

フラグメント分子軌道計算プログラムの 大規模・高速化 ～HPCI拠点へのライブラリ整備～

研究・開発機関 : [立教大学](#)、[国立医薬品食品衛生研究所](#)、[計算科学振興財団](#)
 利用施設 : スーパーコンピュータ「富岳」、他HPCI拠点計算機、
 FOCUSスパコン
 計算規模 : 最大「富岳」8ラック(3072ノード)規模
 利用ソフトウェア : ABINIT-MP

Before

- プログラム内で使用する配列(メモリ)増大がネックになり、数千のフラグメント(巨大分子を小さな、不連続なブロックに分断された状態)規模の計算が限界でした。
- スパコンのアーキテクチャを意識した高速化チューニングをさらに進めることで性能を引き出す余地が出てきました。

After

- 1万フラグメント超の大規模計算が実行可能になり、巨大分子系での水和モデルを取り扱うことが可能になりました。
- 「富岳」で利用されているCPU、ベクトルCPU等、さまざまなスパコン・アーキテクチャに対応したプログラムの大規模・高速化のライブラリ整備を実施し、HPCI拠点を含む全国のスパコンセンターへ提供することができました。

背景と目的

「ABINIT-MP」は、20年以上研究開発が続けられているフラグメント分子軌道(FMO)計算のためのプログラムです。2021年度には、HPCI課題hp210026「新規感染症のための計算科学的解析環境の整備」のなかで新型コロナウイルスに加えてインフルエンザウイルス(図1)を対象とした大規模なFMO計算を実施しました。「富岳」を用いた大規模計算では、予測していなかったルーチンでの計算コスト増大、メモリ不足による計算中止等、多くの問題が生じました。そこで、コスト部分を精査し、不要配列の削除、冗長処理の削減等の高速化チューニングを実施した結果、現実的な時間での1万フラグメントを越す、大規模な系の計算が可能になりました。図1の例では、「富岳」3072ノード、6.7時間で計算完了しました。

また、より実践的な解析のために多数の構造サンプルを扱う必要があり、一構造のFMO計算を高速化することが必須でした。本稿では、「富岳」で利用されているCPU(以下、A64FX)とベクトルCPU(以下、SX-Aurora TSUBASA)における高速化の取り組みについてご紹介します。

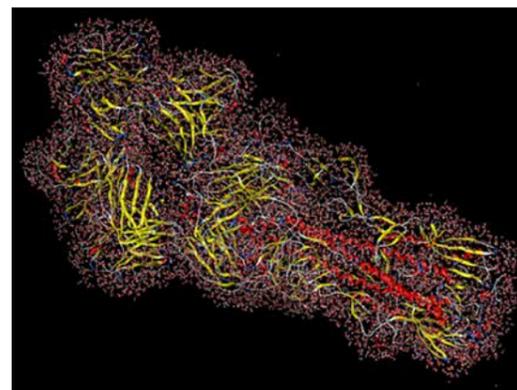


図1 インフルエンザウイルスHA+Fab抗体(PDB id:1KEN)の水和モデル

利用成果

A64FX向け高速化

A64FXスパコンでの計算コスト分析では、2電子積分の生成が全体時間の約50%、HF(Direct SCF、リスト作成)計算関係の処理が約25%を占めていました(図2)。高速化対象として2電子積分の高速化に着手しました。A64FXで性能を出すためには、SIMD(Single Instruction/Multiple Data)レジスタを有効に使うことが必須です。まずは該当ルーチンにプログラムの宣言型言語であるOCL(Object Constraint Language)指示子を挿入しSIMD化を図り、従前比で1.2~1.3倍の加速を得ました。次に同ルーチン内のレジスタスピルの軽減改良と、生成された積分値を配列に格納する際の冗長なIF分岐処理を削減し、1.5倍の加速になりました。最後に、収束加速アルゴリズムの適用と、収束計算時に一度計算した積分値を配列にバッファリングすることで、演算数を削減し、従前比で最大2.3倍程度の高速化を達成しました。

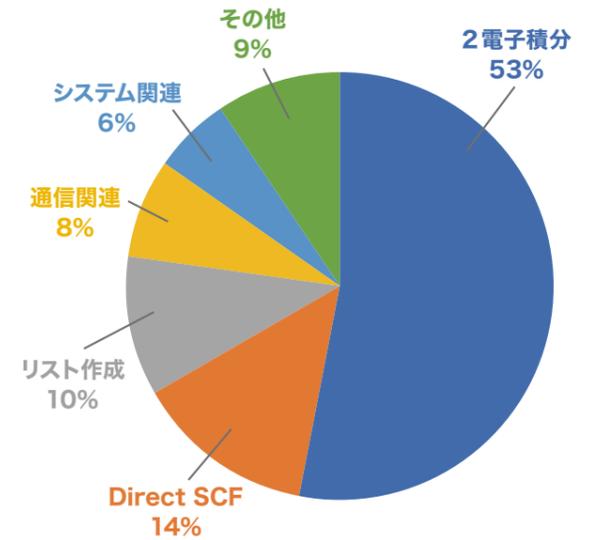


図2 ABINIT-MPの計算コスト分布

SX-Aurora TSUBASA向け高速化

SX-Aurora TSUBASAにおいてもA64FXと同様に、2電子積分生成コストが全体の50%程度占めていました。ルーチンごとの性能を詳細検証したところ、以前のSXシリーズに比べ、性能が大きく低下していました。特にループ内の演算量が大きくなるルーチンでその傾向は顕著でした。アーキテクチャの変化に伴い、メモリバンド幅やレジスタ数のバランスが変わり、演算量が大きくなるループでのレジスタスピル発生が性能低下の原因でした。これらコスト上位ルーチンの該当ループを分割し、レジスタスピルを軽減しました。さらに、多重ループの入れ替えによるベクトル化の促進、ベクトル長の伸長高速化施策を実施し、2電子積分のコストは約25%になりました。計算時間は従前比で最大4.8倍程度の高速化となりました。

HPCI拠点等へのライブラリ提供

「富岳」をはじめ、複数のHPCI拠点等のスパコンセンターにライブラリプログラムとして整備しました(表1)。今後も、機能強化とともに高速化と大規模系に対応し、ABINIT-MPを提供していきたいと考えています。

表1 ライブラリ提供したスパコンセンター

スパコンセンター	CPUタイプ		
北大	Gran Chariot	Xeon	
東北大	AOBA-A	SX-Aurora TSUBASA	Ryzen
JCAHPC	Oakforest-PACS	Xeon Phi	
東大	Wisteria/Odyssey&Aquarius	A64FX	Xeon
東工大	TSUBAME3.0	Xeon	
JAMSTEC	Earth Simulator4	SX-Aurora TSUBASA	Ryzen
分子研	RCCS	Xeon	
名大	不老Type I	A64FX	
阪大	SQUID/OCTOPUS	SX-Aurora TSUBASA	Xeon
R-CCS	富岳	A64FX	
FOCUS	FOCUSスパコン	Xeon	
九大	ITO Subsystem-A	Xeon	

謝辞

「ABINIT-MP」の開発整備は、名古屋大学、NEC(日本電気)、富士通、HPCシステムズに協力いただいていることを記します。