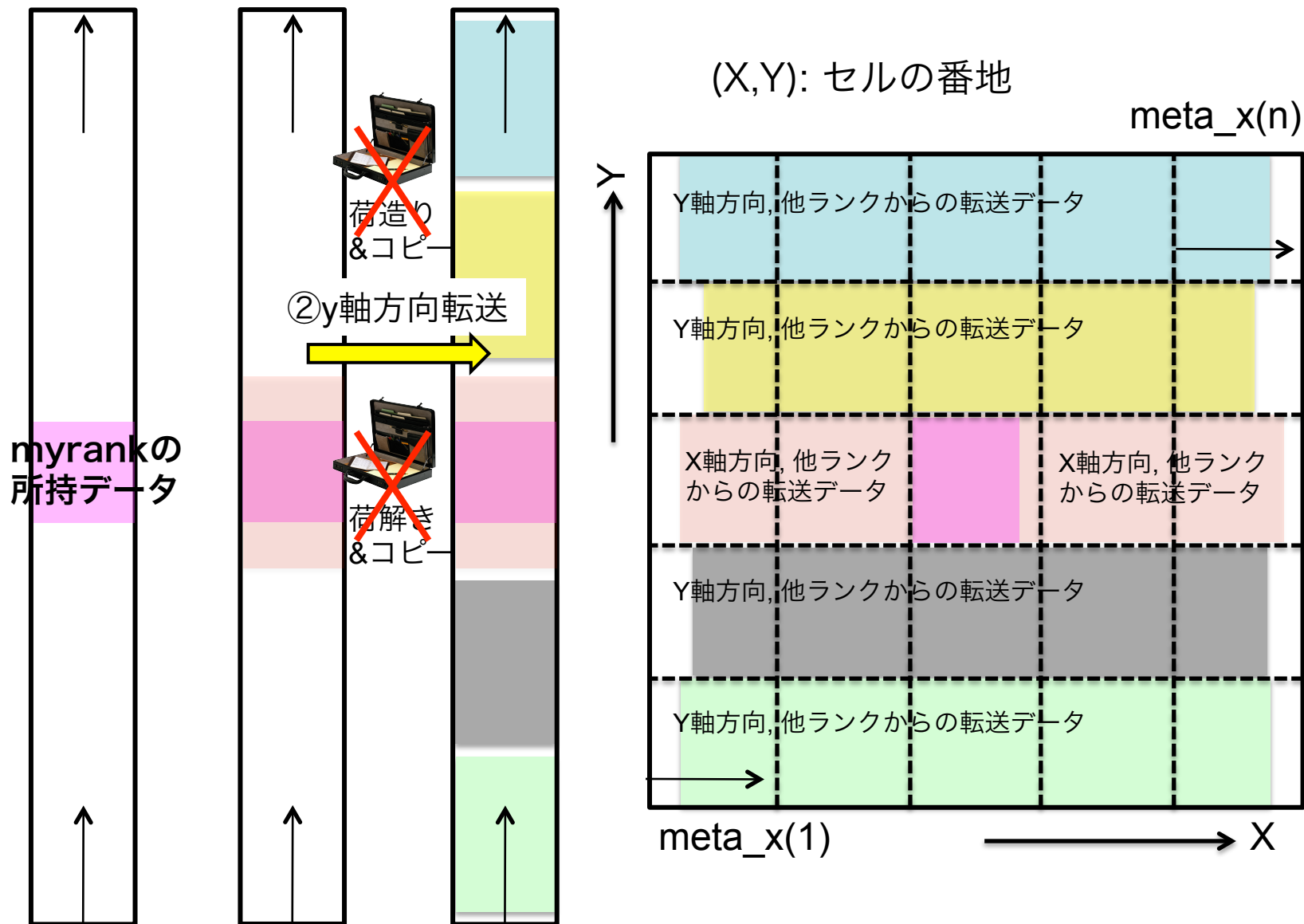




MPI 並列化技術: データ構造 [1] 座標

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

メタデータ構造

データへのアクセス方法

myrank所持データ:

tag(3,3) ~
tag(3,3)+na_per_cell(3,3)-1

帯の部分のデータ:

