

共同利用(産業利用トライアルユース: 先端研究施設共用促進事業『みんなのスパコン』TSUBAME によるペタスケールへの飛翔) 成果報告書 平成22年度 新規利用拡大

利用課題名 分子動力学計算ソフトウェア NAMD の GPGPU 大規模並列環境における性能評価
英文: Performance evaluation in the GPGPU large-scale parallel environment of molecule dynamics calculation software NAMD

高瀬 規男 久富 喜弘
Norio Takase Yoshihiro Hisatomi

株式会社フィアラックス 研究開発部
FiatLux Corporation R&D Division
<http://www.fiatlux.co.jp>

本プロジェクトでは、米国イリノイ大学で開発されている分子動力学計算ソフト NAMD を使用し、TUBAME の GPU を複数のノードで並列実行が可能かどうか、また CPU と比較してどれだけ性能を発揮できるかの評価を行なった。また、十分な性能を発揮するにはどの程度の系が妥当なのかも幾つかのテストデータを準備しベンチマークテストを実施した。性能面、結果の妥当性から GPU による分子動力学計算がある程度のパフォーマンスを実現できていることが確認できた。

Keywords: NAMD, GPU, Molecular Dynamics

背景と目的

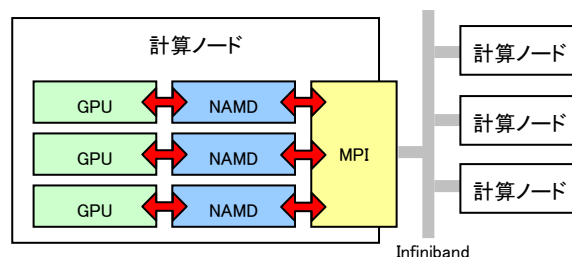
総合科学技術会議は、第 3 期科学技術基本計画に基づき国家的・社会的課題に対応した研究開発の推進戦略を示している「分野別推進戦略 - ライフサイエンス分野」において、「創薬、医療技術関連の研究開発については、これまで進展が図られた基礎研究の成果を実用化につなげるのが重要」と記載されている。創薬のための基礎研究のひとつである分子動力学計算では、現実的な時間で有効かつ意味のある結果を得るためには大規模な並列計算環境が必要となる。

これらの環境を利用できるのは国の代表的な研究機関や研究資金の潤沢な企業など一部の組織に限られており、大学の一研究室や生化学などの計算化学が本筋ではない研究者が分子動力学計算を活用しようと考えると、費用的な面から見て取り組めないのが現状である。

価格に対する計算性能が CPU に比べ理論上数十倍も高い GPU をこの計算分野で活用できるようになれば、利用者の裾野が広がると考える。本課題の目的は、GPU がどれだけ性能を発揮でき、導入コストの面から見てメリットがあるのかを評価することにある。

概要

GPU の性能評価には、米国イリノイ大学で開発されている分子動力学計算ソフト NAMD を使用する。NAMD は、比較のため CPU 版と CPU+GPU 版をそれぞれコンパイルによって準備した。どちらも、Open MPI を使って並列計算を実行するものである。OpenMPI は TUBAME2.0 の環境では Infiniband によって高速な通信が可能となっている。



計算対象はタンパク質分子とし、計算の条件等は実際の利用シーンに則した性能評価をおこなうため、生体高分子のシミュレーションで一般的に用いられている計算モデル、計算手法を用いることにした。具体的には、以下のとおりである。

