

cosgene 機能追加  
詳細設計書

2018 年 2 月 5 日

Copyright (C) 2006-2018 Next Generation Natural Product Chemistry (N<sup>2</sup>PC)

将来の超並列計算に対する加速度向上策として空間分割による並列実行があり、空間分割による並列計算を行う cosgene を試作する。

### 1) 計算空間の分割による並列化速度の向上

力の計算+積分器を個々のプロセサで並列に実行することにより、並列計算機の性能を引き出す。(積分器の逐次処理が加速率向上のボトルネックである)

### 2) 空間分割による通信コストの削減

隣接する空間に対する原子座標のみを通信することで、全体の通信量を削減する。(原子座標の BROADCAST, 原子への力の総和計算は台数に対し  $\log(N)$  で増加し、また、計算量の減少に対する相対的な実行時間比率が増加する)

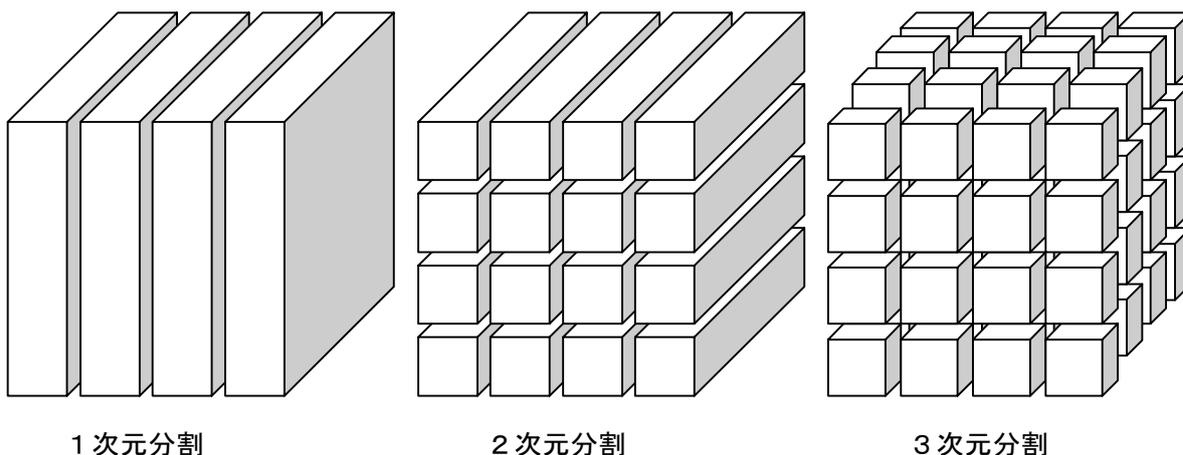
#### (1) 空間分割次元

空間分割は系を複数の直方体の集合で分割する。

空間分割として 1 次元、2 次元、3 次元の分割が考えられるが、1、2 次元分割は分割数 1 の次元が存在する 3 次元分割であることと同義であるため、3 次元分割を前提とする。

今回は分割数はユーザ指定とする。

#動的に分割し、最適な分割形状を評価する方法もあるが、今回は採用しない。



#### (2) 空間割り当て

空間分割では系の空間を計算空間に分割し、各計算空間に含まれる原子への力を計算することで、計算コストを削減する。

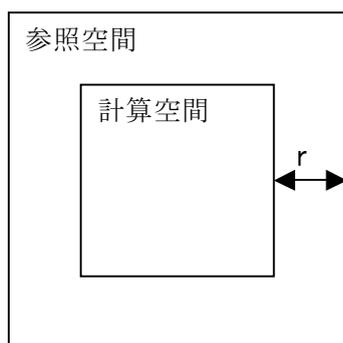
計算空間 1	計算空間 2
計算空間 3	計算空間 4

メモリ分割については、各プロセスごとに保持する原子分の領域を保持する方式と、各プロセスが全原子分の領域を持つ方式がある。

前者はメモリ使用量が少ないが、計算対象原子が他のプロセスに移動した時点で力場の相手や自原子の情報 (bond, angle, torsion, improper, 質量, 原子タイプ) を転送する必要がある。

