SMP クラスタ上の MPI/OpenMP ハイブリッド並列分子動力学計算*

鈴木正昭^{*1}, 奥田洋司^{*2}, 矢川元基^{*2}MPI/OpenMP Hybrid Parallel Molecular Dynamics Simulation
on SMP Cluster ArchitectureMasaaki SUZUKI^{*3}, Hiroshi OKUDA and Genki YAGAWA^{*3} Department of Quantum Engineering and Systems Science, The University of Tokyo,
7-3-1 Hongo, Bunkyo-ku, Tokyo, 113-8656 Japan

The authors applied MPI/OpenMP hybrid parallel programming model to molecular dynamics (MD) for simulating a protein structure. In a symmetric multiprocessor (SMP) cluster architecture, it can be expected that the hybrid parallel programming model, which uses the message passing library such as MPI for inter-SMP node communication and the loop directives such as OpenMP for intra-SMP node parallelization, is the most effective one. In this study, the parallel performance of the hybrid style was compared with that of conventional flat parallel programming style, which uses only MPI. The computer environments used here are Hitachi SR8000/MPP placed at the University of Tokyo. When using 16 SMP nodes (128 PEs), it was observed that the parallel efficiency with the hybrid style was 90%, which was 15% higher than that of the flat-MPI for MD simulation of a protein with 33 402 atoms.

Key Words: Molecular Dynamics, Numerical Analysis, Computational Mechanics, Parallel Computation, MPI/OpenMP Hybrid Programming Model, SMP Cluster Architecture, Protein Structure Prediction

1. 結 言

ヒトゲノム解読の進展に伴い未知遺伝子の発見が続いている現在、これまでゲノム解析におかれていた研究の重点は遺伝子より発現するタンパク質の機能解析へと移りつつある。タンパク質は数十〜数千のアミノ酸がペプチド結合によって鎖状に連結した生体高分子であり、あるものは生体自身を形成し、またあるものは酵素として生理反応の円滑な進行を担う。それら多様かつ精巧なタンパク質の機能はその立体構造と密接に関係するため生体高分子の立体構造解析は今後重要な役割を果たし、構造情報の応用により期待される成果として例えば狂牛病のようなタンパク質に起因する病理機構の解明、創薬の効率化などが挙げられる⁽¹⁾⁽²⁾。従来からエックス線回折法をはじめとして実験によるタンパク質構造解析が進められてきた。エックス

線回折法は現在最も広く用いられている解析手法であるが、対象タンパク質の大量な純粋生成を必要とする点、本来の溶媒（主に水）中での構造ではなく結晶構造を観測している点が問題である。近年では Spring-8 など大型放射光施設の利用や、その他の手法として NMR（核磁気共鳴）法や電子顕微鏡による直接観測などが挙げられる。

一方で、近年の計算機能力の著しい発展を受けて計算機シミュレーションによるタンパク質構造予測が試みられている。1960 年代初頭 Anfinsen らはタンパク質の立体構造はそのアミノ酸配列により一意的に決定されると主張した⁽³⁾。この主張は現在タンパク質の立体構造は天然条件下において系の自由エネルギー最小の構造に対応するものと解釈されタンパク質フォールディング研究の基本原則として受け入れられており、この原理によると系の正確なエネルギー関数が与えられれば任意のアミノ酸配列に対しシミュレーションで立体構造を決定することが可能である。実際のエネルギー関数には例えば Cornell らの力場⁽⁴⁾などを用い、主に遺伝的アルゴリズム、モンテカルロ法、分子動力学法によ

* 原稿受付 2002 年 12 月 12 日。

^{*1} 東京大学大学院 (〒113-8656 東京都文京区本郷 7-3-1)。^{*2} 正員、東京大学大学院工学系研究科。

E-mail: suzuki@nihonbashi.race.u-tokyo.ac.jp

りランダムな初期立体構造から最安定立体構造を探索する。特に分子動力学法はフォールディングの時間発展を追うことが出来る点で有利である。しかし一方で分子動力学法における標準的な時間刻みが 10^{-15} 秒であるのに対しタンパク質フォールディングの時間スケールが $O(10^{-6}) \sim O(10^0)$ 秒であることから、シミュレーションには長時間積分が要求される。例えばアミノ酸残基数 200 程度の標準的なタンパク質とそれを取り巻く溶媒である水分子からなる系を考えると、計算すべき粒子数およびタイムステップ数はそれぞれ $O(10^5)$ および $O(10^8)$ となり膨大な計算量を伴う。そのため実用的な大きさのタンパク質に対して現実的な時間での構造予測に成功した例はまだない。