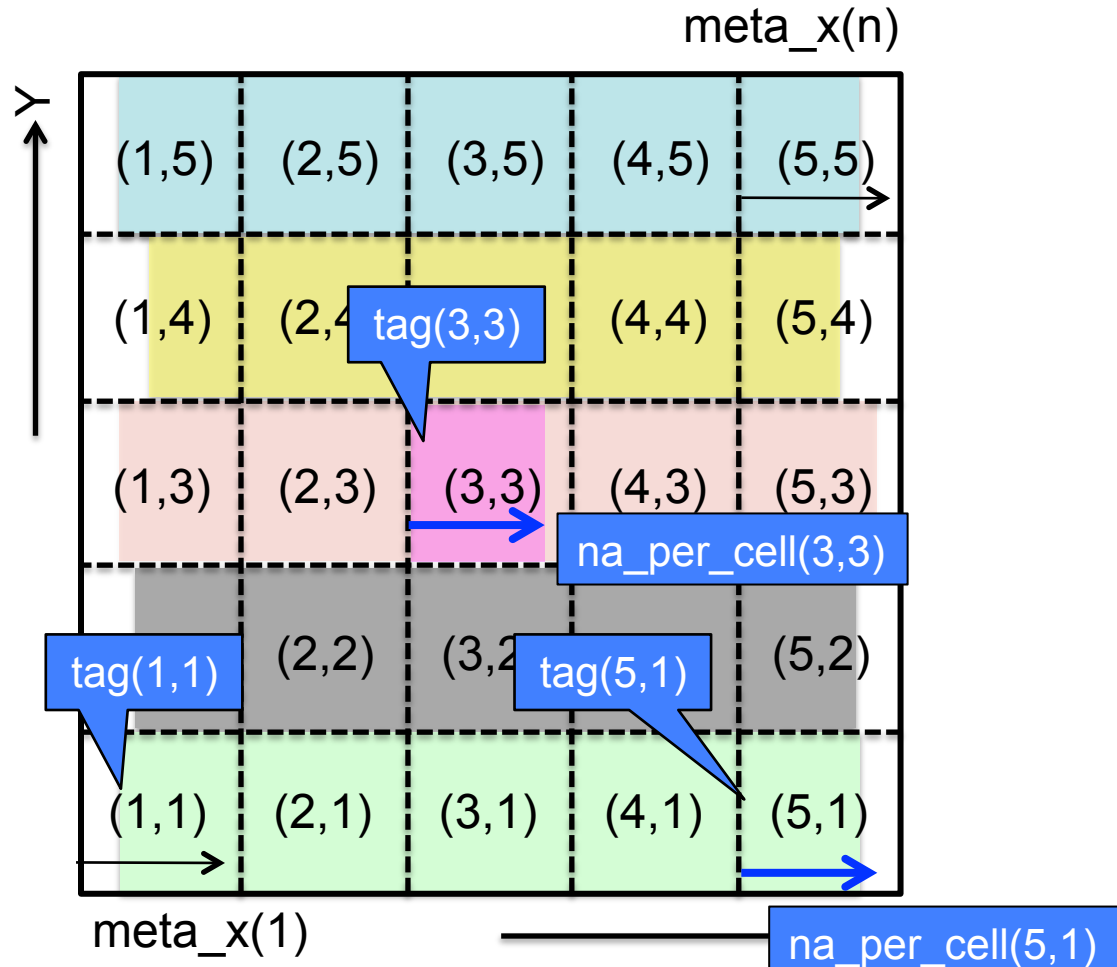
tag(1,5) ~
tag(5,5)+na_per_cell(5,5)-1

tag(1,4) ~
tag(5,4)+na_per_cell(5,4)-1

tag(1,3) ~
tag(5,3)+na_per_cell(5,3)-1

tag(1,2) ~
tag(5,2)+na_per_cell(5,2)-1

tag(1,1) ~
tag(5,1)+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



下位階層の多極子

```
allocate( wm0(:,16,16) )
```

下位の定義: 「M2L範囲 < スーパーセル分割数」

$$10 < 16$$

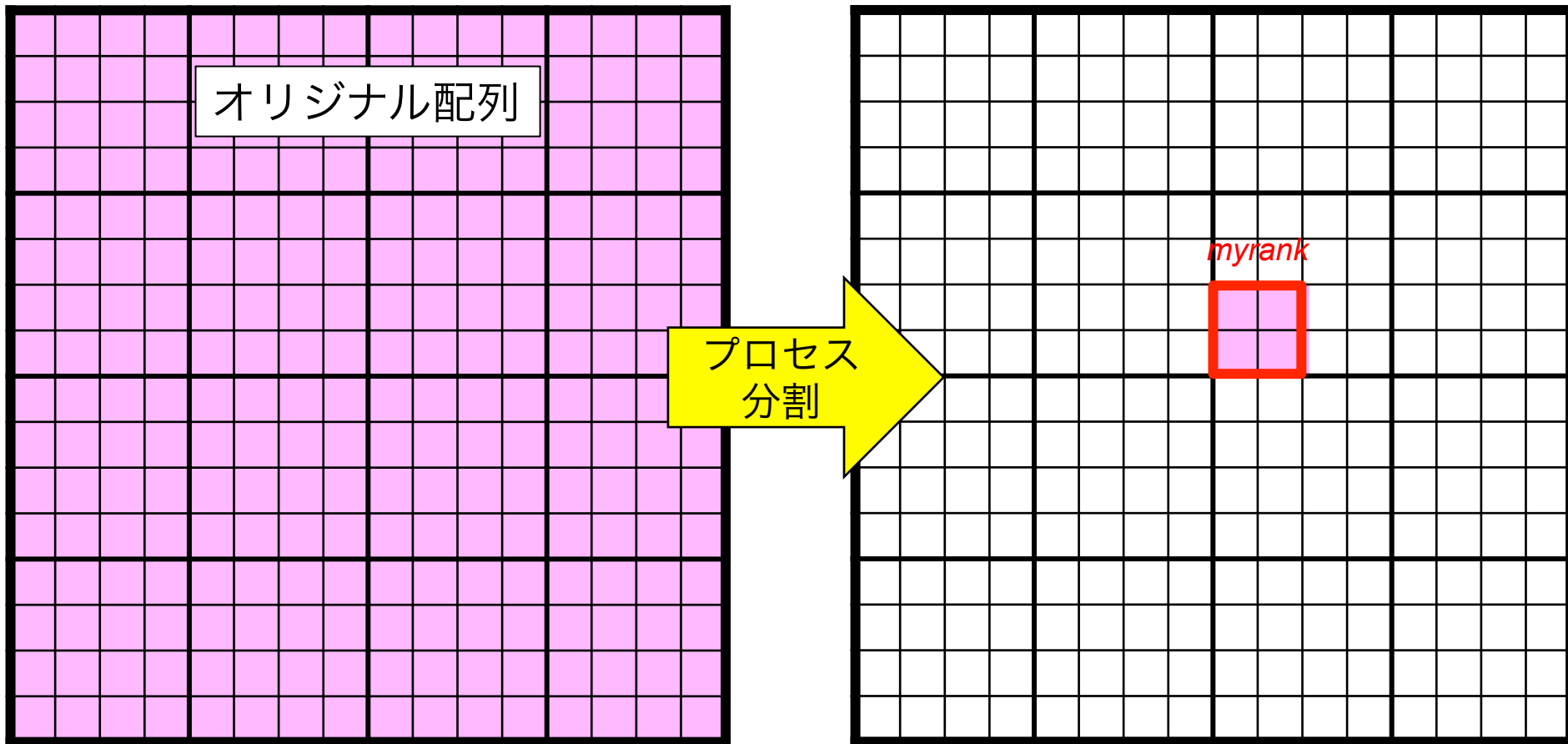
オリジナル配列

プロセス
分割

myrank

レベル0

レベル0



下位階層の多極子

```
allocate( wm0(:,16,16) )
```

オリジナル配列

プロセス
分割

M2L 対象セル

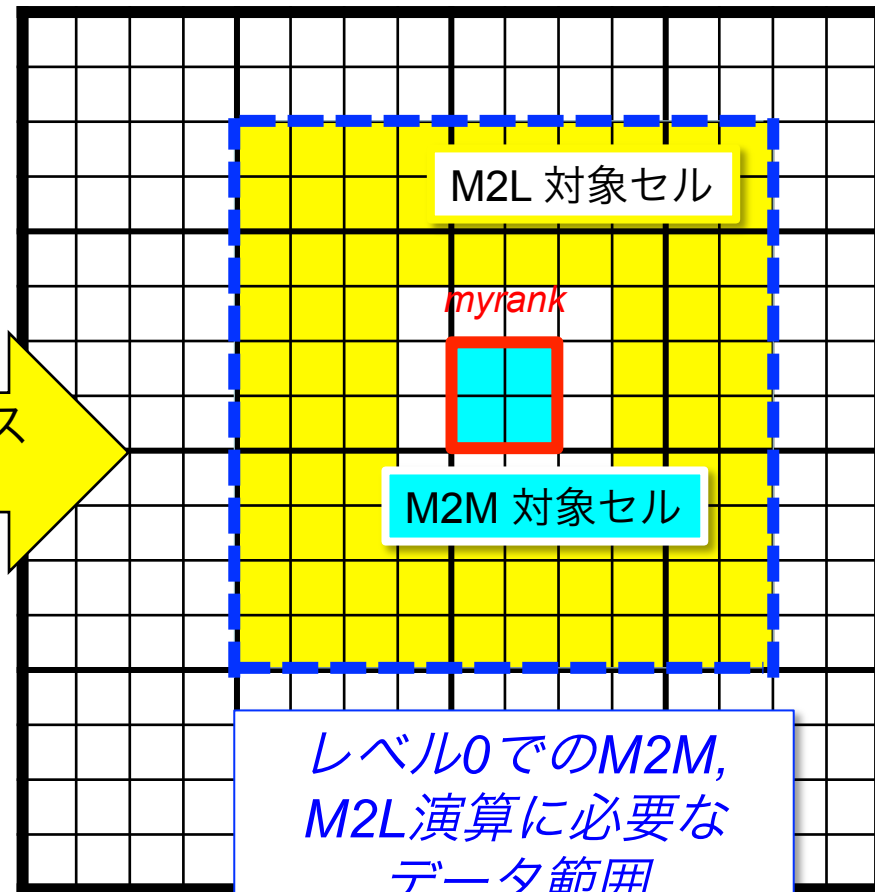
