

MODYLASと古典MD①

CMSI計算科学技術特論C
2015年12月17日

名古屋大学大学院工学研究科
吉井範行

MODYLASと古典MD①

- 自己紹介
- MODYLASの概要
- MDソフトの現状
- MODYLAS実行のイメージ
- 開発の経緯
- ソフトウェアの構成
- ソフトウェアの使用例

謝辞

[Nagoya University]

Y. Andoh



S. Okazaki

[Fujitsu]

S. Ichikawa

H. Komatsu

S. Ishizuki

Y. Takeda

M. Fukushima

[Institute for Molecular Science]

K. Iwahashi

F. Mizutani

[Kanazawa University]

K. Kawaguchi

H. Nagao

[Riken AICS]

K. Minami

[Keio University]

K. Yasuoka

[UEC]

T. Narumi

[Nagoya University]

W. Shinoda

[University of Tokyo]

H. Watanabe

[K&F Computing
Research Co.]

A. Kawai

[Titech]

R. Yokota

自己紹介

- 大学院から本格的にプログラミング、コンピュータシミュレーションを学ぶ。スパコン(分子研NEC SX3)利用開始。LJ、水系のMD。(ー2000)
 - 民間の研究所にて、汎用MDソフトを使い始める。MPIによる並列化。(2000ー2003)
 - 国の研究所にて汎用コード開発(NAREGIプロジェクト。岡崎グループにて、岩橋氏、安藤氏と)。領域分割、高速化、並列化。(2003ー2007)
 - 実験系グループに属しつつ、汎用コード作成の後方支援。(2007ー2011)
 - 現在、MODYLASの機能拡張に向けて開発を進めている。(2011ー)
-
- MDを中心とした計算科学
 - 実験中心の時期を8年ほど挟みつつ、シミュレーションに関わって20年以上。

MODYLASの概要

MOlecular DYnamics software for LArge System

高並列汎用分子動力学シミュレーションソフトウェア

任意の分子集合体に対する汎用の大規模分子動力学計算プログラム。長距離力の取り扱いを含め、ナノ分野・バイオ分野における分子動力学計算に必要な各種手法を備える。高効率の並列計算が可能であり、超並列スパコンを用いて溶媒中のウイルス(約1000万原子)の全原子計算やリボソーム(数十万原子)の長時間計算が可能。

ナノ分野・バイオ分野における分子動力学計算に必要な各種手法を備えている。高効率の超並列計算が可能であり、数万原子から1000万原子を超える系までの長時間計算ができる。自由エネルギー計算にも対応している。

手法

古典分子動力学

対象物質・モデル

任意の分子集合体。特にナノおよびバイオ分野の分子系。例えば溶液、ミセル、脂質膜、タンパク質、高分子、ウイルス等

求められる物理量

系の軌跡、構造、自由エネルギー等の諸熱力学量

開発者

安藤 嘉倫, 小嶋 秀和(, 山田 篤志, 藤本 和士, 吉井 範行, 岡崎 進(名古屋大学 大学院工学研究科), 岩橋 建輔, 水谷 文保(分子科学研究所)

MODYLASの概要

使用言語	Fortran 77&90
コンパイラ	frtpx (Fujitsu), ifort (intel), pgf90 (PGI)
並列化	MPI/OpenMP/SIMD hybrid
対応する力場	CHARMM with CMAP <u>AMBER/OPLS</u>
アンサンブル	NVE, NVT (Nose-Hoover), isotropic NPT (Nose-Anderson), <u>anisotropic NPT (Nose-Parinello-Rahman)</u>
数値積分	RESPA
拘束	SHAKE/ROLL, RATTLE/ROLL
長距離相互作用	Fast multipole method(FMM), <u>Particle mesh Ewald method</u>

MODYLASの概要

ライセンス

MODYLAS license

アプリを利用できる環境

京, FX10, 一般のPCクラスタ(Linux/Unix)

並列化

MPI並列・OpenMP並列に対応。

MPI並列のプロセス数はWeb公開版1.0.3では2の n 乗($n \geq 1$)のみ対応。

OpenMP並列のスレッド数は任意の数に対応。

GPGPUにはOpenACCLレベルで対応済み(現時点ではWeb上での公開はしていない)。

Xeon-Phiには対応中(JHPCN課題)。

リンク

オフィシャルサイト: <http://www.modylas.org/>

MateriApps: <http://ma.cms-initiative.jp/ja/listapps/allapps/modylas>

PAL: http://pal.ims.ac.jp/pal/8000.php?t_application_id=1UAD

フォーラム

<http://www.modylas.org/forum>

MODYLASの概要

web site

The screenshot displays the MODYLAS website interface. At the top, the logo 'MODYLAS' is followed by the tagline 'MOlecular DYnamics software for LArge System'. A navigation menu includes links for HOME, OVERVIEW, DOWNLOAD, DOCUMENTATION, RELEASE NOTES, FORUMS, LITERATURE, DEVELOPERS, CONTACT, and LINKS. The main content area features a news feed with three entries:

- MODYLAS 1.0.4 was released.** (JUL 06, 2015)
MODYLAS 1.0.4 was released on 6 Jul. 2015.
Output-relating bug, which caused slowdown of the program execution under some conditions, were fixed.
Posted By yendo
- Tutorial Slide has been uploaded.** (JUN 30, 2015)
MODYLAS Tutorial Slide (30-Jun. 2015)(PDF) (English)
Posted By yendo
- MODYLAS 1.0.3 was released.** (JAN 26, 2015)
MODYLAS 1.0.3 was released on 26 Jan. 2015.
Subroutines for thermodynamic integration (TI) were implemented.
Posted By yendo

Below the news feed is a 'USER LOGIN' form with fields for USERNAME and PASSWORD, a 'Log in' button, and links for 'Create new account' and 'Request new password'. A 'Slide Up' button is visible at the bottom right of the page.

オフィシャルサイト: <http://www.modylas.org/>

MDソフトの現状

- ・汎用ポテンシャルセットの開発・・・対象系の分子のポテンシャルが簡単に構築できる
 - －多様な化合物に対応。生体分子(タンパク質、脂質、核酸、糖)など
 - －官能基が同じならポテンシャルパラメータも同じ
 - －同じ原子でも異なる官能基ではパラメータが異なる(アミノ酸の主鎖C α とC=OのC)
 - －異原子間のLJ相互作用では、本来組み合わせごとにパラメータ σ 、 ϵ が決まるが、簡単のために2つの原子のパラメータの相加平均や相乗平均で近似してしまう。ローレンツ・ベルテロー則。
- ・粗視化モデル
 - －複数の原子を一つにまとめて相互作用点を大幅に減らした粗視化モデルの汎用ポテンシャルセットも開発されている。
 - －大規模系が取扱い可能に
 - －両親媒性分子のポリモルフへの適用

ポテンシャル名	開発者
AMBER	Kollman
CHARMM	Karplus
OPLS	Jorgensen
GROMOS	Berendsen

プログラム名	開発者
AMBER	Kollman
CHARMM	Karplus
GROMACS	Hess
TINKER	Ponder
NAMD	Schulten
DESMOND	Shaw
MODYLAS	Okazaki