大規模数値解析の短時間・高精度の実施に並列計算技術は必要不可欠であり、特に超並列計算機の最大性能を出来る限り引き出すことが求められる。並列計算機の様式は大きく三つに分類され、それぞれ分散メモリ型、共有メモリ型 (Symmetric MultiProcessor: SMP 型)、分散・共有メモリ型 (SMP クラスタ型) と呼ばれるが、近年の超並列計算機においては地球シミュレータ⁹⁾や Hiachi SR8000 に代表されるように SMP クラスタ型アーキテクチャの採用が一般的となっている。このようなアーキテクチャをとる計算機の性能を十分に引き出すには SMP ノード間通信にメッセージパッシングを、SMP ノード内並列化にループディレクティブを用いるハイブリッド並列プログラミングモデルが適していると考えられる。本研究ではメッセージパッシングに MPI (Message Passing Interface)、ループディレクティブに OpenMP (A Standard Application Program Interface for Shared Memory Programming) をそれぞれ用いる (図 1)。

従来の MPI のみによる並列プログラミングでは同一 SMP ノードに属するプロセッサ間においてもメッセージパッシングによる通信を行うため、そこで行われる処理は分散メモリ型並列計算機を用いた場合と全く変わらない。それに対し、MPI/OpenMP ハイブリッ

ド並列プログラミングでは同一 SMP ノードに属するプロセッサはメモリを共有して参照し、通信は各 SMP ノードに一つずつ存在するマスタスレッドと呼ばれるプロセッサ間でのみ行われる。SMP ノード内のデータ転送についてメッセージパッシングによる通信よりメモリ共有による直接参照のほうが高速であること、また MPI_ALLREDUCE などの MPI 通信についてそれに関与するプロセッサ数が少ないほど通信時間が短くてすむということから、SMP クラスタ型並列計算機上では MPI/OpenMP ハイブリッド並列プログラミングモデルの採用でアルゴリズムの大きな変更なしにプログラム的高速化が見込める。OpenMP の使用に際しては既存のプログラムに指示行を挿入するだけであり、容易である。さらに、上述したハイブリッド並列プログラミングの有利性は使用する SMP ノード数およびノード内プロセッサ数が増加するにつれ顕著になると予想され、筆者らが目的とするような超並列計算機の使用が求められる大規模数値計算においては特に有効であると考えられる。

ハイブリッド並列プログラミングに関する研究には NAS Parallel Benchmarks (NPB)、LINPACK などを対象としたものが多くみられるが¹⁰⁾、実用的なアプリケーションにおける性能評価は少ない。有限要素法については例えば固体地球シミュレーション向け並列有限要素法プラットフォーム GeoFEM における性能評価¹¹⁾があるが、分子動力学法など粒子系の解法に適用した例はほとんどない。本稿ではタンパク質立体構造予測並列分子動力学計算コードを開発し、ハイブリッド並列処理と従来の MPI のみを用いた並列処理 (以下フラット MPI と呼ぶ) の計算性能比較を SMP クラスタ型並列計算機である Hiachi SR8000MPP を使用して実施・検討したので報告する。

2. 並列分子動力学計算

2.1 エネルギー関数 本研究ではエネルギー関数形およびそこに含まれるパラメータに式(1)に示す Cornell らの力場を用いた。

$$\begin{aligned}
 E_{total} = & \sum_{bonds} K_r (r - r_{eq})^2 + \sum_{angles} K_\theta (\theta - \theta_{eq})^2 \\
 & + \sum_{dihedrals} \frac{V_n}{2} [1 + \cos(n\phi - \gamma)] \\
 & + \sum_{i < j} \left[\frac{A_{ij}}{R_{ij}^{12}} - \frac{B_{ij}}{R_{ij}^6} + \frac{q_i q_j}{R_{ij}} \right] \quad (1)
 \end{aligned}$$