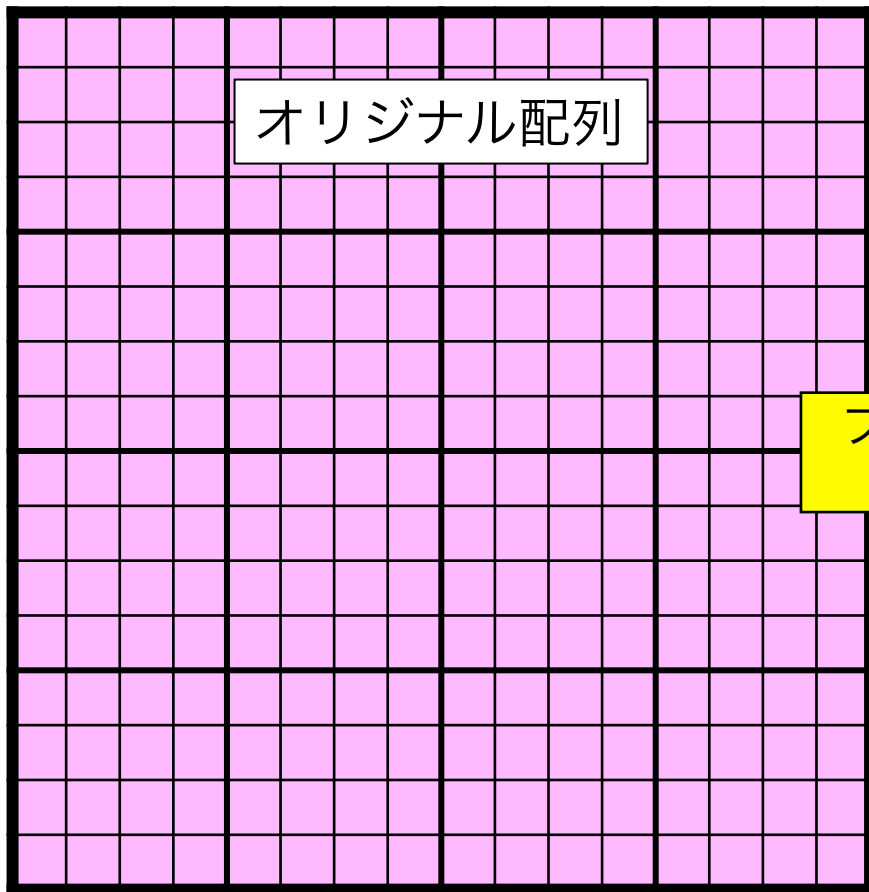
myrank

M2M 対象セル

レベル0でのM2M,
M2L演算に必要な
データ範囲

レベル0

レベル0





下位階層の多極子

```
allocate( wm0(:,16,16) )
```

オリジナル配列

プロセス
分割

レベル0

配列を袖部付きで局所化

```
allocate( wm_local0(:,10,10) )
```

x方向: $10=4+2+4$

y方向: $10=4+2+4$

M2L対象セル

$+4$
myrank

-4

$+4$

M2M対象セル

-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

下位階層の多極子

データへのアクセス方法

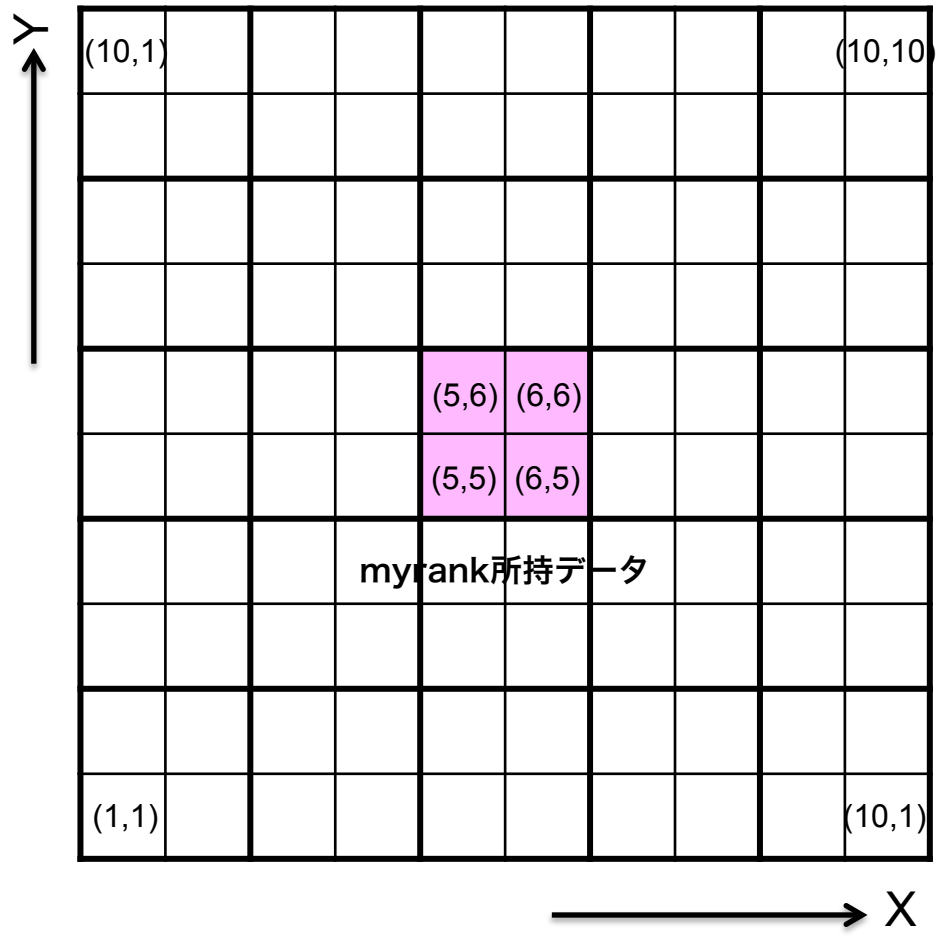
myrank所持データ:

```
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)
```

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
(=厳密にはメタデータ構造ではない)