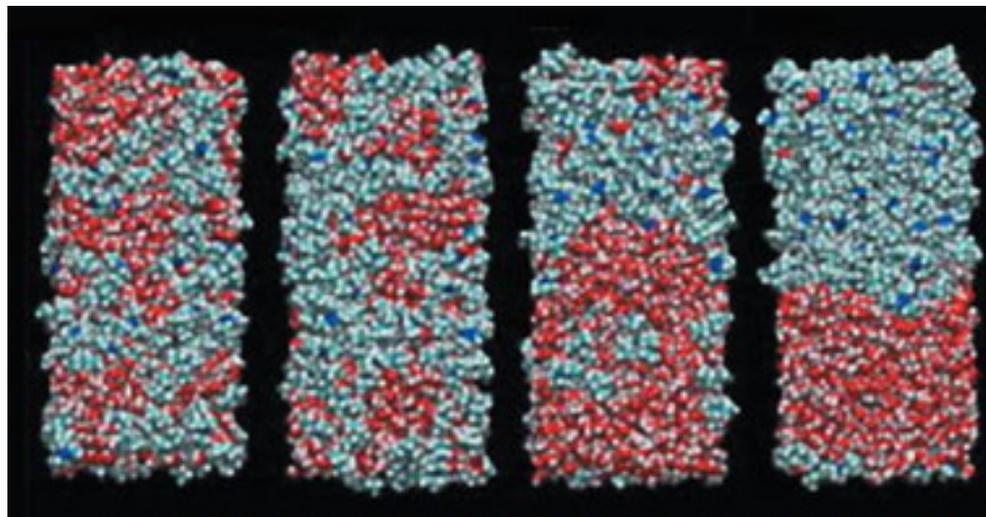
MDソフトの現状

計算の例

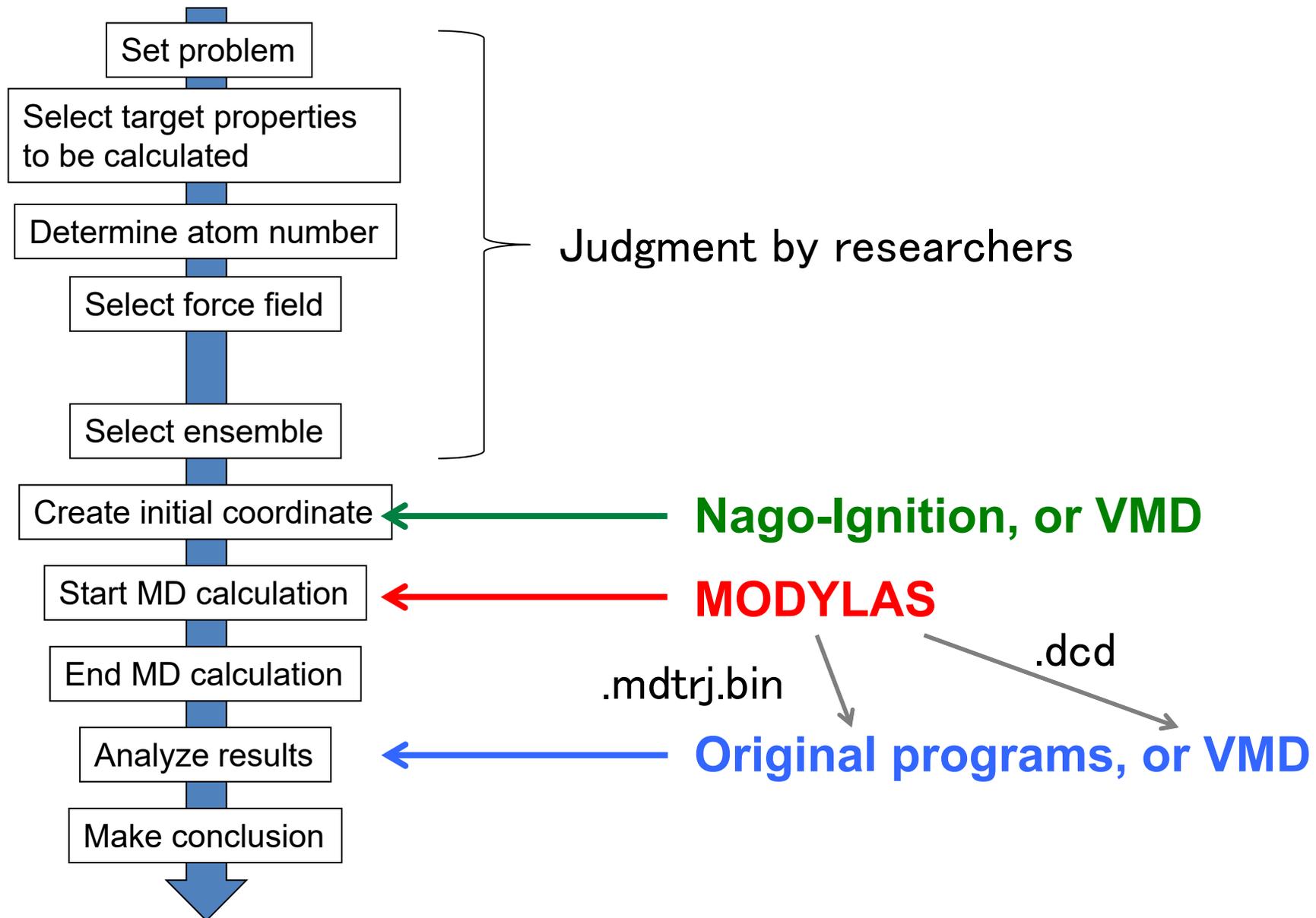
対象	系・現象	対象	系・現象
低分子液体、溶液	水、水溶液、 溶媒和、化学反応	タンパク質	折りたたみ、酵素、イオンチャ ンネル、阻害剤、タンパク質 複合体
固体	相転移、フォノン	DNA、RNA	
不均一系、界面	結晶成長、吸着、トライ ボロジー、蒸発、凝縮、 透過、分配、界面増強ス ペクトル、界面張力	生体膜	脂質膜、ラフト、抗生物質、薬 物透過、吸収
両親媒性分子水溶液 ミセル、単分子膜、二 分子膜、バイセル	球状ミセル、棒状ミセル、ウイルス L膜、LB膜、ベシクル		カプシドタンパク質
化学反応	溶液内化学反応、 電解反応、 自由エネルギー曲面	ガラス	ガラス化、スローダイナミクス
超臨界流体	分子系、混合系、クラス ターの生成	金属、半導体	電極、液体金属
高分子	分離膜、電解質膜、複雑 系、スローダイナミクス	非平衡マクロ動力学	対流、ずり、核生成、流体力 学

計算例 下部臨界点を持つ系の 相分離シミュレーション(2007)

- triethylamine(TEA) / 水 混合系
- 温度上昇によって均一相から2相に相分離
- 分子間相互作用(TEAの電荷)の改良
- 実験家との共研
- 2相分離のダイナミクス



MODYLAS実行のイメージ



入力作成支援ツール Nano-Ignition

- Software to prepare a set of input files for MODYLAS



```
sessionname.mddef  
sessionname.mdff  
sessionname.mdxyz
```

- Developed in “NAREGI” project

- Language

C (without parallelization)

- Source code

Available at www.nano-ignition.ims.ac.jp

Newest version is 2.2.20

- License

User registration system; Prohibition of redistribution; Obligation of literature citation (more detail, see web page)

Contributors

[Molecular Science]

Authors:

A. Yamada
K. Iwahashi
F. Mizutani
S. Okazaki

Acknowledgment:

Y. Andoh
K. Fujimoto
Y. Ikuta
K. Ishimura
T. Miyata

[Solid state physics]

Authors:

Y. Gohda
S. Tsuneyuki

Authors:

Y. Yosimoto

Download Nano-Ignition

Nano-Ignition www.nano-ignition.ims.ac.jp

お知らせ ライセンス 著作権者 **ダウンロード** Windows版のインストール方法

Click "Download" tag

ユーザーログイン
ユーザ名
パスワード
ログイン

アカウント情報 ログアウト

お知らせ ライセンス 著作権者 **ダウンロード** Windows版のインストール方法

ホーム

ダウンロード

種類
-すべて- 適用

Registration & log in

Open link for download

種類	バージョン	ファイル	
Windows	2.2.20	Ignition-2.2.20.exe	Binary for Windows
Source	2.2.20	ignition-2.2.20.tar.gz	Source code+document
Windows	2.2.19	Ignition-2.2.19.exe	
Source	2.2.19	ignition-2.2.19.tar.gz	* Compiled binary is already installed on phi, psi
Windows	2.2.18	ignition-2.2.18.exe	
Source	2.2.18	ignition-2.2.18.tar.gz	
Source	2.2.17	ignition-2.2.17.tar.gz	