Fig. 1 Hybrid parallel programming model on SMP cluster architecture (MPH+OpenMP)

ここで、 E_{tot} は系の全ポテンシャルエネルギー、 r は共有結合した隣接二原子間の距離、 θ は隣接三原子の結合角、 Φ は隣接四原子のねじれ角、 R_i は i 番目の原子と j 番目の原子の距離、 q_i は i 番目の原子の電荷をそれぞれ表し、 $K_r, r_{eq}, K_\theta, \theta_{eq}, V_m, \eta, \gamma, A_p, B_p$ はそれぞれ結合原子の組み合わせで決まる定数である。右辺第一項は隣接二原子間の共有結合ポテンシャルを、第二項は隣接三原子の結合角ポテンシャルを、第三項は隣接四原子のねじれ角ポテンシャルをそれぞれ表し、和は各結合の数だけ取る。第四項は Coulomb および Vandel Waals (VDW) ポテンシャルである。

2.2 並列化 本解析も含め一般に分子動力学法において最も計算コストを要するのは各粒子に働く力の計算部であり、特に Coulomb 項および VDW 項の計算量はカットオフ無しの直接計算では粒子数の二乗に比例して増加する。ゆえに力の計算部を効率よく並列処理することが計算時間の短縮に有効となる。

本コードでは力の計算部について粒子分割型の並列化を行い、各プロセッサが同数の粒子の計算を担当するよう割り当てた。ここで、プロセッサ間の計算負荷の分散を考慮する必要がある。全粒子数を N としたとき k 番目の粒子に働く Coulomb 項および VDW 項について計算すべき粒子ペア数は作用反作用を考慮して $(N - k)$ であり、プロセッサに対し一番目の粒子から順に同数の粒子を分配してはプロセッサ間で計算負荷のバランスがとれず高い並列化効率を得られない。そこで粒子を各プロセッサにサイクリック分割して割り当てた。ハイブリッド並列プログラミングモデルにおいては図 2 に示すように粒子を各 SMP ノード、各プロセッサに割り当てるそれぞれの段階でサイクリック分割を用いた。

Fig.2 Cyclic decomposition method

分子動力学法では粒子の初期座標・初期速度・系の温度などを初期データとして入力する。その後はタイムステップ毎に座標値を用いてエネルギー関数から各粒子に働く力を計算、その力に基づき座標を更新、更新した値を次ステップの座標として用いることを繰り返

して系の時間発展を追う。ここで並列化に際しプロセッサ毎にすべての粒子の座標・速度などのデータを持たせることで力の計算途中でのプロセッサ間通信を排除した。すべてのプロセッサが独立に担当粒子について力の計算を終えたのちそれらを一度に足し合わせる。

図 3 は 2 SMP ノード (ノード内 2 プロセッサ) 使用時の並列分子動力学計算の流れをフラット MPI、ハイブリッド両並列化手法について示したものである。図 3 においてプロセッサ P1, P2 および P3, P4 がそれぞれ同一 SMP ノードに属し、また、 F は粒子に働く力、 X は粒子の座標、 V は粒子の速度をそれぞれ表す。

Fig.3 Process of parallel molecular dynamics method

フラット MPI 並列化の場合、同一 SMP ノードに属するプロセッサ間についてもメッセージパッシングによる通信を行う。つまり、実際に行われる処理は分散メモリ型並列計算機を用いた場合と全く変わらない。一方ハイブリッド並列化の場合、同一 SMP ノードに属するプロセッサ間のデータ転送については OpenMP によりメモリを共有し直接参照することが可能であり、通信は各 SMP ノードに一つずつ存在するマスタースレッド (図 3(b) P1 および P3) 間でのみ行う。

