

# MODYLASと古典MD②

CMSI計算科学技術特論C

2016年1月14日

名古屋大学大学院工学研究科

吉井範行

# MODYLASと古典MD②

---

- 開発体制
- 公開
- 普及、ユーザーサポート
- 今後の取組

計算例

ウイルスカプシドの全原子MD計算

ミセルの会合

# 開発の経緯

- 2004年 当時分子研にあった岡崎進先生のグループにて、岩橋建輔氏、吉井の2名で開発開始。  
各種アンサンブル数値積分、相互作用計算、I/O周りを作成  
シングルコアで走る汎用のMDプログラムを作成
- 2005年 熱力学的積分法による自由エネルギー計算を実装。  
グループ内の汎用プログラムとして利用開始。  
FMM実装
- 2006年 安藤嘉倫氏合流。  
入出力ソフトNANO Ignition作成  
ポテンシャルの拡張(OPLS対応:山田氏)  
MODYLAS命名  
領域分割化、MPI並列化(橋本氏、樋口氏(日立))
- 2007年 京スパコンでの実行に向け整備開始  
ハイブリッド並列化(市川氏、小松氏、石附氏、福島氏(富士通))
- 2011年 京にて試用開始
- 2012年 京にて本計算に利用
- 2013年 MODYLAS公開(9月24日)



# 開発体制



[名古屋大学]

**安藤嘉倫**

**吉井範行**

山田篤志

藤本和士

小嶋秀和

水谷圭佑

**岡崎 進**

[分子科学研究所]

**岩橋建輔**

水谷文保

[金沢大学]

川口一朋

長尾秀美

[富士通]

市川真一

小松秀美

石附 茂

武田康宏

福島正雄

**FUJITSU**



[理研 AICS]

南一生



# 開発体制

---

プロジェクトとつながったソフトなので開発期限がある。

開発者が少ない。(開発当初2名)

開発者が並行してサイエンス研究も行っている。

- 部分的に外注を実施

定式化や原型プログラムの作成は自前で

領域分割化

MPI並列、ハイブリッド並列化、高速化とチューニング

性能評価

日立

富士通

# 外注の流れ

## 事前打ち合わせ

- ・ 依頼内容について相談。

## プログラム引き渡し

- ・ 守秘義務等の契約を交わし、プログラムを渡す。プログラムの説明。

## 発注

- ・ 発注内容決定。仕様書作成。  
データ構造、データ処理～デバッグ、テストラン、品質保証まで

## プログラム作成

- ・ 部品ごとの実装、テストラン、性能評価。
- ・ こまめに打ち合わせ、進捗の確認。分子研や京に常駐して、随時やりとりしながら開発した時期もあり
- ・ 発注元・請負先全体打ち合わせは1, 2か月ごとに実施。

## 納品

- ・ 全体が完成。作業報告書。

## アフターケア

- ・ 納品後のバグ対応。
  - ・ 業者、担当者によって得手不得手あり。
  - ・ 開発経験があれば速くて確か。
  - ・ そうでないと発注元もかなりの労を取られることも。

# プログラム開発の外注

	期間	依頼事項	人数
日立製作所	2005-2007 (断続的)	領域分割 MPI並列化	1~2名 (物理系、ソリューション 事業部、SE)
富士通	2007-2013 (断続的)	ハイブリッド並列化 TOFU用通信	2~4名 (物理、情報系)

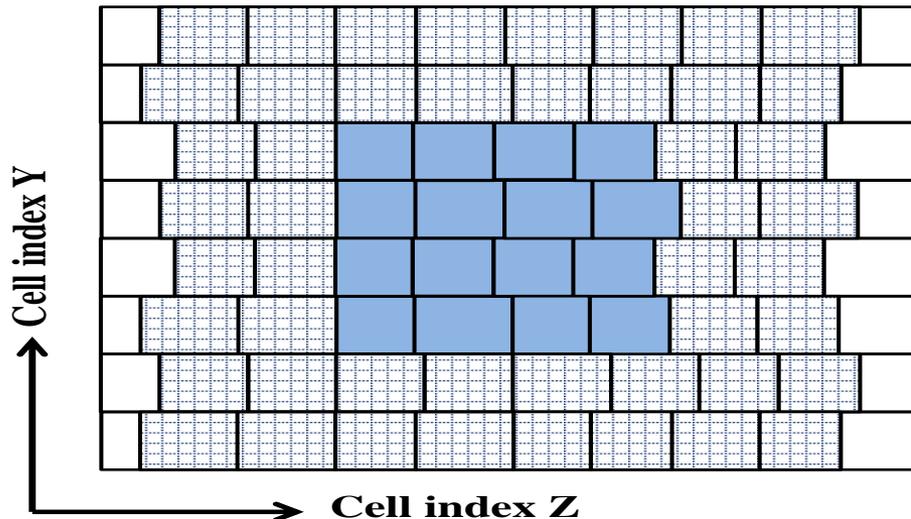
データ構造の設計	並列化・高速化
データ処理の設計	説明書作成
プログラムの実装	テストラン
プログラムのデバッグ	論文化