Nano-Ignition: compilation

Go to the untar-zipped folder

>cd ignition-2.2.20/

Set of compilation environment

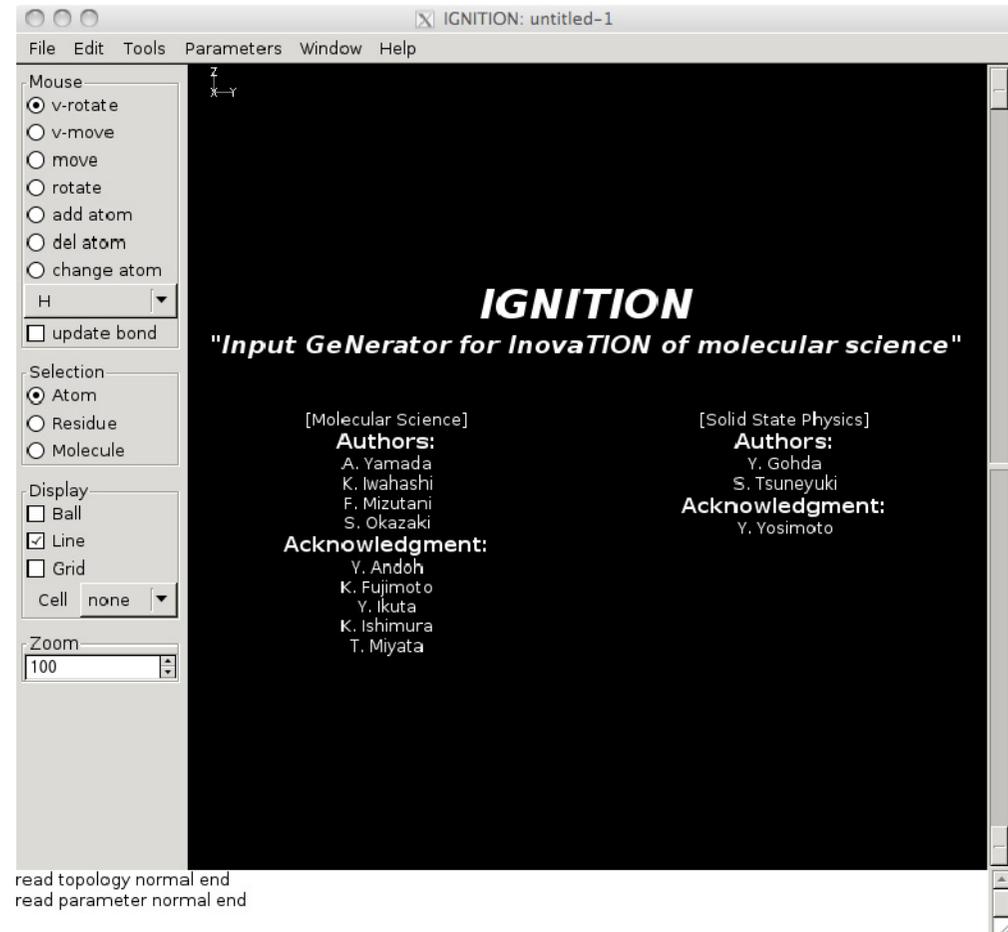
>./configure

Compile

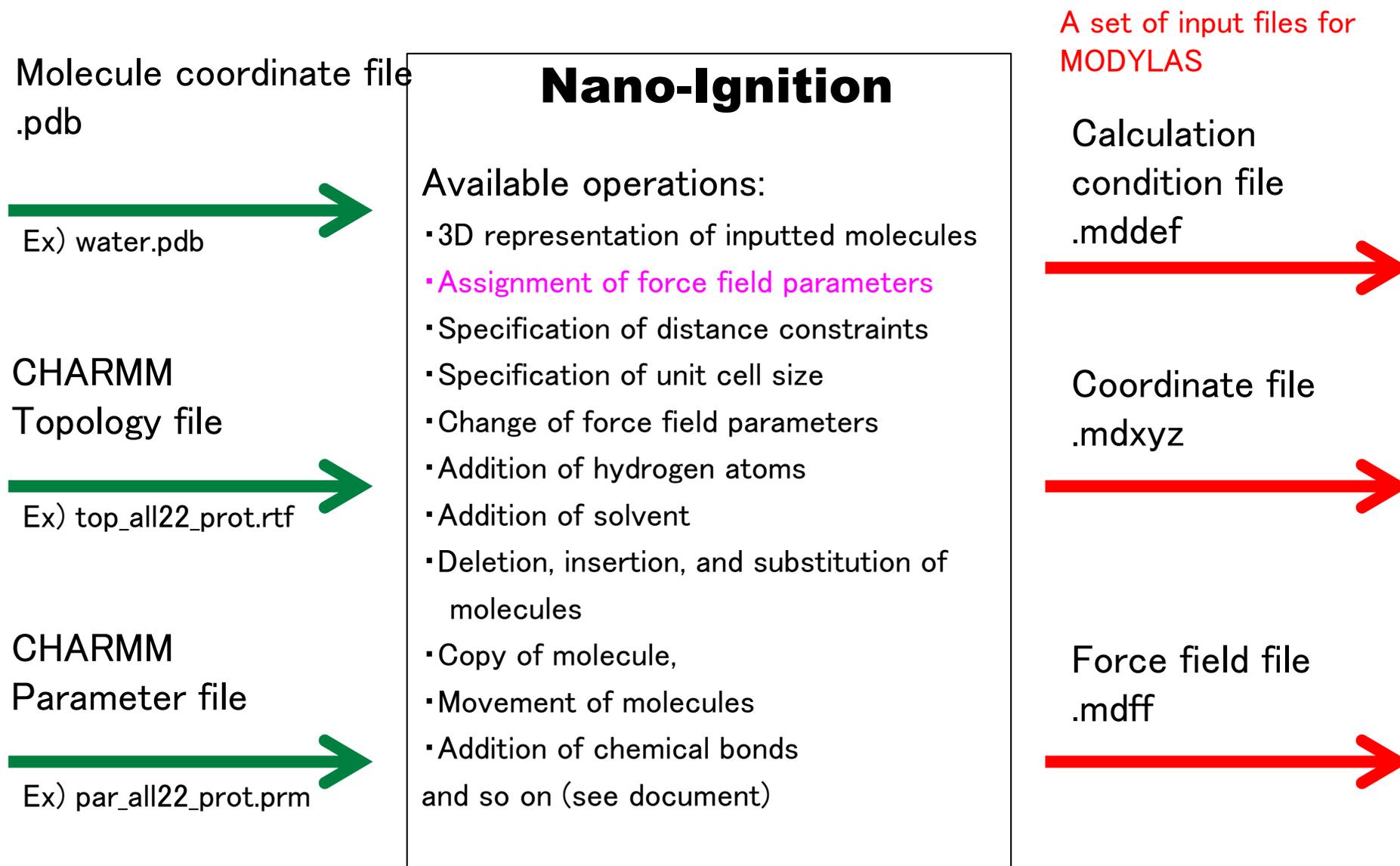
>make

Start up

>./ignition/ignition



Nano-Ignition: I/O structure

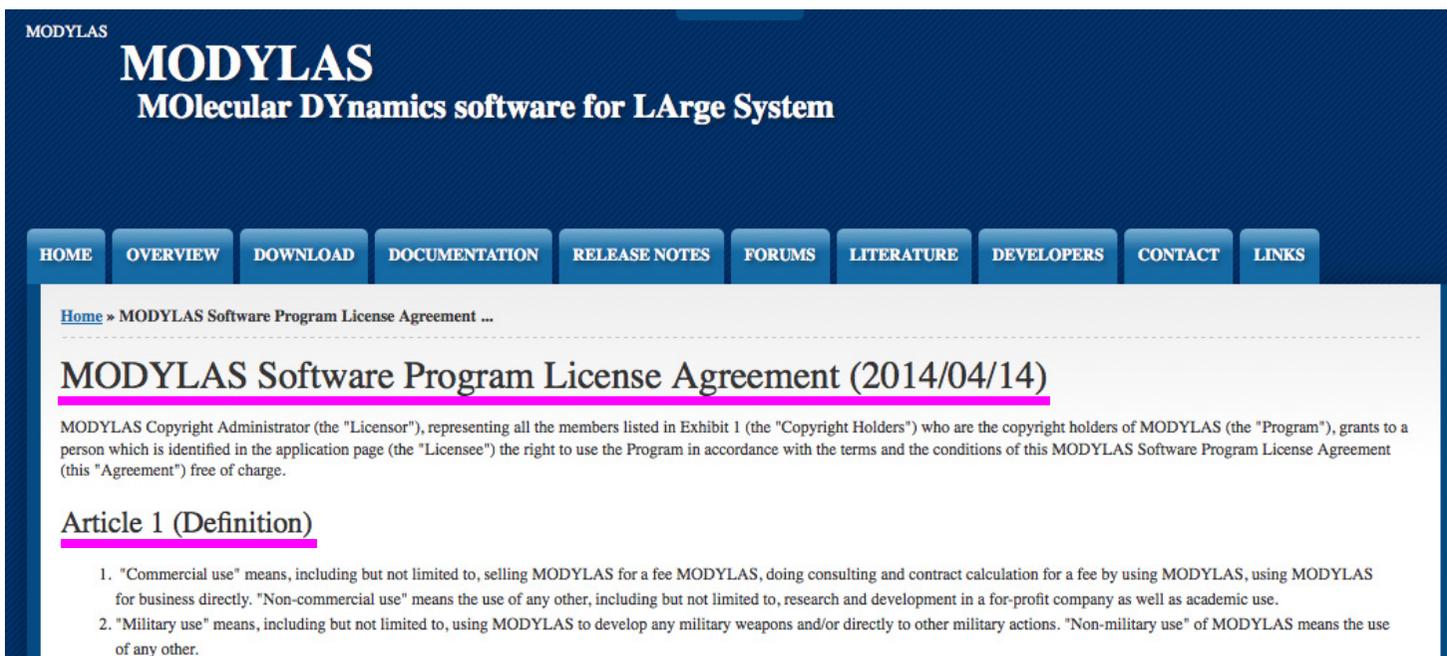


Sorry, skip detail in this lecture. See Appendix.