OpenMP のようなスレッド型並列処理ではマスタースレッド以外のスレッドはプログラム中で並列実行の指示行があった時点で生成され、並列実行部分が終了した時点で消滅し、そこにはそれぞれオーバーヘッドが生じる。ハイブリッド並列化においてはマスタースレッドのみが MPI 通信を行うことを保証しなければならないが、通信のたびにその前後でスレッドを消滅・生成させては計算時間に占めるオーバーヘッドの割合が大きくなるため、極力スレッドの生成・消滅の回数を減らすことがハイブリッド並列化で高い並列化効率を得るのに重要である。そのためには MASTER ディレクティブと呼ばれる OpenMP ディレクティブを用いればよい。プログラム中で MASTER/END MASTER ディレクティブに囲まれた箇所の演算はマスタースレッドのみが実行し、他のスレッドはそれを何もせず通過

する。よって SMP ノード間の MPI 通信の前後に MASTER / END MASTER ディレクティブを挿入することでマスタースレッドのみによる通信が保証され、かつスレッドの生成・消滅を計算の開始時および終了時のみに削減できる。図 4 にスレッドの生成・消滅オーバーヘッドの生じる様子を、MASTER / END MASTER ディレクティブを用いない場合と用いた場合のそれぞれについて示す。

Fig.4 Overhead due to a Fork/Join of threads

(a: Without using MASTER directive, b: Using MASTER directive)

加えて、OMP_GET_THREAD_NUM 関数などの OpenMP 関数についてもその呼び出しに時間を要するため、出来る限り呼び出し回数を削減することが必要である。

3. 性能比較

SMP クラスタ型並列計算機上でのタンパク質構造予測並列分子動力学計算における、MPI/OpenMP ハイブリッド並列化手法とフラット MPI 並列化手法の計算性能比較を行った。計算対象として原子数 $N = 6,682$, $N = 33,402$ の二つの擬似タンパク質（以下、それぞれ Small モデル, Large モデルと呼ぶ）を用いた。これらは便宜的に 20 種類のアミノ酸をランダムにつなぎモデリングしたもので、Small モデルはアミノ酸残基数 400 程度の標準的な大きさのタンパク質に、Large モデルはタンパク質複合体にそれぞれ相当する。性能評価に際しては分子動力学法の 1 タイムステップに要する時間を計測し式(2)に示すスピードアップ S_n および並列化効率 P_n をみた。

$$S_n = \frac{T_1}{T_n}, \quad P_n = \frac{S_n}{n} \times 100 \quad (2)$$

ここで、 n は計算に用いるプロセッサ数、 T_1 は 1 プロセッサ用いたときの経過時間、 T_n は n プロセッサ用いたときの経過時間をそれぞれ表す。非周期境界条件を課し、時間積分には Velocity Verlet 法を用いた。Coulomb 項および VDW 項についてはカットオフ無しの直接計算を行った。溶媒分子は取り入れていない。また、SMP クラスタ型並列計算機として東京大学情報基盤センター Hitachi SR8000MPP を 16 ノード使用した。SR8000MPP は 8 プロセッサの SMP 型アーキテクチャを 1 ノードとして 144 ノードを多次元クロスバネットワークでつないだ SMP クラスタである。演算プロセッサは擬似ベクトル処理機構をもち、1 ノードあたり 8 GFLOPS のピーク性能を有する。

まず、基本的なノード間通信性能の評価のため 1 タイムステップ中の MPI 通信に要する時間を測定した。使用ノード数が 8 (64 PE) と 16 (128 PE) の二つの場合について 50 タイムステップ分の通信時間を計測し平均した。問題サイズは Large モデルに固定しハイブリッドとフラット MPI の比較を行った。本計算では 1 タイムステップに含まれる MPI 通信は MPI_ALLREDUCE が一回である。

測定結果を表 1 に示す。これより、ノード間通信においてはハイブリッドのほうが速いことがわかる。また、ハイブリッドでは使用ノード数の増加に対して MPI 通信時間の変化が小さいことがみとれる。

Table 1 Amount of time for MPI communication
(Large model: $N = 33,402$)