(X,Y): セルの番地

```
allocate( wm_local0(:,10,10) )
```





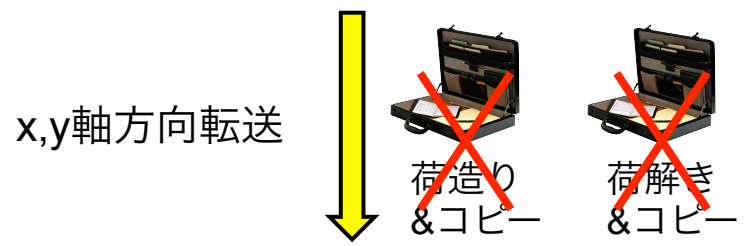
MPI 並列化技術: データ構造 [2] 多極子

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)
```

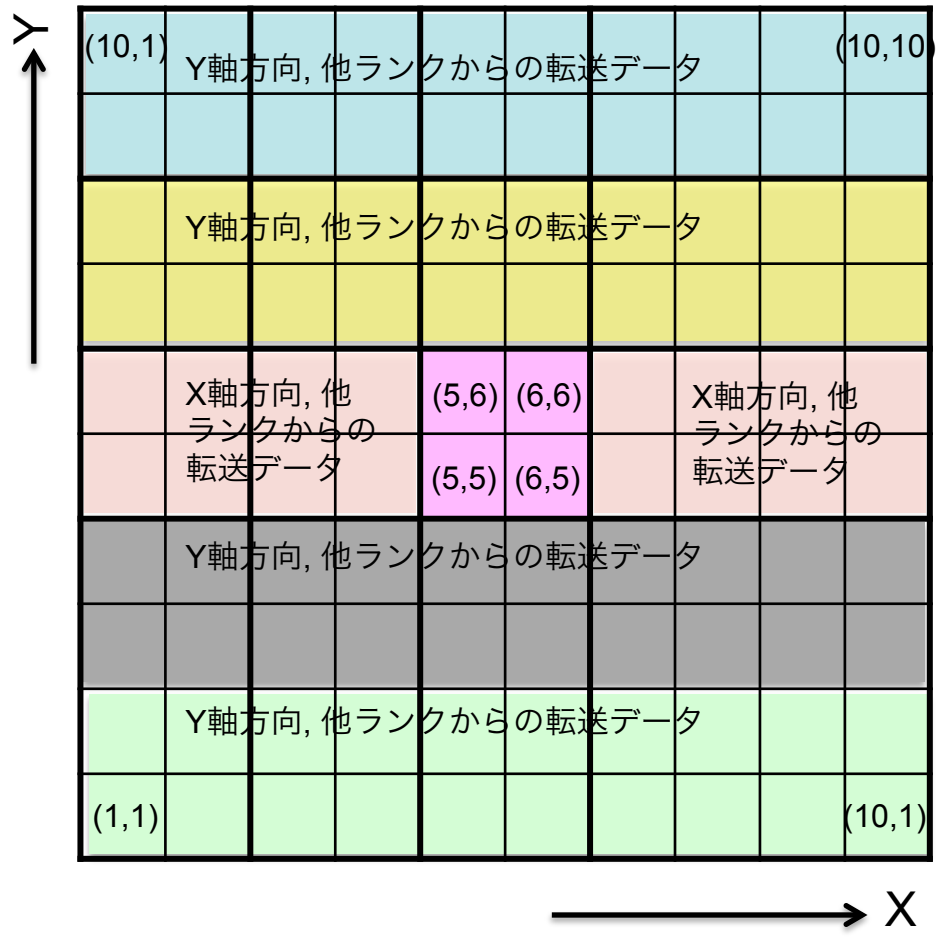


other ranks所持データ:

```
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): セルの番地

```
allocate( wm_local0(:,10,10) )
```



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



上位階層の多極子

```
allocate( wm1(:,8,8) )
```

上位の定義: 「M2L範囲 \geq スーパーセル分割数」

10 > 8

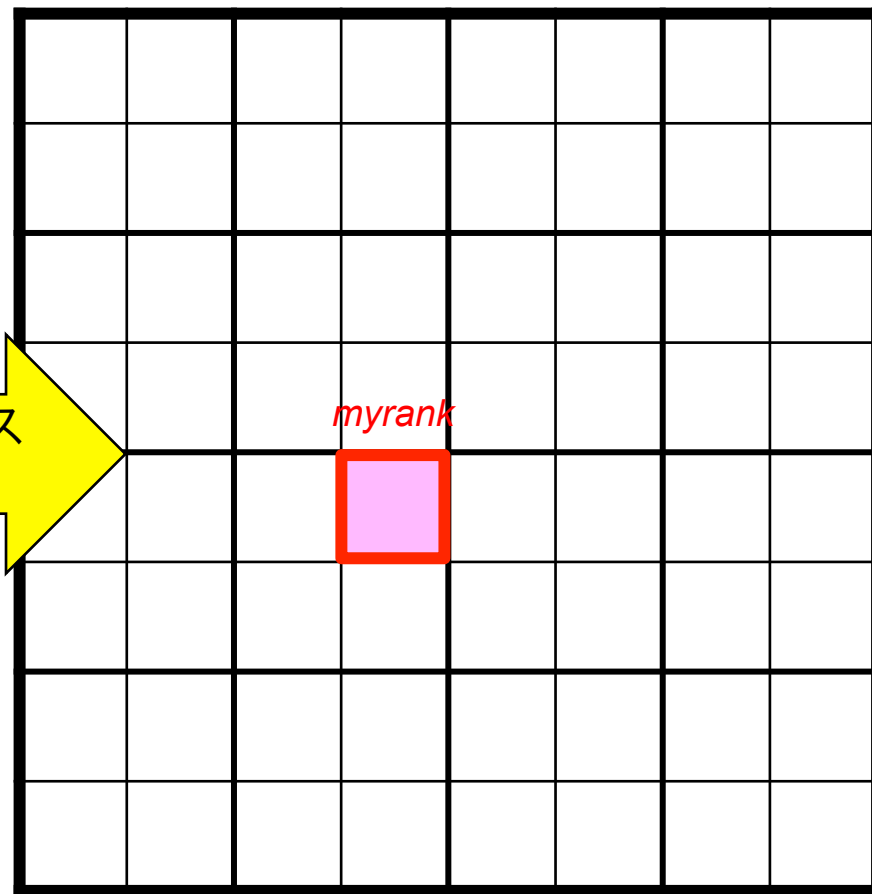
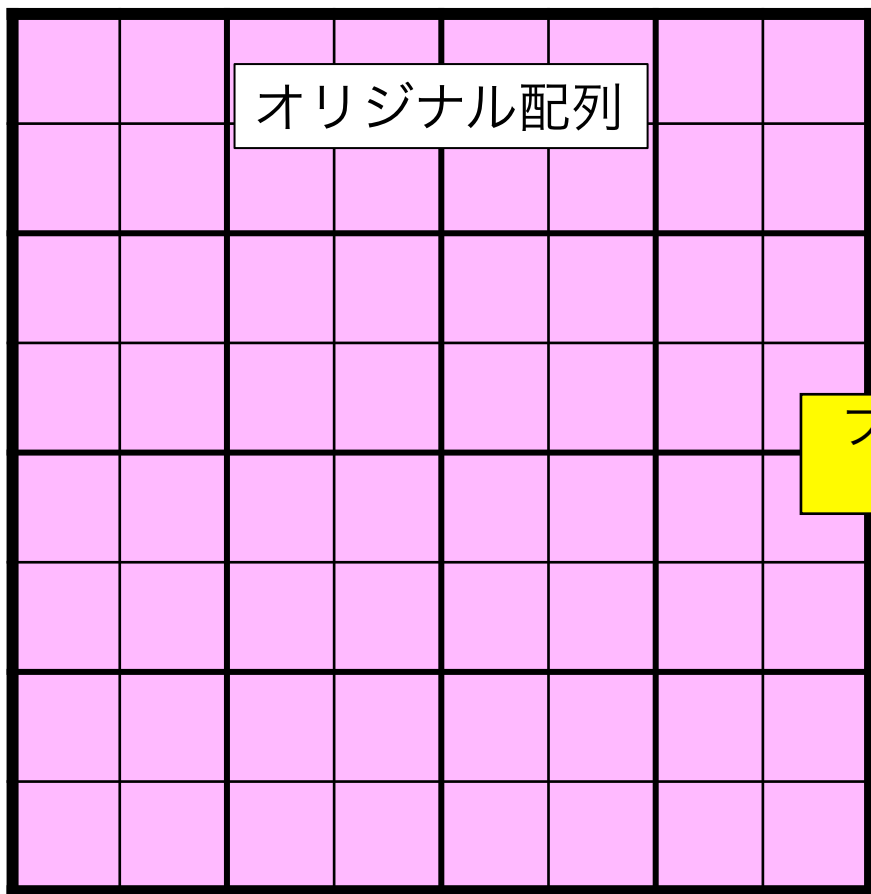
オリジナル配列