公開版のダウンロード方法

- ・ユーザー登録制
- ・再配布(ソース, バイナリともに)禁止
- ・文献引用 [J. Chem. Theory Comp., **9**, 3201-3209 (2013)]
- ・ベンチマーク結果を著作権者の許可無く公開禁止
- ・ソース変更,改良点は著作権者にフィードバック, など.

詳細は www.modylas.org のダウンロードページに記載. **日本語版ライセンス文書はレファレンスマニュアルおよびチュートリアル**の冒頭にあります.



The screenshot shows the MODYLAS website interface. At the top, the logo "MODYLAS" is displayed in white on a dark blue background, with the tagline "MOlecular DYnamics software for LArge System" below it. A navigation menu contains buttons for HOME, OVERVIEW, DOWNLOAD, DOCUMENTATION, RELEASE NOTES, FORUMS, LITERATURE, DEVELOPERS, CONTACT, and LINKS. The main content area is titled "MODYLAS Software Program License Agreement (2014/04/14)" and includes the following text:

MODYLAS Copyright Administrator (the "Licensor"), representing all the members listed in Exhibit 1 (the "Copyright Holders") who are the copyright holders of MODYLAS (the "Program"), grants to a person which is identified in the application page (the "Licensee") the right to use the Program in accordance with the terms and the conditions of this MODYLAS Software Program License Agreement (this "Agreement") free of charge.

Article 1 (Definition)

1. "Commercial use" means, including but not limited to, selling MODYLAS for a fee MODYLAS, doing consulting and contract calculation for a fee by using MODYLAS, using MODYLAS for business directly. "Non-commercial use" means the use of any other, including but not limited to, research and development in a for-profit company as well as academic use.
2. "Military use" means, including but not limited to, using MODYLAS to develop any military weapons and/or directly to other military actions. "Non-military use" of MODYLAS means the use of any other.

公開版のダウンロード方法

MODYLAS
MOlecular DYnamics software for LARge System

www.modylas.org

HOME OVERVIEW DOWNLOAD DOCUMENTATION RELEASE NOTE FORUMS LITERATURE DEVELOPERS CONTACT LINKS

Home » MODYLAS

MODYLAS

VERSION: 0.9.0beta
COMMENT: work on the K-Computer

If you agree [our license](#), please write your email address to send a URL for download, and then post your personal information below.

Your personal information filled out below will be used to send MODYLAS news and report activities.

Register your information

NAME *
Name

EMAIL *
e-mail

ORGANIZATION *
Organization

TITLE *
Title

CONFIRM PUBLICATION *
 YES
 NO

Do you confirm that the name of your organization is published in modylas report? Please answer "yes" if possible.

Submit

差出人 modylas-admin@draco.ims.ac.jp★
件名 Download link for <http://www.modylas.org/>
宛先 yoshimichi.andoh@apchem.nagoya-u.ac.jp★

Dear visitor,

Thank you for your interest.

Please use the following link to download the files:

<http://www.modylas.org/node/19/download/a233f49281a202d6de3ca1a9ccfd2538>

This link will be accessible until Wed, 01/22/2014 - 13:31. If you need access after the link expires, don't hesitate to revisit the download page on <http://www.modylas.org/>

After registration, e-mail in which download link is included will be sent. Click it for download.

MODYLAS: Folder branching

```
>tar xvfz MODYLAS_1.0.3.tar.gz
```

MODYLAS_1.0.3/

LICENSE.pdf	Software license document
source/	Source code folder
binary/	Precompiled binary folder
sample/	Input samples
document/	Manual and tutorial documents

MODYLAS: Compilation

Go to untar-zipped source folder

```
>cd MODYLAS_1.0.3/source/
```

Set compilation environment

```
>./configure --with-kind-fortran-compiler=FC
```

Compilation

```
>make
```

```
./src/modylas
```

will be created.

FC=(K FX10 INTEL PGI)

K	: K computer
FX10	: FX10
INTEL	: Intel compiler
PGI	: PGI compiler

MODYLAS: I/O structure

.bin : binary files

A set of input files for
MODYLAS

Calculation
condition file

aaa.mddef

Coordinate file

aaa.mdxyz

Force field file

aaa.mdff

MODYLAS

aaa: sessionname

common among all I/O files

Execution information
stdout

Monitoring file

aaa.mdmnr

File for restart

aaa.restart.bin, or

aaa.restart.asc

File for analysis

aaa.mdtrj.bin, or

aaa.dcd

Run time information

aaa.mdrun

MODYLAS: Execution

Execution style:

```
./modylas sessionname
```

Go to the folder where a set of input files exists

```
>cd water/
```

Link executable binary to current directory

```
>ln -s ../../source/src/modylas ./
```

Parallel execution (ex. 8 mpi x 1 omp)

```
>export OMP_NUM_THREADS=1
```

```
>mpirun -np 8 ./modylas water
```

MODYLAS の実行制限

公開版 **MODYLAS_1.0.4** (6th, Jul. 2015) における実行制限

✓立方体の基本セル

✓周期境界条件

✓MPI & OpenMP ハイブリッド並列

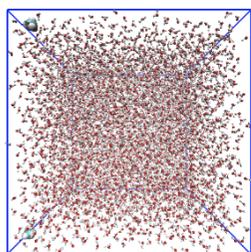
MPIプロセス数: 2^n ($0 \leq n$)

OMP スレッド数: 任意

✓各軸ごとセル分割数 = 2^k
(等方的, かつ $3 \leq k \leq 6$)

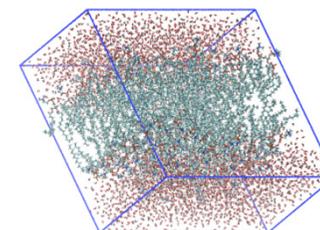
✓分割されたサブセルー辺長 $> 0.5 \cdot \text{LJ}$ カットオフ半径

$L/n_{\text{cell}} > 0.5 \cdot \text{cutoff}$



直方体の
基本セル

平行六面体
の基本セル



$2^n \cdot 3^m$ ($0 \leq n, 0 \leq m$)

$2^k \cdot 3^l$ (異方的分割)

今回拡張した機能

Tutorial : Equilibration of bulk water

Execute sample shell

```
#!/bin/sh
#PBS -l nodes=1:ppn=8                8procs x 1thread
#PBS -q small
#PBS -N wat_opt-nvt-npt
#PBS -j oe
source /opt/MateriApps/modylas/modylasvars-1.0.3-1.sh
```

```
export OMP_NUM_THREADS=1
export PARALLEL=1
cd $PBS_O_WORKDIR
```

optimization

```
mpiexec -np $PBS_NP modylas water_opt
```

NVT ensemble
5,000 steps

```
cp water.mddef_for_nvt      water_nvt.mddef
ln -s water_opt.mdff        water_nvt.mdff
ln -s water_opt.restart.bin  water_nvt.mdxyz.bin
mpiexec -np $PBS_NP modylas water_nvt
```

NPT ensemble
10,000 steps

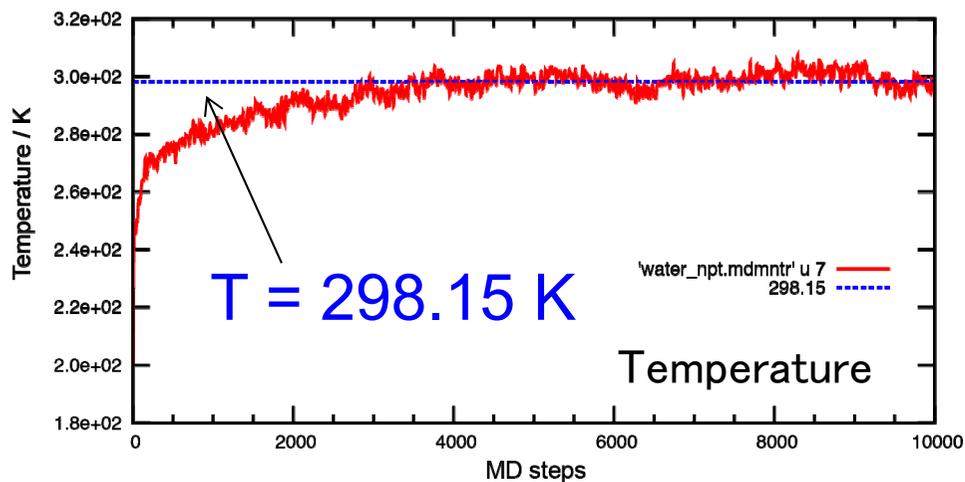
```
cp water.mddef_for_npt     water_npt.mddef
ln -s water_opt.mdff        water_npt.mdff
ln -s water_nvt.restart.bin water_npt.mdxyz.bin
mpiexec -np $PBS_NP modylas water_npt
```