Number of PEs	Flat MPI [sec]	Hybrid [sec]
64	0.083	0.045
128	0.101	0.048

図 5 に Small, Large 両モデルにおけるハイブリッドおよびフラット MPI 両並列化手法のスピードアップをそれぞれ示す。同様に図 6 に並列化効率を示す。Small, Large どちらのモデルにおいても使用 SMP ノード数によらずハイブリッドの性能がフラット MPI を上回っていることが確認できる。また、使用 SMP ノード数の増加とともに両手法のグラフの傾きの差異が顕著となっており、フラット MPI と比較してハイブリッドはプロセッサ増加に対する並列性能低下の仕方がにぶいことがわかる。特に Large モデルについてはハイブリッド並列化手法の適用により良好な台数効果が得られており例えば 16 SMP ノード (128 PE) 使用時のスピードアップは 114 倍である。これは並列化効率

Fig. 5 Speed up (Small: N=6,682, Large: N=33,402)

Fig. 6 Parallel efficiency (Small: N=6,682, Large: N=33,402)

で表せば 90 % に対応し、フラット MPI の 75 % と比較して高い効率を維持している。

図 7 に 16 残基ホモアラニンに対する構造予測分子動力学計算のスナップショットを示す。時間刻み幅を 0.5 フェムト秒とし、伸びた初期構造からサブナノ秒の定温シミュレーションを行った。時間積分に Velocity Verlet 法を用い、Nose-Hoover 法により系の温度を 300 K に保った。Coulomb 項および VDW 項についてはカットオフ無しの直接計算を行い、溶媒分子は取り入っていない。また、非周期境界条件を課した。ホモアラニンはヘリックス構造を形成することが知られているが、本計算では解析時間の短さから明確なヘリックス構造を確認するに至らなかった。

Fig. 7 Snapshots from a MD simulation of (Ala)₁₆

4. 考 察

Small, Large 両モデルについて使用 SMP ノード数によらずハイブリッドの性能がフラット MPI を上回っているが、しかし使用 SMP ノード数が少ない場合には両者の性能差はほとんどみられない。これより SMP ノード内のデータ転送について、メッセージパッシングによる通信よりメモリ共有による直接参照のほうが高速である有利性はあまり大きくないことが分かる。一方 SMP ノード間の MPI 通信について、本計算では各プロセッサ（ハイブリッドでは各 SMP ノード）が独立に計算した粒子に働く力を足合わせる際に MPI_ALLREDUCE 関数を用いている。ここでは 1 SMP ノードが 8 プロセッサからなる SR8000MPP を使用しているためハイブリッドではそれに関わるプロセッサ数がフラット MPI の場合の 1/8 となる。互いに同期をとるプロセッサ数が減ることから通信時間の短縮が見込まれ、その効果は使用 SMP ノード数 (PE 数) が増加するにつれて大きくなると予想されるが、実際本計算では 16 SMP ノード (128 PE) 使用時に両並列化手法の性能差が最大となっている。また Small モデルと Large モデルを比較すると、同数の SMP ノード使用に対して Small モデルの場合に両手法の性能差が大きい。一方で、全体として並列性能が Large モデルと比べ低いのは Small モデルでは粒子数が少なく、個々のプロセッサの計算量が小さいためである。

これらより、ハイブリッド並列化がフラット MPI 並列化に対して特に有利になるのは全計算に占める通信の割合が大きいシミュレーションを実行する場合であるといえる。これまでハイブリッド並列化はそのプログラミングコストに対し性能向上が少なくフラット MPI と比べ劣る結果を得ることが多かったが^{9,10}、分子動力学法、特にタンパク質系の計算など Coulomb 項に高精度の評価が必要でカットオフが行えない場合には通信の割合が増し、ハイブリッド並列化が効果的となることが分かった。これは Coulomb 項の計算にカットオフを行わない Barnes-Hut tree method などの高速化手法を用いる場合にも同様であると考えられる。

ほかにハイブリッド並列化によって高い性能向上を得るための条件として、十分なメモリバンド幅の確保が挙げられる。前述した理由から 1 SMP ノードに含まれるプロセッサ数が多い計算機環境ほどハイブリッドが有利であると考えられるが、SMP ノード内で OpenMP によるメモリ共有の際にプロセッサとメモリ間のデータ転送バンド幅が少ないとプロセッサの競合が起き性能が低下してしまう。本研究では性能評価に