(様式第 20) 成果報告書

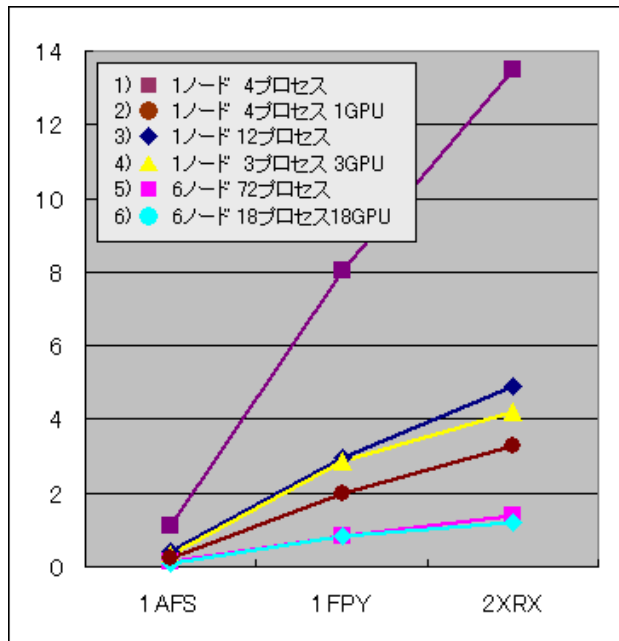
モデル	
対象分子	タンパク質分子
溶媒分子	タンパク質を囲む直方体領域
条件	
アンサンブル	Canonical (NVT)
ステップ数	25 万
タイムステップ	2.0 fs
境界条件	周期境界条件
カットオフ	12 Å
静電相互作用計算	PME

また、系の大きさによる計算速度の違いを見るために以下の 3 種類のデータを準備した。

PDB ID	分子量	溶媒を含んだ総原子数
1AFS	76,000	49,000
1FPY	629,000	350,000
2XRX	880,000	590,000

結果および考察

ベンチマークテスト結果を以下にまとめる。

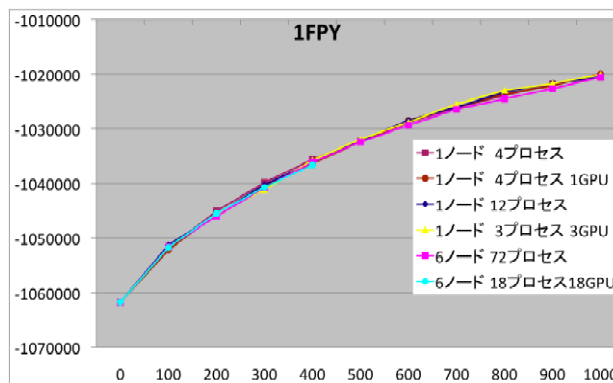
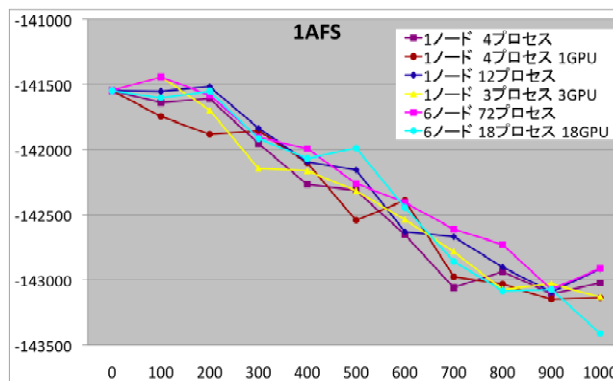


この結果から、システムの規模を考慮すると 2)の結果がもっとも効率のよい計算ができていることがわかる。2)の 1AFS が 1.89 倍、1FPY が 2.35 倍、2XRX が