Tutorial : Equilibration of bulk water

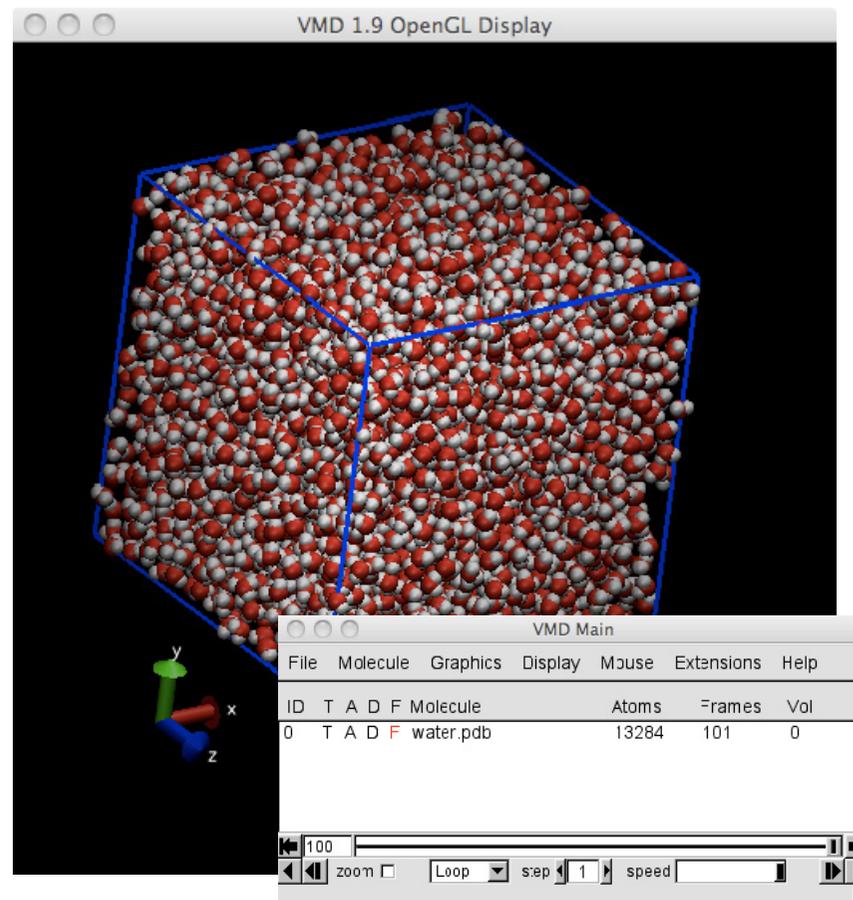
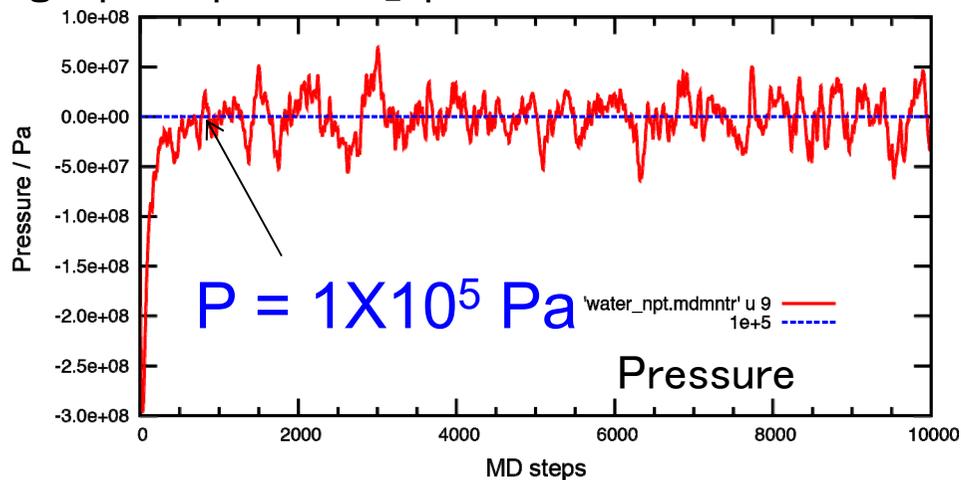
View result

NPT ensemble
10,000 steps

```
gnuplot> p 'water_npt.mdmntr' u 7
```



```
gnuplot> p 'water_npt.mdmntr' u 9
```



```
>vmd water.pdb water_npt.dcd
```

```
Tk console> pbc box -center origin
```

Visualization of MD calculation results

Newly supported from modylas_1.0.3

sessionname.dcd Trajectory file in dcd format (binary)

.dcd file is widely used in biophysical MD calculations. Other MD software (CHARMM, NAMD, etc.), and input generator software (VMD) support reading/outputting .dcd file.

Q. How to output dcd file from modylas?

A. Add following two lines in .mddef

```
<output>
```

```
  dcd=yes      * default : no
```

```
  <trjdcd> start=0 interval=100 </trjdcd>
```

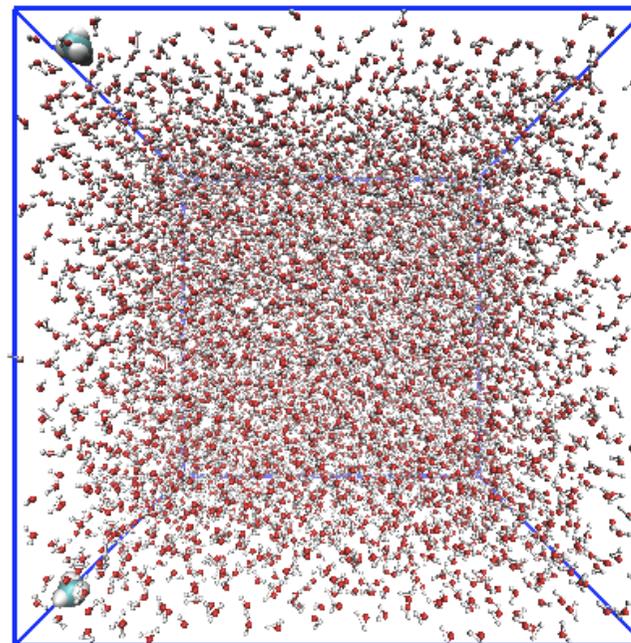
```
</output>
```

Visualization of trajectory using VMD:

Required files

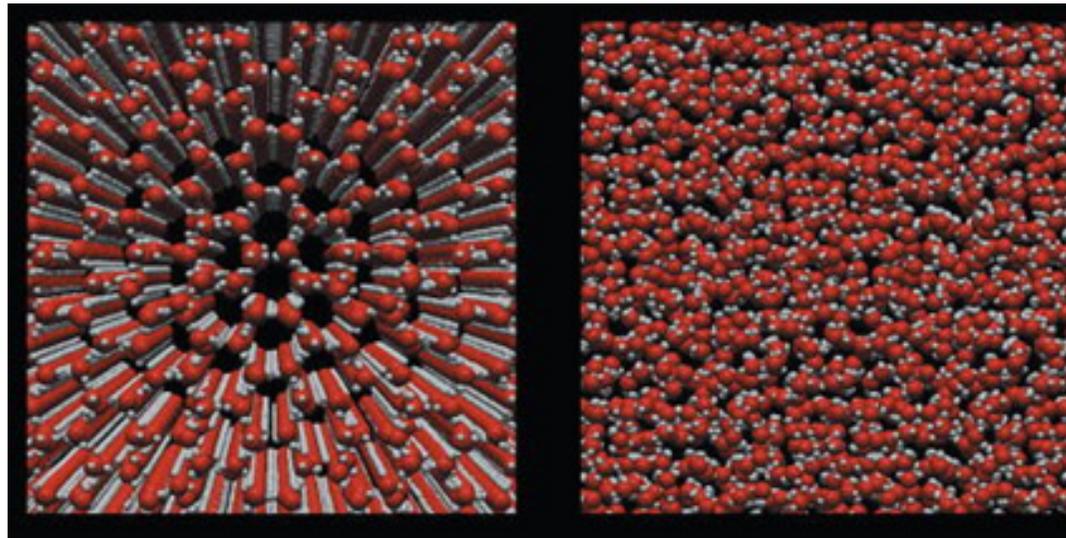
- .dcd file
- .pdb file
- .psf file for analysis (optional)

```
>vmd system.pdb result.dcd
```

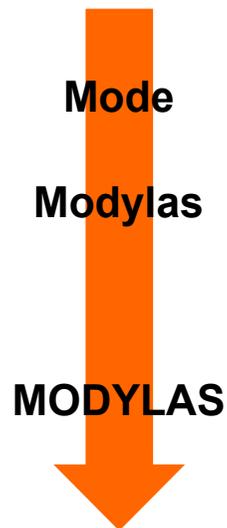


計算例 水、氷の大規模MD (2005)

- 約100万原子系
- 液体の水相および氷Ih結晶相のMD
- 分子研に導入されたスパコンのデモ
- MD計算は数万ステップのみ
- 100万原子系の可視化に苦勞



開発の経緯



Start parallelization tuning in “NAREGI” project

Parallelization tuning optimized to K computer in
“Nano Grand Challenge” project

Publication: Y.Andoh et al., J. Chem. Theory Comp., **9**, 3201 (2013).