ハイエンド並列計算機である SR8000/MPP を使用したため十分な大きさのメモリバンド幅を確保でき良好な性能向上を得たが、一方 Dual SMP-PC クラスタや 4way SMP-PC クラスタを用いた場合には性能低下が大きくフラット MPI 以上の性能が出ないことが多い^{9,10)}。

以上より、通信の多いアプリケーションをハイエンド SMP クラスタ上で実行する際には、ハイブリッドプログラミングモデルを用いることで従来のフラット MPI プログラミングモデルより高い並列性能が得られることが明らかになった。今後 SR8000 のフルノード使用や地球シミュレータなど大規模 SMP クラスタ上でタンパク質構造予測並列分子動力学計算を実施する場合にはハイブリッドプログラミングモデルを用いる予定である。また、本稿では Coulomb 項および VDW 項に対し、アルゴリズムの極めて単純なカットオフ無しの直接計算を行った。しかし粒子数が数千を超える系に対し Coulomb 項および VDW 項を直接計算することは計算量の点から現実的ではない。多粒子系の高速解法として広く知られている Barnes-Hut tree method や Fast multipole method への MPI/OpenMP ハイブリッド並列プログラミングの適用および性能評価が今後必要である。加えて、長時間解析の実施およびレプリカ交換法などの効率的構造サンプリング手法を導入する予定である。

5. 結 言

タンパク質立体構造予測並列分子動力学計算コードを開発し、それに対して MPI/OpenMP ハイブリッド並列化手法を適用した。SMP クラスタ型並列計算機である Hitachi SR8000/MPP 上で粒子数 33,402 の系に対し並列性能を測定したところ、16 SMP ノード (128 PE) 使用時に 90 % の並列化効率を示し、従来の MPI のみを用いた並列化手法の 75 % と比較して良好な性能が得られた。この傾向は使用する SMP ノード数 (PE 数) が増加するにつれ顕著であり、大規模 SMP クラスタ上でタンパク質系の並列分子動力学計算を行う場合にハイブリッド並列プログラミングモデルが最適なプログラミングモデルであることを確認した。

参 考 文 献

- (1) 日本学術振興会, 未来開拓学術研究推進事業計算科学 2001-2002 報告書, (2002), 49-60, 日本学術振興会.
- (2) 中村春木・有坂文雄, タンパク質のかたちと物性, (1997), 1-49, 共立出版.
- (3) C. B. Anfinsen, Principles that govern the folding of protein chains, *Science*, 181 (1973), 223-230.
- (4) W. D. Cornell, P. Cieplak, C. I. Bayly, I. R. Gould, K. M. Merz, Jr., D. M. Ferguson, D. C. Spellmeyer, T. Fox, J. W. Caldwell and P. A. Kollman, A second generation force field for the simulation of proteins, nucleic acids and organic molecules, *J. Am. Chem. Soc.*, 117 (1995), 5179-5197.
- (5) <http://www.es.jamstec.go.jp/>
- (6) R. D. Falgout and J. E. Jones, Multigrid on massively parallel architectures, *Lecture Notes in Computational Science and Engineering*, 14 (2000-9), 101-107.
- (7) F. Cappello and D. Etienne, MPI versus MPI+OpenMP on the IBM SP for the NAS Benchmarks, *Proc. of Supercomputing 2000*, CD-ROM (2000-10).
- (8) K. Nakajima and H. Okuda, Parallel iterative solvers for unstructured grids using an OpenMP/MPI hybrid programming model for the GeoFEM platform on SMP cluster architectures, *Lecture Notes in Computer Science*, 2327 (2002-5), 437-448.
- (9) 立石絢也・樫山和男, SMP クラスタでの MPI と OpenMP による並列計算効率の比較検討, 第 51 回理論応用力学講演会講演論文集, (2002-1), 495-496.
- (10) 中林靖, SMP クラスタにおける効率的な並列化手法の検討, 日本機械学会第 15 回計算力学講演会講演論文集, No.02-02 (2002-11), 65-66.