プロセス
分割

myrank

レベル1

レベル1

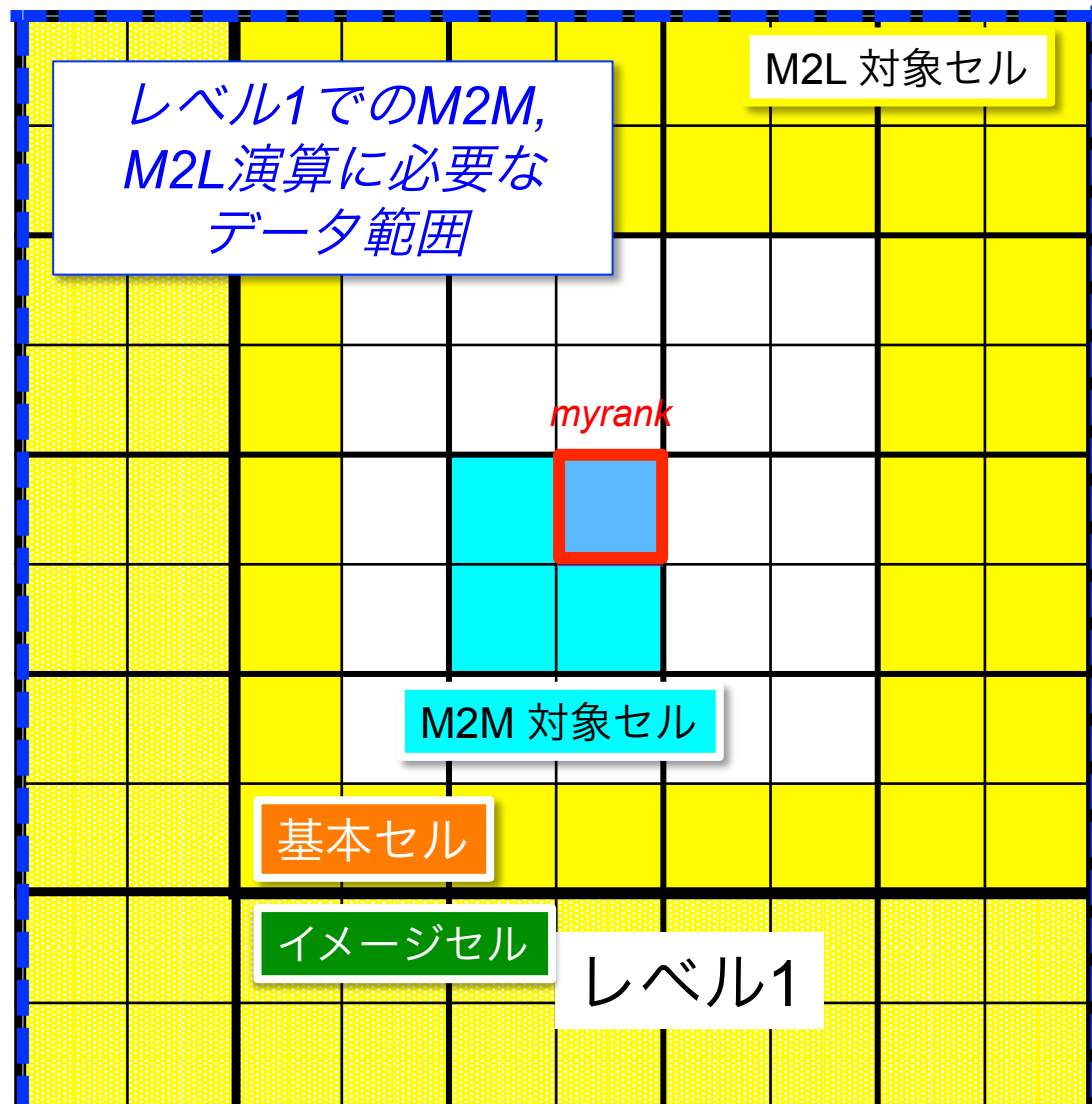




上位階層の多極子

オリジナル配列

```
allocate( wm1(:,8,8) )
```





上位階層の多極子

オリジナル配列

```
allocate( wm1(:,8,8) )
```

配列を袖部付きで局所化

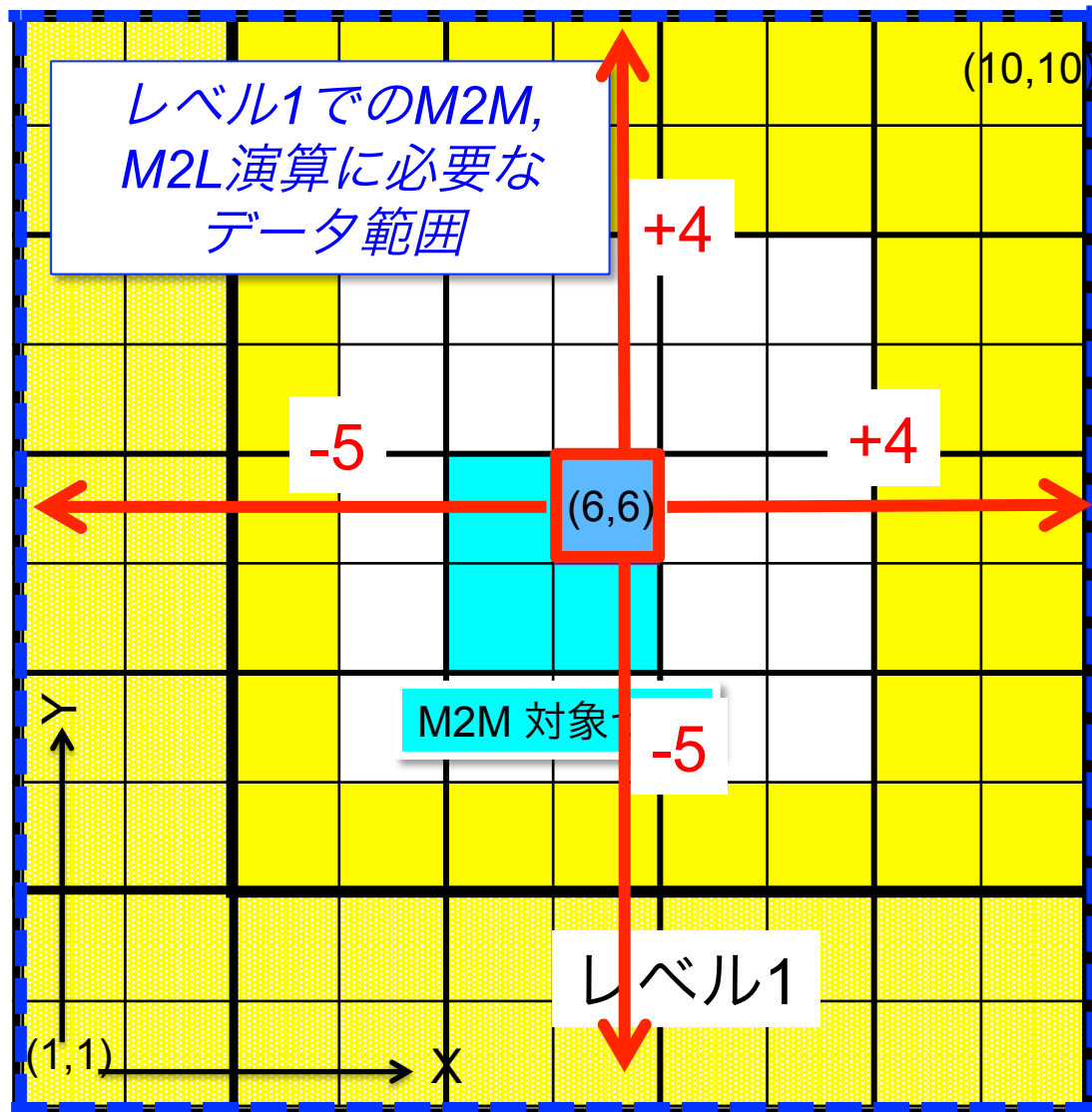
```
allocate( wm_local1(:,10,10) )
```

x方向: $10=5+1+4$

y方向: $10=5+1+4$

myrank所持データ:

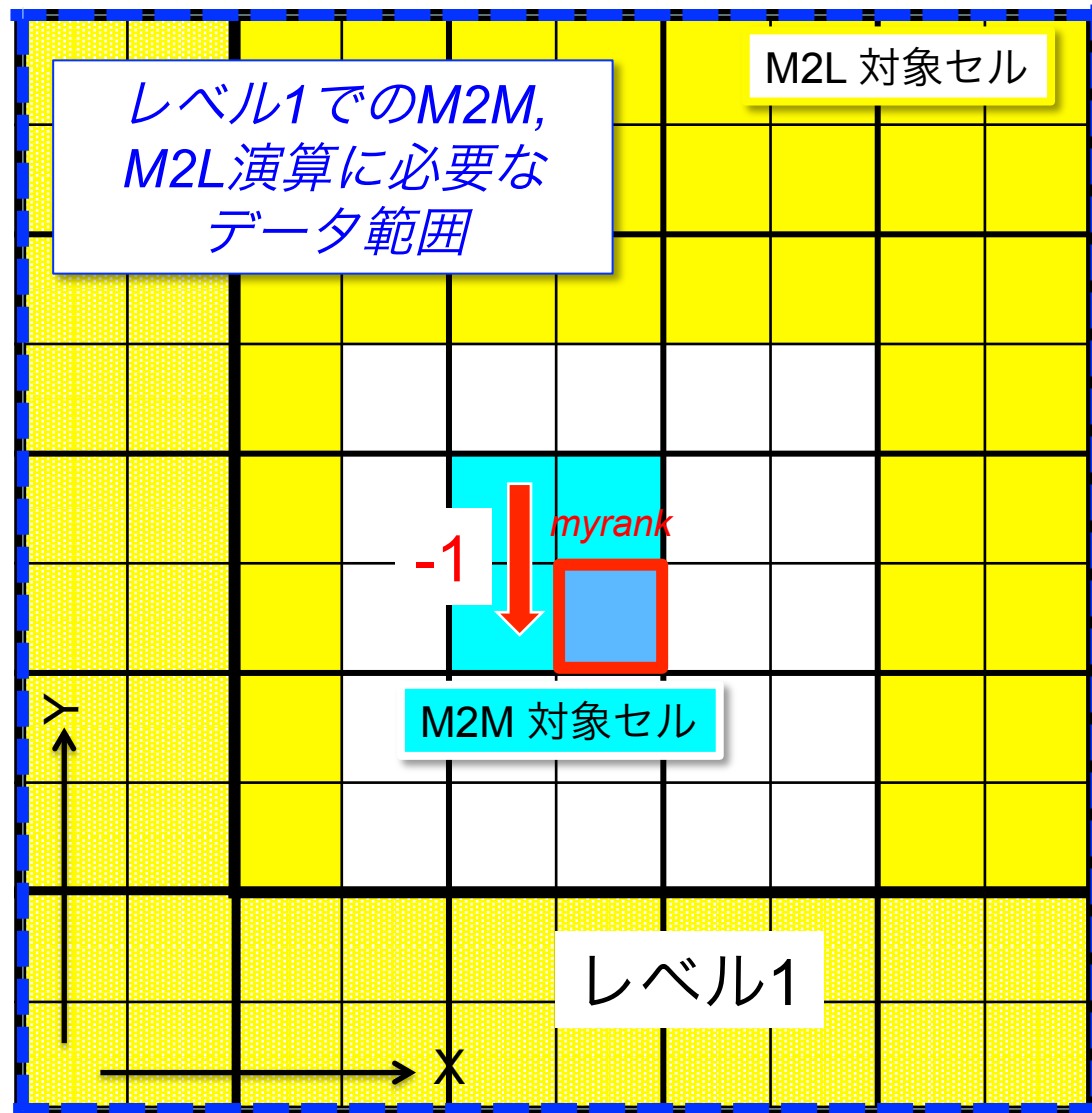
```
wm_local1(:,6,6)
```





上位階層の多極子

y 方向に -1 隣の
プロセスを考えると,



上位階層の多極子

オリジナル配列

```
allocate( wm1(:,8,8) )
```

配列を袖部付きで局所化

```
allocate( wm_local1(:,10,10) )
```

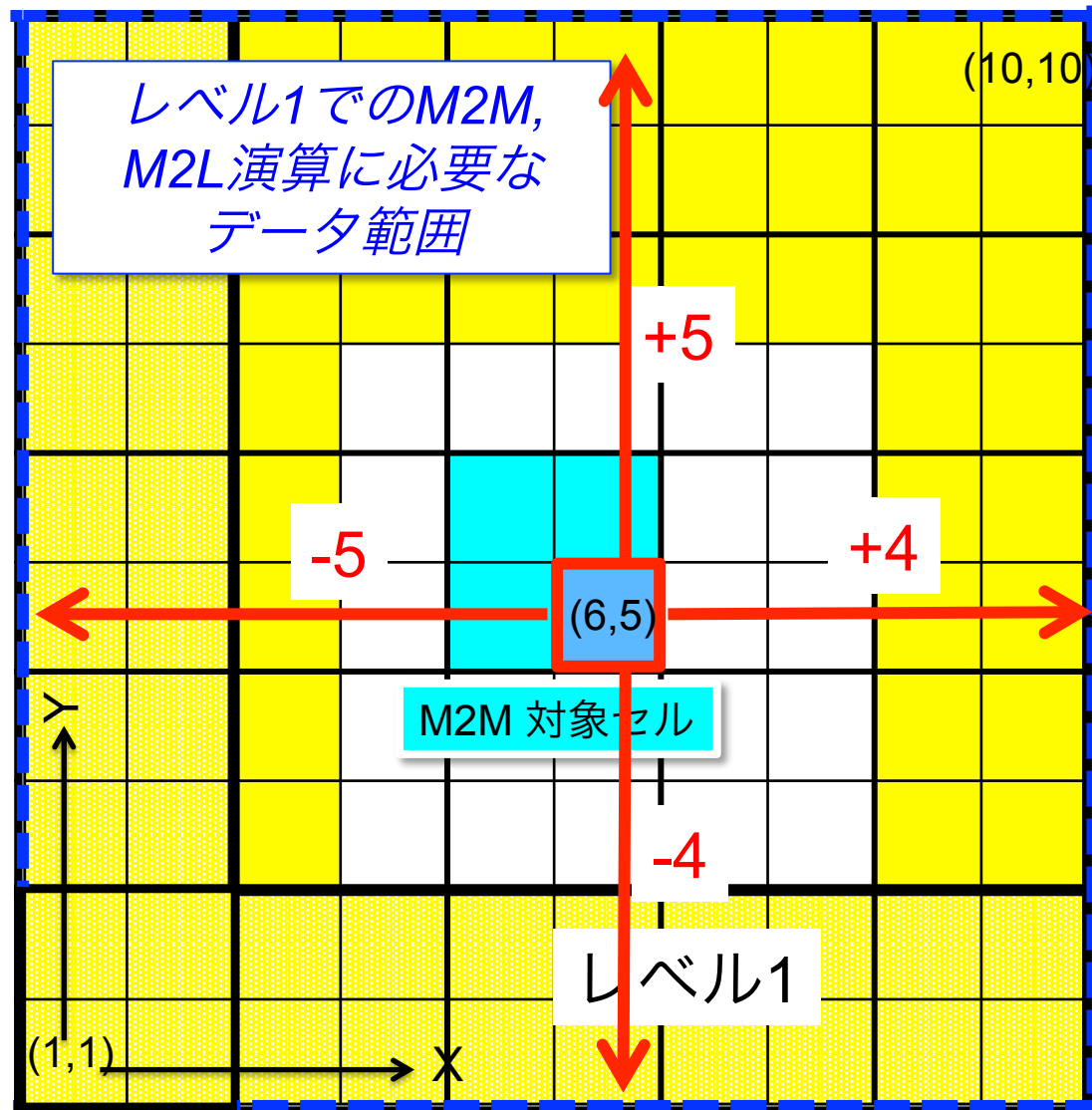
x方向: $10 = 5 + 1 + 4$