後者はメモリ使用量が多いが、計算対象原子が他のプロセスに移動した場合でも、前述の情報の転送は不要である。今回は後者を採用することとする。

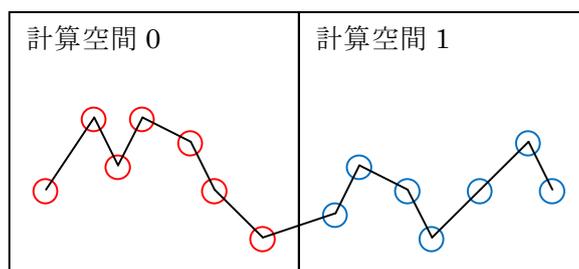
計算空間の境界付近にある原子には、隣接する計算空間に属する原子から寄与される力が発生するため、計算空間の領域を拡張して相互作用相手原子の存在する空間を設ける。  
(便宜上、これを参照空間と呼ぶ)



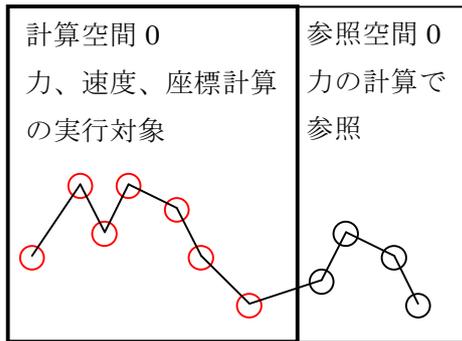
計算空間に対する参照空間の拡張値  $r$  は以下の全ての条件を満たすこととする。

- (1) 計算空間の直方体の最も小さい辺よりも  $r$  は小さい  
→参照空間が複数の計算空間にまたがるため
- (2) 最も長距離の 1-4 原子間よりも長い
- (3) カットオフ距離よりも長い(\*1)