Binary code of modylas was opened at www.modylas.org (Sep. 2013)

Source code of modylas has been opened (Apr. 2014)

Newest version is 1.0.3 (updated at 27, Jan. 2015)

プロジェクトに育てられたMODYLAS

- NAREGIプロジェクト
自前で汎用プログラムを作ろう！（2004年秋）
（自前コードがないと、開発した手法のテスト、最先端の手法の導入
といった方法論に関する
研究ができない。）
開発方針：多少遅くてもよい、高精度の計算ができなければならない。
まずは自分たちの研究用として利用。
数ノードで並列化MPI+SMP（富士通SR8000）、数万原子系に対応。
⇒ループ分割、簡単。

スパコンを占有した研究のための実証計算。
分子研SR11000（2005年正月）
⇒両親媒性分子集合体の熱力学的安定性についての
自由エネルギー計算。

ウイルス系（1000万原子）への挑戦
⇒高速多重極展開法（FMM）実装（2007年春）。

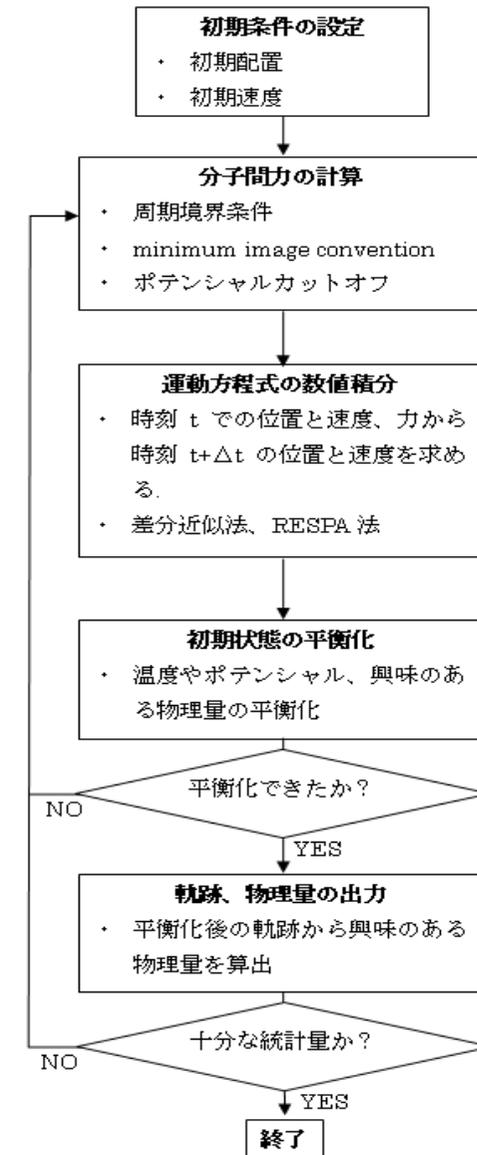
プロジェクトに育てられたMODYLAS

- Nano Grand Challenge プロジェクト
領域分割化。
並列化を考慮した変数の取り直し。プログラムの書き直し。
高並列化へと歩み出す。
開発方針: 領域分割化し、高並列に対応。
- 京プロジェクト
変数のコピーレス化、変数を通信用、演算用に分けない。
TOFUによる隣接通信の活用。
SIMDの活用、オンキャッシュ化
開発方針: 1000万原子系を1MDステップ10ms以下に。(実際には5msにまで高速化)
ソフト公開、ソースコード公開。
ミニアプリ化。
- ポスト京
プロジェクトの要求、マシンの仕様に合わせて最適化してきた。
将来のユーザーのニーズ、マシンのアーキテクチャーを見据えながら、時代に合ったソフトウェア開発を進めなければならない。

MODYLASの構成

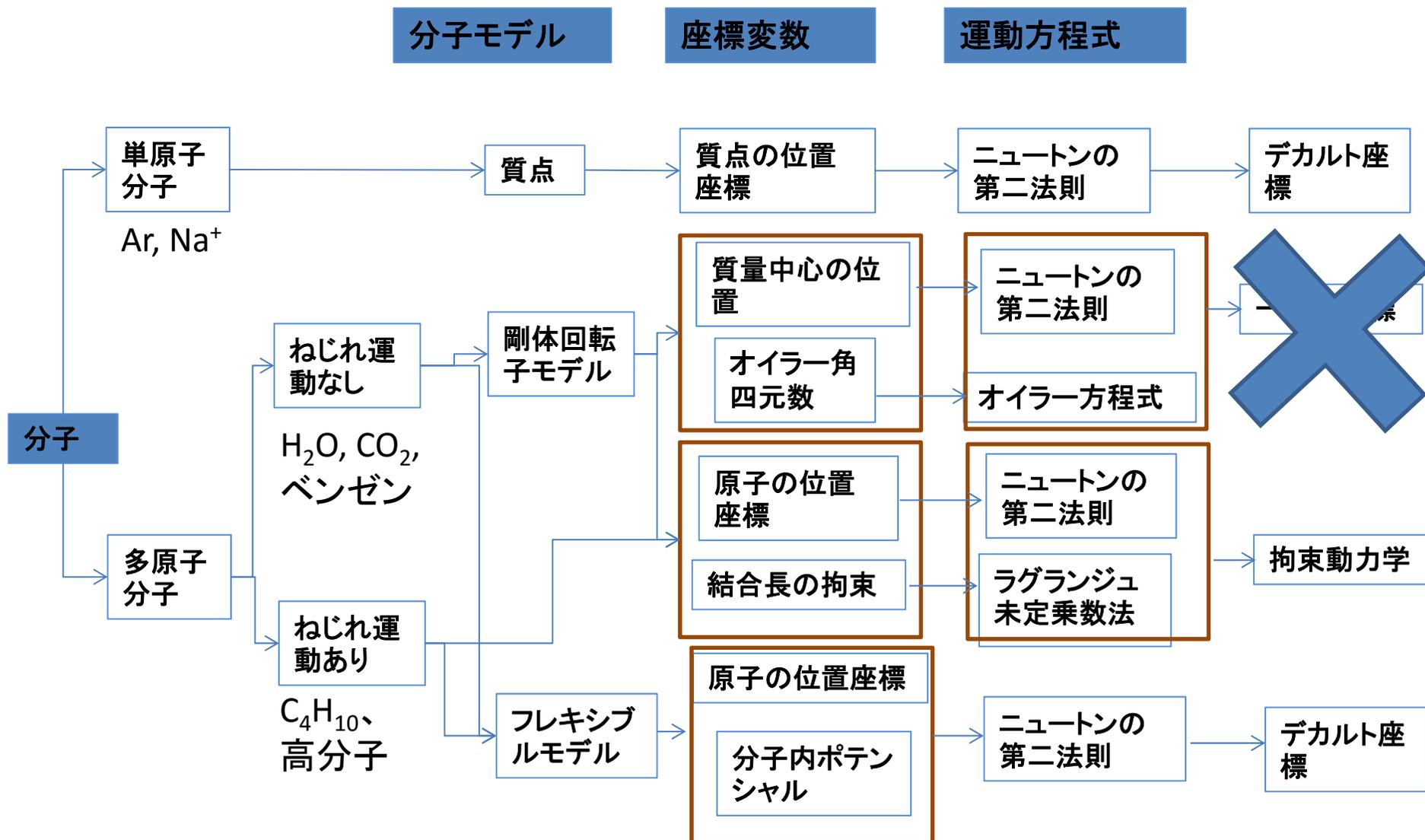
- 初期配置、計算条件の入力
入力データ(座標、速度、計算条件)
- 分子間力の計算
LJ、クーロン相互作用(高速多重極展開法(FMM))
分子内相互作用(伸縮、変角、torsion, etc.)
周期境界条件
- 運動方程式の数値積分
速度ベルレ、時間発展演算子法
温度一定 (能勢-Hooverchain法)
圧力一定 (等方セル揺らぎ、Andersen法)
距離や速度の拘束(SHAKE/RATTLE/ROLL法,
p-SHAKE法)
- 出力
各ステップの熱力学量(温度、圧力、
ポテンシャルエネルギー等)
トラジェクトリ(座標、速度、力)
リスタートデータ(座標、速度)
計算時間の情報