# データ構造

# メタデータ法

## 原子のデータ構造

- 原子座標、速度、力、セグメントデータ → メタデータ化
- プロセスに属するサブセルを割り当てて固定（図では4×4のサブセルを1つのプロセスに割り当て）
- サブセル内の原子のデータをプロセスに局在化させる。グローバルに持たない→省メモリ。
- データ領域に空きを用意 → サブセル内の原子数の増減に対応。各サブセル内の原子数に合わせて要素数が変化。要素数情報もあわせて保持。
- メタデータ配列のまま演算も通信も行う。サブセルを表す3次元配列を持っているので、取り扱いが容易
- バッファリングやindirect accessがない。
- サブセル単位のメタデータがキャッシュに載るようにサブセル内の原子数を調整。
- 原子の運動に伴って原子の帰属するサブセルを更新。



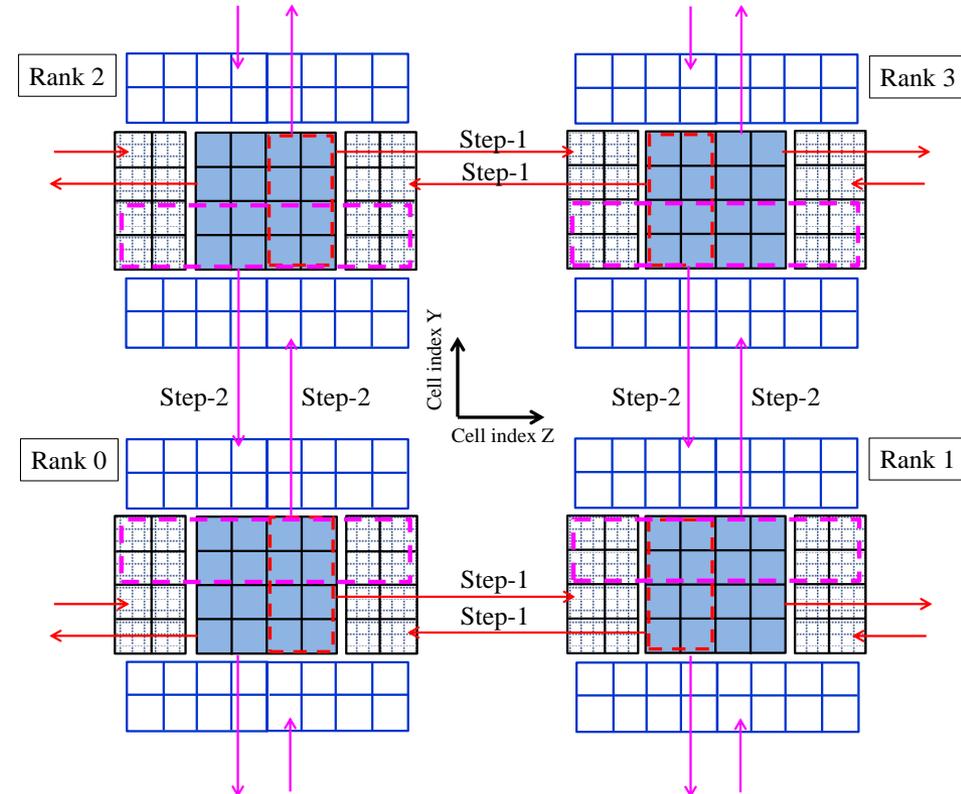
・セグメントデータ  
一塊の原子団のデータ  
CH<sub>3</sub>、H<sub>2</sub>Oなど。  
原子間距離拘束の情報

# 通信量の最小化

# 原子情報

自セルと相互作用する原子情報を集める。

- 通信回数と通信量の最小化
- 隣接セルと通信して1次元(z軸)方向にデータを結合し棒状のデータを作る。
- 棒状データをy軸方向に通信し結合させて、平面状データにする。
- x軸方向に平面状データを通信し結合させて、立方体状のデータにする。
- Kースパコンの多重同時通信(各軸ごとに+、-方向)