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

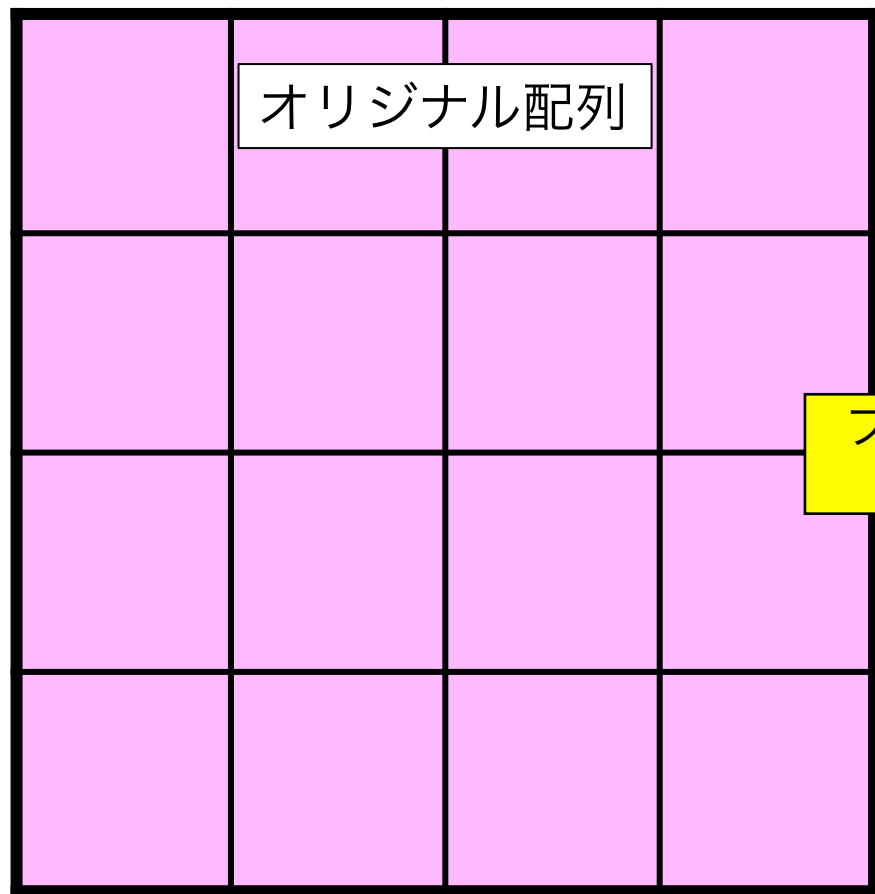


上位階層の多極子, 通信削減の工夫

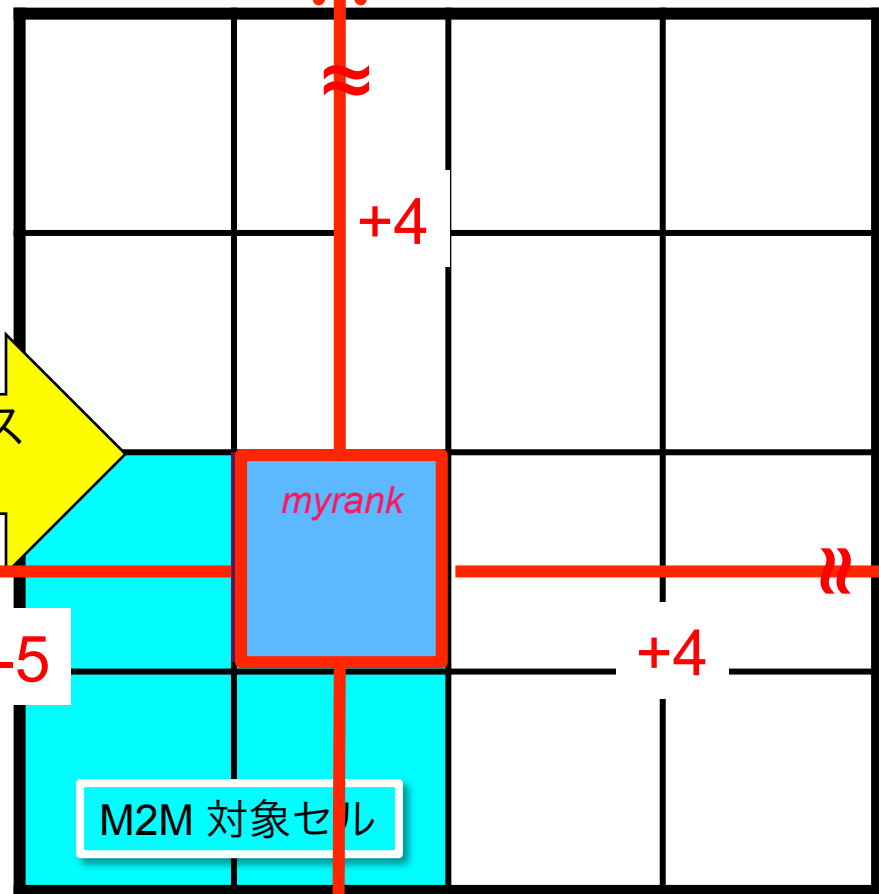
```
allocate( wm1(:,4,4) )
```

「M2L範囲 > スーパーセル分割数」

$$10 > 4$$



レベル2



レベル2

MPI 並列化技術: データ構造 [2] 多極子

上位階層の多極子, 通信削減の工夫

