

密度汎関数強束縛法に基づいた 並列性の高い分子動力学計算 ～大規模な系に対する高速アルゴリズムの実現～

研究・開発機関 : [株式会社メトロ](http://www.metro.co.jp)
 利用施設 : FOCUSスパコン
 計算規模 : 40～640 コア並列(水分子 1000 個)
 利用ソフトウェア : 自社開発プログラム
<https://www.metro.co.jp/products/hpc/simulation/rd.html>

Before

- 分子動力学計算においては密度行列の計算が必要で、固有値問題を解く必要が出てきます。
- 計算の高速化を図るべく固有値問題の並列計算を実施しようとしても計算量が大きいことから、大規模な計算においては時間が掛かりすぎるという問題点がありました。

After

- 密度行列を計算する際、固有値問題を解かずにshifted-CG法と呼ばれる手法を用いて行列計算を分散して処理できるようにしました。
- この手法は並列計算に適しており、大規模な計算においても並列性能が高く、新薬や新素材の開発期間が短縮できるようになりました。

背景と目的

当社では、数値シミュレーションプログラムの開発やプログラム高速化サービス等で培った知見を活かし、マイクロな現象を対象とした高速なシミュレーションソフトウェアの開発に取り組んでいます。これらのソフトウェアは様々な場面で活用されており、特に新薬や新素材の研究、開発の場面でよく使用されています。また、研究開発では数多くのパターンのシミュレーションをなるべく速いサイクルで回したいという要望があるため、計算スピードがとても重要な要素になります。

研究開発におけるシミュレーションで使われる計算(近似)手法に密度汎関数強束縛法(DFTB)があります。DFTBとは密度汎関数法(DFT)の近似手法の1つであり、原子や分子、物質の電子状態を計算する方法です。これを用いて計算された電子状態から様々な物性値の計算が可能となります。DFTBはある程度の計算精度を保持しながらDFTと比べて計算速度が速いという特長があります。

しかし、DFTBでは電子密度の計算をする際に計算量の大きい固有値方程式を解く必要があるものの、スパコンが得意とする並列計算の優位性を必ずしも十分に活用できていないという問題があります。そこで当社では固有値方程式を解かずに電子密度を分散処理にて計算可能にする手法を新たに採用することで、並列計算の優位性を発揮できるプログラムを開発することができました。本事例では、創薬や材料分野でよく使用される水分子による薬剤の溶解や水中での素材特性の評価を想定対象に FOCUSスパコンのFシステムで実行し、その優位性を確認しました。

■ 利用成果

今回開発したDFTBは特に大規模な系に対して計算速度の優位性が出る性質があるため、計算対象としては大規模な系である「水分子 1000 個」を採用しました(図1)。前述の通り創薬分野や材料分野でDFTB計算がよく使われており、創薬分野においては体内での薬剤の溶解シミュレーションに、材料分野においては水中での素材特性を評価する際に、対象物質と一緒に大量の水分子を含んだ状態で計算することがあります。

以上のことより水分子を計算対象とし、異なるノード間で計算を行う際に利用されるMPI並列にて並列数を変化させて実行しました。

実行条件:

ここでは、ノード数が多い FOCUSスパコンのFシステムを使用し、1ノード当たり40コア全てを使用した状態で1～16ノード(40～640コア)と並列数を変えて実行した結果を示します。計算対象としては、水分子1000個を1辺100オングストローム [Å] (0.01μm) の空間内にランダムで配置し1タイムステップ(1 [fs: フェムト秒]=1000兆分の1秒)のみ動かすような分子動力学計算(MD計算)を行いました。

実行結果:

並列数と計算時間に関する高速化率との関係を図2に、具体的な数値を表1に示しています。比較対象として、DFTB計算を取り入れている他プログラム(プログラムA)にて同様の条件で実行した高速化率もプロットしています。Aでは160並列以降ではほとんど高速化出来ておらず、むしろ高速化率が下がっている傾向にあります。これは、固有値計算がボトルネックとなっており、並列数を増やすほど通信に時間がかかっているためだと考えられます。一方当社が開発したプログラムでは、640コア並列まで比較的高い高速化率を保つことが出来ています。これにより、速いサイクルで物質のシミュレーションが出来るため、新薬や新素材の開発のスピードを上げることが出来ます。

今回の実行にて並列性の優位確認は出来ましたが、計算速度については改善の余地があるため、共役勾配法の適用方法や積分手法等を改良し、単体性能の向上を目指していきます。また、他物性値の計算への対応も進めていき、様々な場面で使用していただけるように開発を進めていきます。

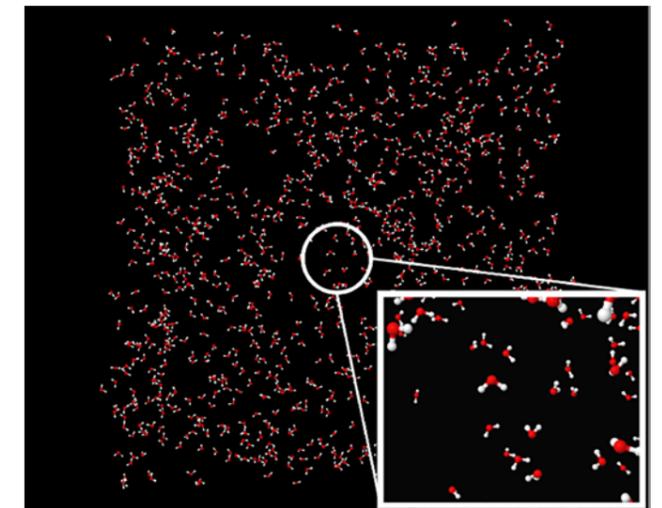


図1 シミュレーションモデル
(水分子1000個)

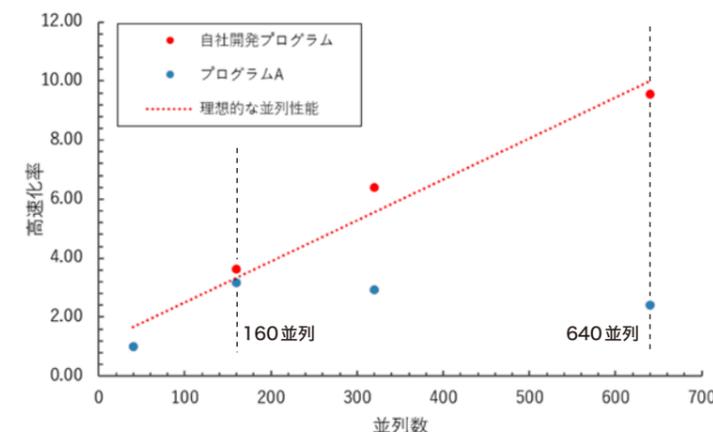


図2 並列数に対する高速化率

コア数	40	160	320	640
自社開発プログラム	1.00	3.62	6.40	9.54
プログラム A	1.00	3.18	2.94	2.40

表1 並列数に対する高速化率