計算フロー



MODYLASの構成

分子モデルと運動方程式



MODYLASの構成

周期境界条件

・原子数

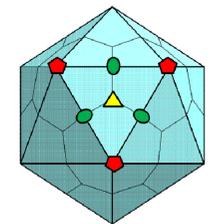
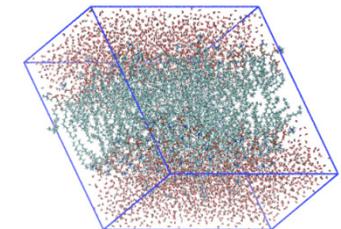
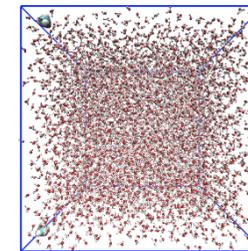
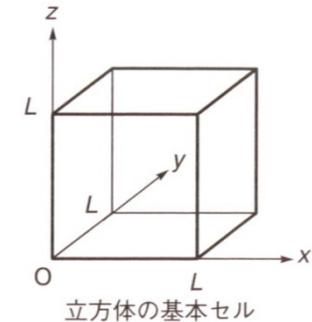
数百~数千万原子(長距離相互作用)

単純液体、水、水溶液系(~数万)

ミセル、脂質膜、タンパク質水溶液(数万から数十万)

高分子(数十万~数百万)

ベシクル、ウイルス(数百万~数千万)



・基本セル

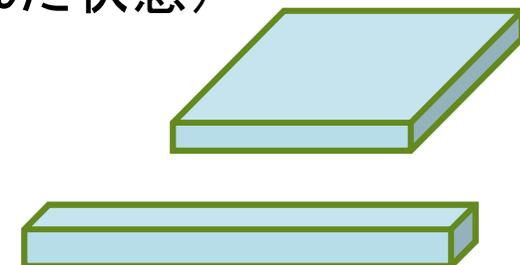
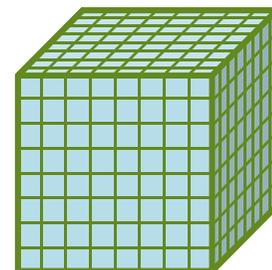
立方体、直方体、平行六面体 (周期境界条件)

(正二十面体対称性周期境界条件も可)

今後、3次元のみでなく、2, 1次元方向にイメージセル配置へ

(2次元: 界面、平面膜、2枚の平板にはさまれた状態)

(1次元: 細孔、棒状分子)



MODYLASの構成

相互作用(力)

- 分子間相互作用(力)

2体力の和

$$V_{\text{intermolecule}}(\mathbf{r}^N) = \sum_{i > j} V(r_{ij})$$

Lennard-Jones(LJ)相互作用

$$V_{\text{LJ}}(r) = 4\epsilon \left\{ \left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right\}$$

クーロン相互作用

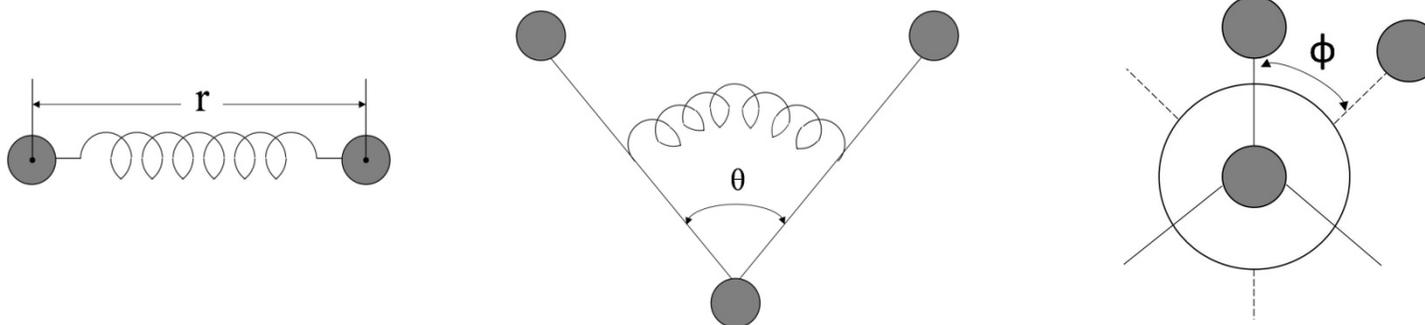
$$V_{\text{Coulomb}}(r) = \frac{q_1 q_2}{r}$$

- 分子内相互作用(力)

分子内の原子を剛体的に取り扱わず、フレキシブルに運動できるとする。(フレキシブルモデル)
分子内ポテンシャルを伸縮、変角、torsionなどで表現する。

$$V_{\text{intramolecule}} = V_{\text{st}} + V_{\text{be}} + V_{\text{tor}}$$

$$= \sum k^{\text{st}} (r - r_0)^2 + \sum k^{\text{be}} (\theta - \theta_0)^2 + \sum_n \frac{1}{2} k_n^{\text{tor}} \{1 + \cos(n\phi - \phi_0)\}$$



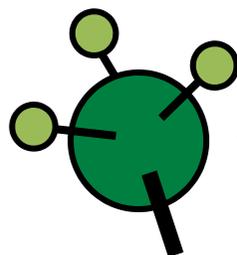
分子間相互作用の精度がMD計算の質を決める

MODYLASの構成

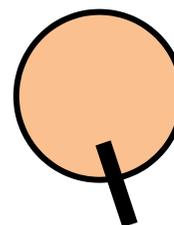
汎用ポテンシャル

	開発者	ソフト名	Type
			MODYLAS_1.0.3
CHARMM	M. Karplus, A.D. Mackerell Jr., J. Klauda	CHARMM	All-atom
GROMOS	H.J.C. Berendsen, W.F. van Gunsteren	GROMACS	United-atom
AMBER/ OPLS	P.A. Kollman, W.L. Jorgensen	AMBER	All/United- atom

ex) methyl group
-CH₃



All-atom



United-atom

高速多重極展開法 (FMM)

L.F. Greengard (1987)

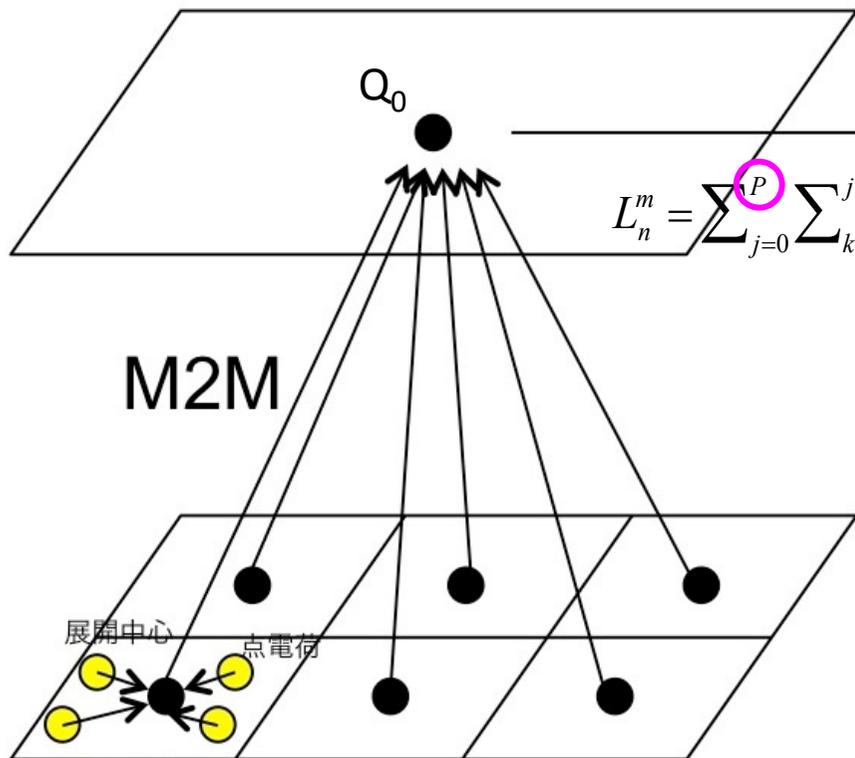
$$M_n^m \sum_{\nu \neq 0} R_n^m(r_\nu, \theta_\nu, \varphi_\nu) \quad \text{F. Figueirido (1997)}$$

$$= M_n^m \left\{ \sum_{\nu \neq 0} \frac{Y_n^m(\theta_\nu, \varphi_\nu) \Gamma(n + 1/2, \kappa^2 r_\nu^2)}{\Gamma(n + 1/2) r_\nu^{n+1}} + \sum_{h \neq 0} \frac{i^n \pi^{n-1/2} Y_n^m(\theta_h, \varphi_h) v_h^{n-2} \exp(-\pi^2 v_h^2 / \kappa^2)}{\Gamma(n + 1/2) V} \right\}$$