```
allocate( wm1(:,4,4) )
```

下階層のように袖部付き局所化配列にすると、

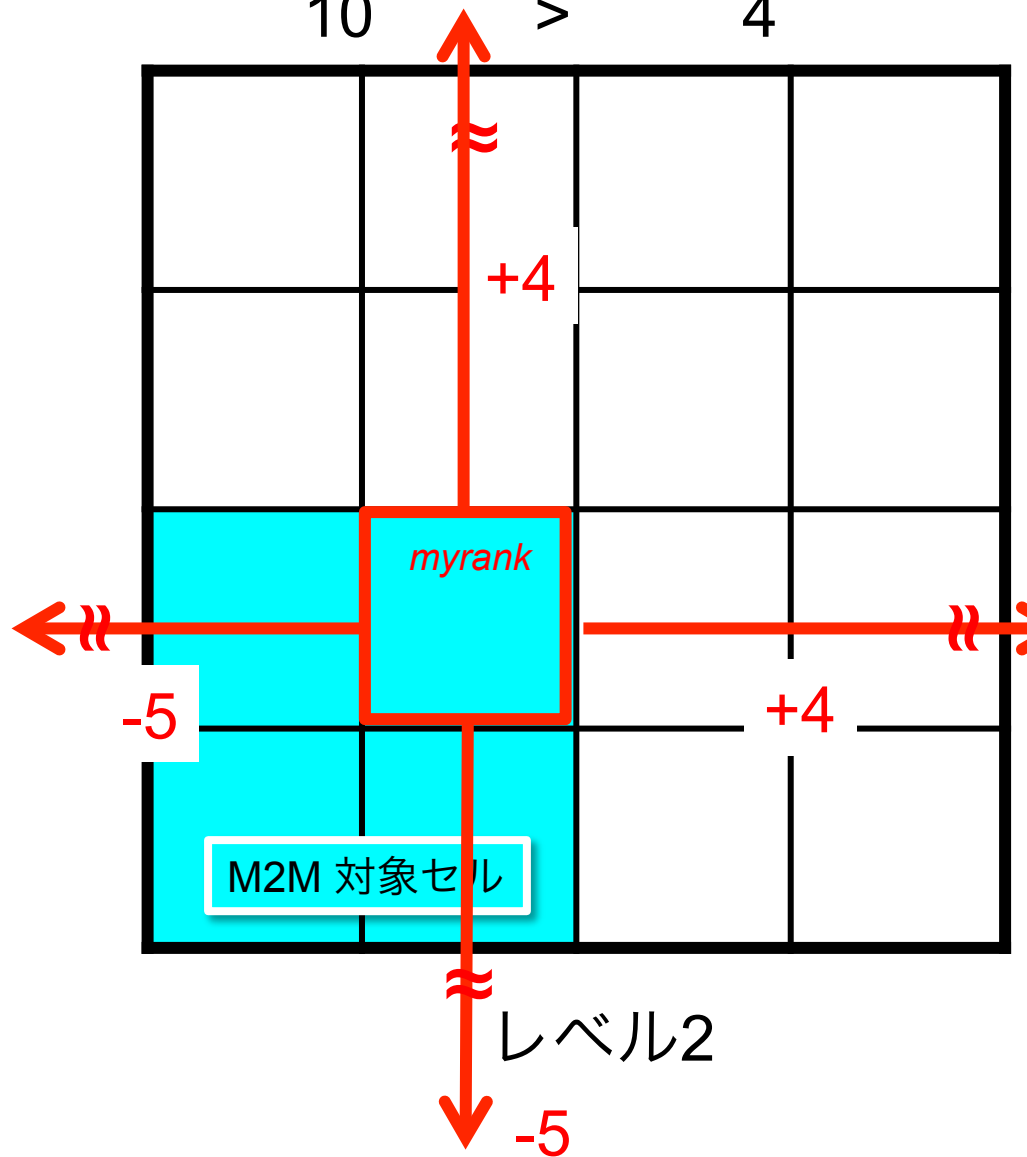
- ・ 折り返し部分のデータを何度も冗長に通信

もともとの配列 `wm1(:,4,4)` の全要素を通信すれば十分

→ 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

- 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.