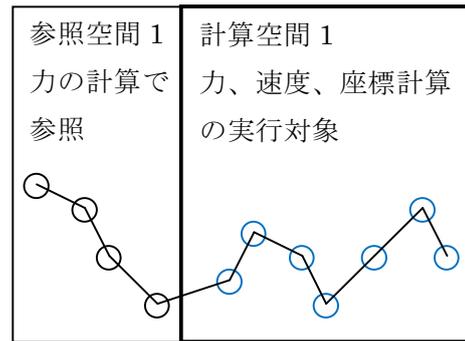
# 2 プロセスでの 1 次元分割での参照空間と計算空間は以下のとおりとなる。



逐次実行での計算空間



プロセス 0 の計算空間と参照空間



プロセス 1 の計算空間と参照空間

計算分割方針：

1) 積分器：

各プロセスでは自身が担当する計算空間に含まれる原子(残基)に対して力の計算、速度計算、座標更新を行う。

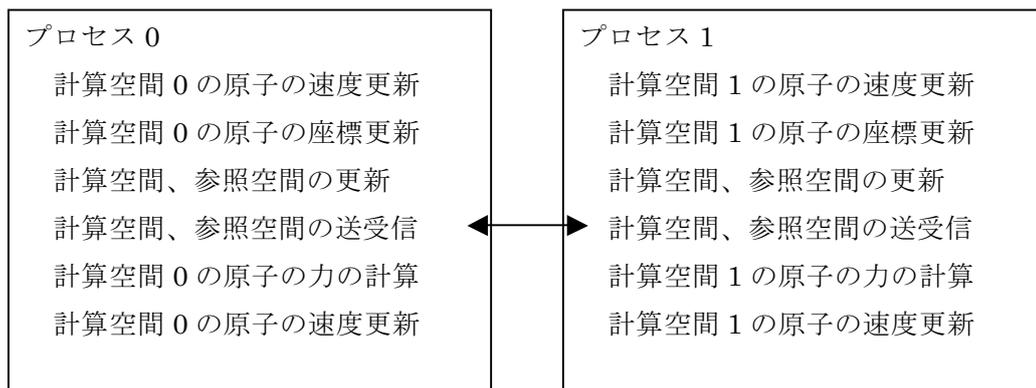
2) 各空間への原子割り当て処理

各空間に原子を割り当てる処理は原子座標更新後に実施し、自プロセス/他プロセス、参照空間/計算空間の割り当てを実施する。

3) 計算空間と参照空間

各プロセスでは自身が担当する計算空間に含まれ、かつ他プロセスの参照空間に含まれる原子(残基)の座標を送信する。

また、自身の参照空間に含まれ、かつ他プロセスの計算空間に含まれる原子(残基)の座標を受信する。



※計算空間、参照空間の算出には、空間を分割したセルに割り当てる方式のコストが低い  
ため、これを採用することとする。

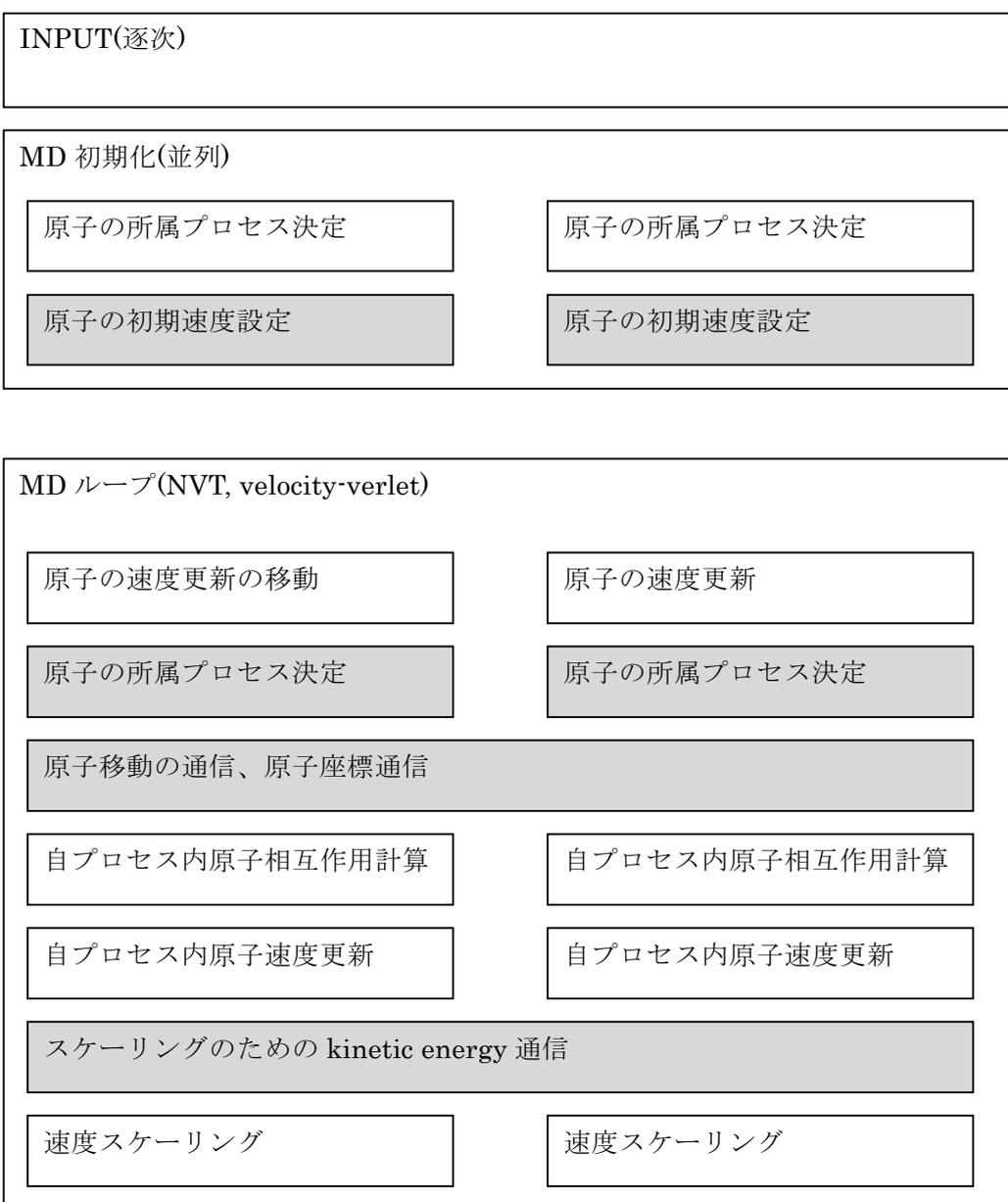
## 制限事項

原子データをそれぞれのプロセスに分割して配置することで、以下の機能についてはデータの分散化を考慮する必要がある。

このような機能については、今回の開発では制限事項とし、動作結果を保証しないこととする。

- (1) 全体の構造を考慮する処理(集合演算が必要): FMM, PME, STOPCE など
- (2) 空間分割と異なるグループ分け: 剛体, SHAKE など
- (3) 全体の情報が必要: トラジェクトリ出力

## cosgene の修正内容



(1) 空間設定

系全体の空間を各セルの空間に分割する。

(2) 座標設定

当該プロセスが担当するセルの原子を決定する。また、他のセルに移動した原子情報の通信を実行する。

(3) 参照空間設定

当該セルの保持する原子の相互作用に必要な参照空間の原子の座標を取得する。

(4) 相互作用計算

(5) 積分

相互作用に応じて加速度を計算、現在の速度に加算して、次のタイムステップでの座標を取得する。

(6) (2) を繰り返す

-----