最上層での多極子Ewald法

M2L

$$L_n^m = \sum_{j=0}^P \sum_{k=-j}^j \frac{J_m^k M_j^k A_j^k A_n^m Y_{n+j}^{k-m}(\alpha, \beta)}{A_{n+j}^{k-m} \rho^{n+j+1}}$$



M2M

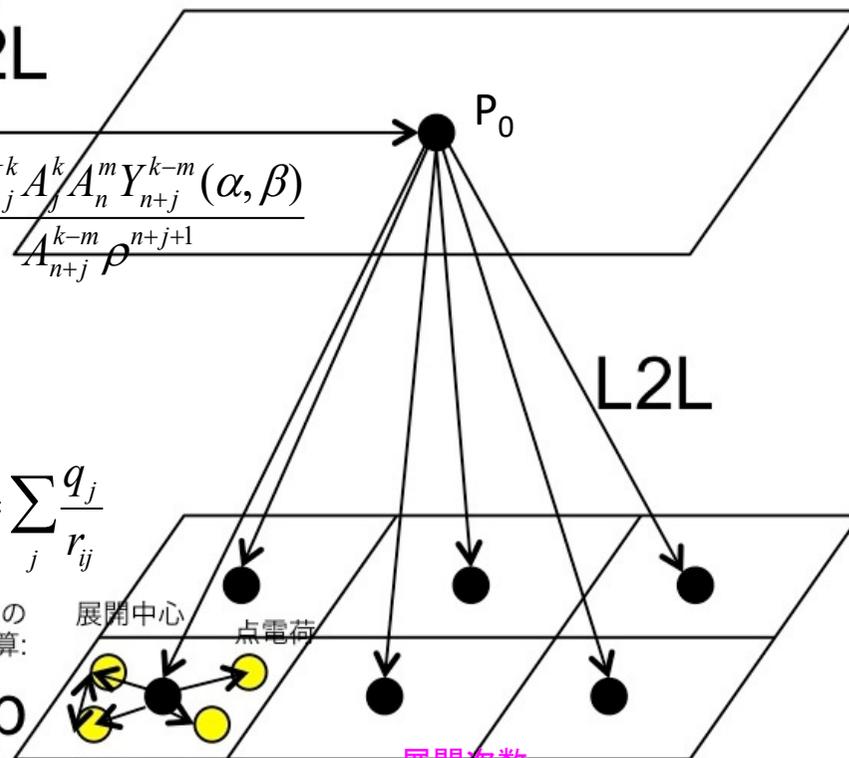
多極子展開

$$p2M \quad M_n^m = \sum_i^P q_i \rho_i Y_n^{-m}(\alpha_i, \beta_i)$$

$$\Phi_{\text{near}} = \sum_j \frac{q_j}{r_{ij}}$$

近傍との
粒子対計算:

p2p



L2L

局所展開

$$L2p \quad \Phi_{\text{far}} = \sum_{n=0}^P \sum_{m=-n}^n L_n^m Y_n^m(\theta, \phi) r^n$$

展開次数

p2M : 点電荷の多極子展開

M2M : 多極子のマージ

M2L : 多極子の局所展開

L2L : 局所展開中心の移動

L2p : 点電荷上の電場の評価

p2p : 粒子対計算

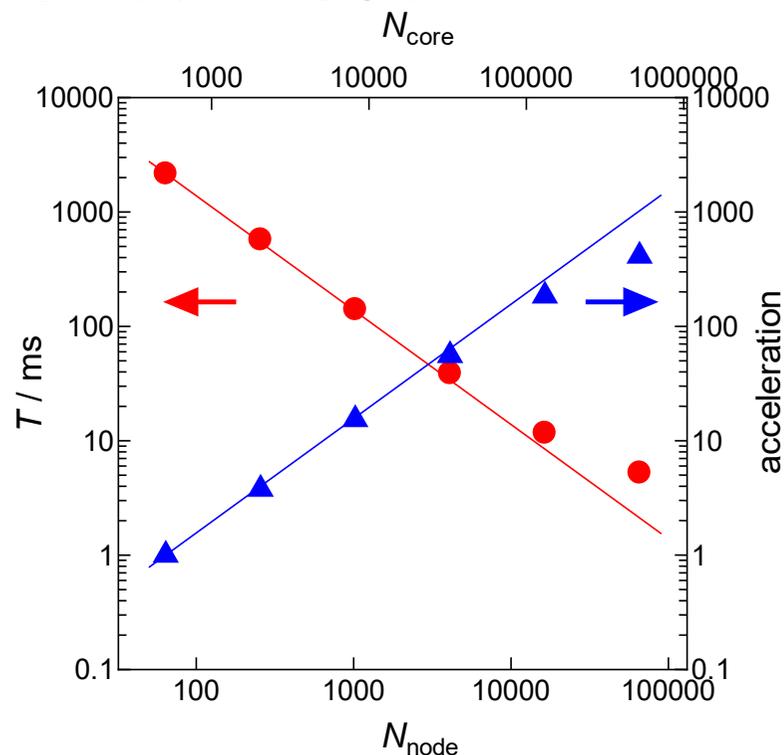
M2LでのWell-separated 条件: $|Q_0 - P_0| > 3a$

件: $|Q_0 - P_0| > 3a$

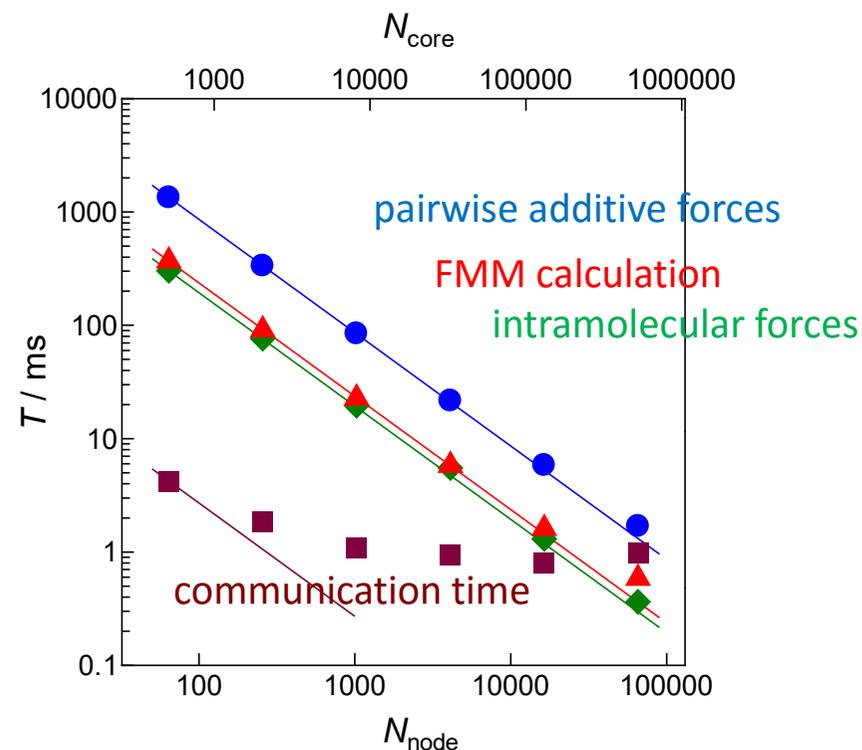
a : 多極子展開, 局所展開半径

ベンチマークテスト

PYP 水溶液、1000万原子系



The measured overall calculation time per one MD step (Dt) for the 10-million atomistic system, the PYP solution, and the acceleration ratio with respect to the 64-nodes calculation as a function of degree of parallelism, N_{node} .



The measured direct calculation time of the pairwise additive forces (circle), the FMM calculation (triangle), the intramolecular forces (diamond), and the communication time (brown) per one MD step (Dt) for the 10-million atomistic system, the PYP solution, as a function of degree of parallelism, N_{node} .

構成

MODYLAS

行数 約55000

サブルーチン数 約730

function 44

ダウンロード数 180(うち海外18)

ダウンロード数
(MODYLAS-MINI) 19(9)

ミニアプリ: 従来のものは短距離相互作用のみ

ゴードンベルに向けてのベンチマーク

- 京全ノードを利用したソフトの性能測定
(2012/3/23-28@京コンピュータ、5本のアプリ)
- 持ち時間“24時間”
- ラウンドロビン、MDが1ステップも流れない！！
- どこかでメモリが爆発！！
- 配列のチェック、共同開発者に相談。
- 通りがかった救い主。
- ことの顛末。

まとめ

- MODYLASの概要
- MDソフトの現状
- MODYLAS実行のイメージ
- 開発の経緯
- ソフトウェアの構成
- ソフトウェアの使用例

次回(1月14日)

- 開発体制
- 公開
- 普及、ユーザーサポート
- 今後の取組