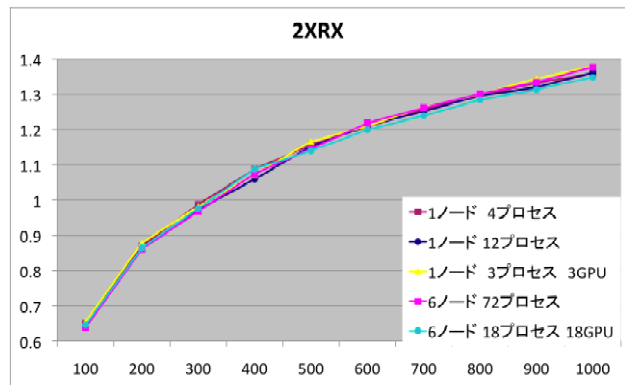
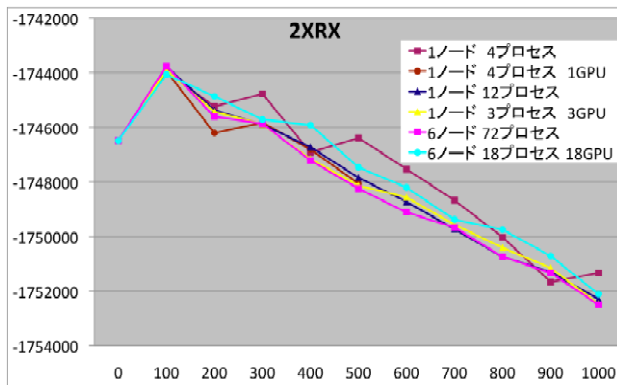
2.39 倍の計算速度が、6 ノードを使用した 5)、6)のそれらと同等となる。今回のベンチマークテストには含まれていないが、単純計算で 3 ノード(36 プロセス)での並列計算と同等の性能を発揮できると考えられる。

1 プロセスについて 1GPU を割り当てた計算 4)、6)では、同じノード数の CPU だけの計算 3)、5)と比較しても劇的な速度向上とはなっていない。GPU プロファイラによる GPU の動作状況を確認したところ、アイドルの時間が大部分を占めていることが確認された。NAMD の場合、分子動力学シミュレーションの計算の大部分を占める静電相互作用計算を GPU が担当しているが、それ以外の CPU が担う処理に比較して、GPU 計算が即座に完了していることがわかる。なお、計算ノードでの複数プロセス割り当ての実行ができなかった。

それぞれの計算結果についてポテンシャルエネルギー一値を比較した。



(様式第 20) 成果報告書

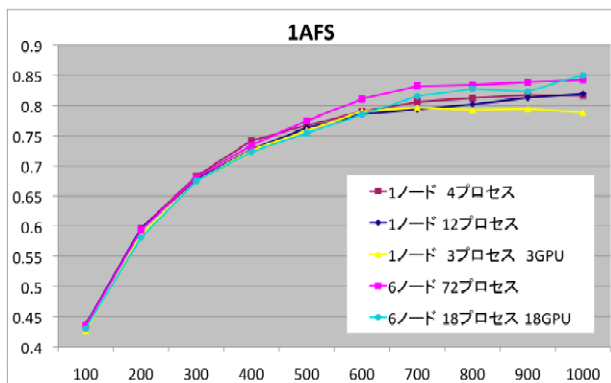


グラフでは 1AFS は変化量が小さいため計算ごとに異なる推移を示しているが、計算も CPU だけで計算したか GPU を利用して計算したかの違いによる影響は見られない。1FPY は変化量が大きいということもあり、計算ごとの細かい違いはグラフからは確認できなかった。2XRX も 1AFS 同様に細かい差異は見られるが、やはり CPU だけで計算したか GPU を利用して計算したかの違いによる傾向の違いは見られない。同様に、それぞれの計算結果においてタンパク質主鎖の RMSD 値についても比較した。

RMSD 値の比較ではどの計算結果もポテンシャルエネルギー値の比較ほどの違いは見られなかった。1AFS の計算結果だけ少し違いがあるが、GPU の利用の有無による影響ではない。

これらの比較から、CPU だけで計算したか GPU を利用して計算したかによって計算結果に大きな差はないことが確認できた。

まとめ、今後の課題



CPU に対する GPU の性能を複数の計算結果をもとに評価することができた。また、計算結果に着いても GPU によって得られる結果が CPU と比較しても妥当なものであると判断できた。GPU の性能自体は、導入コスト等を考慮すると CPU に比較して格段によいという結果は得られなかったのだが、1 ノードあたり 1 つの GPU デバイスを搭載したシステムで効率の良い計算環境を構築できる可能性が示せた。NAMD の高速化のためのチューニング作業については、時間的な制約から殆ど取り組むことができなかった。今後 NAMD のチューニング作業に取り組んでいく。また、より安価な GPU でも同等の計算が可能かどうか調査していく。