# データ処理 データ局在化による計算効率の向上

キャッシュの利用効率の向上

- L1キャッシューL2キャッシューメモリ
- L2ーメモリ間、L1ーL2間のデータ通信の最小化

最重要ホットスポット

- 2体間相互作用計算
- FMMのM2L計算

2体間相互作用計算

- 3重ループ構造

do 5つのサブセルを指定するインデックス

do 注目する1つのサブセル内の粒子

do 隣接する5つのサブセル内の原子

相互作用計算

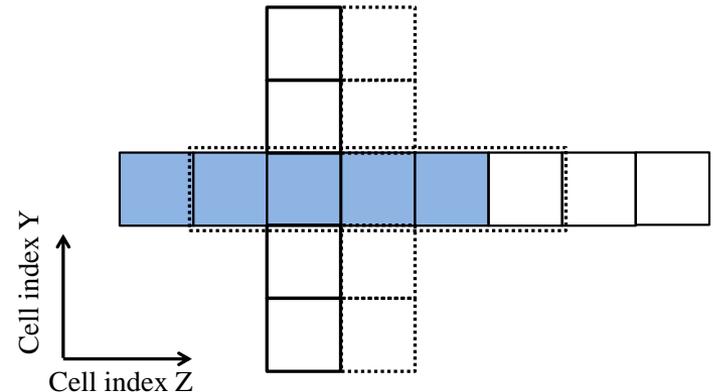
enddo

enddo

enddo

- これにより、5つのサブセルのデータが効率的に再利用される。

- ただし5つのサブセルの座標データをL1キャッシュに載せておくことが重要



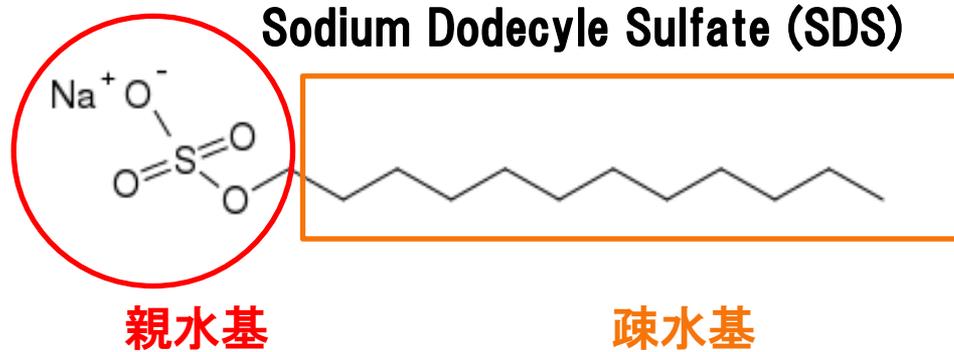
# 外注に頼る事情

---

- プログラム開発自体は論文業績にならない。学生、ポスドクには酷。
- サイエンス研究の片手間にしては負担が大きい。
- 並列化、高速化のスキルを持っていない。興味がない。
- プロジェクトの予算がある。

# 計算例 ミセルの会合 (2012)

界面活性剤……親水基と疎水基の両方をあわせ持つ分子



非イオン性界面活性剤 $C_{12}E_8$ とイオン性界面活性剤SDSの会合シミュレーションを実行

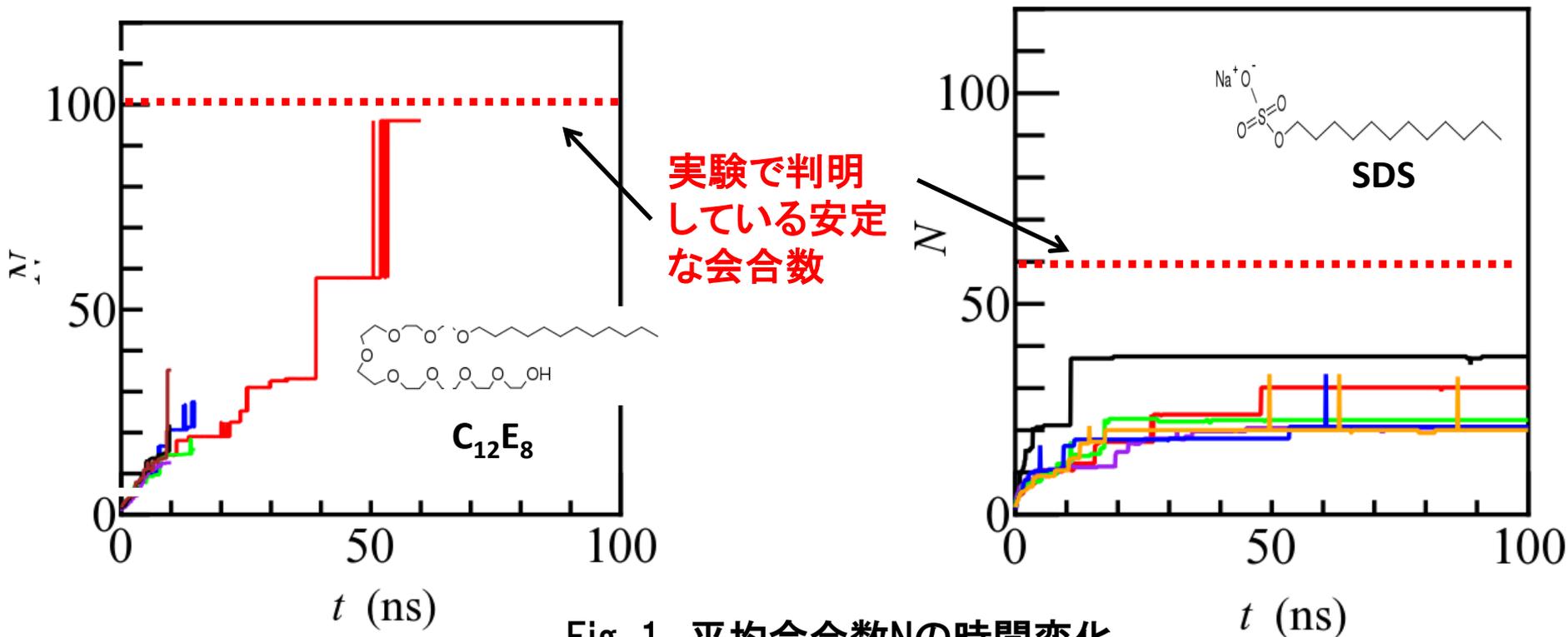
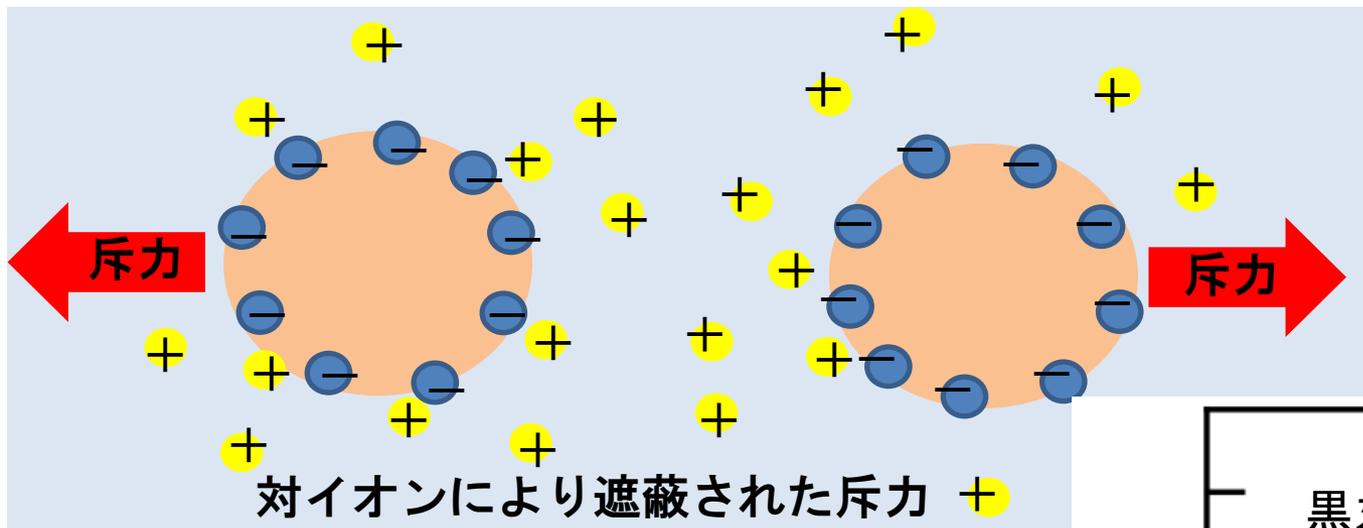


Fig. 1 平均会合数 $N$ の時間変化

$C_{12}E_8$     **➡**    50ns程度で安定な会合数のミセルを形成する

SDS    **➡**    10 ns程度で会合数20~30程度の会合体までは生成するが、その後100 nsかけてもそれらが融合して安定な会合体を形成しない。

# 結果4 理論との比較



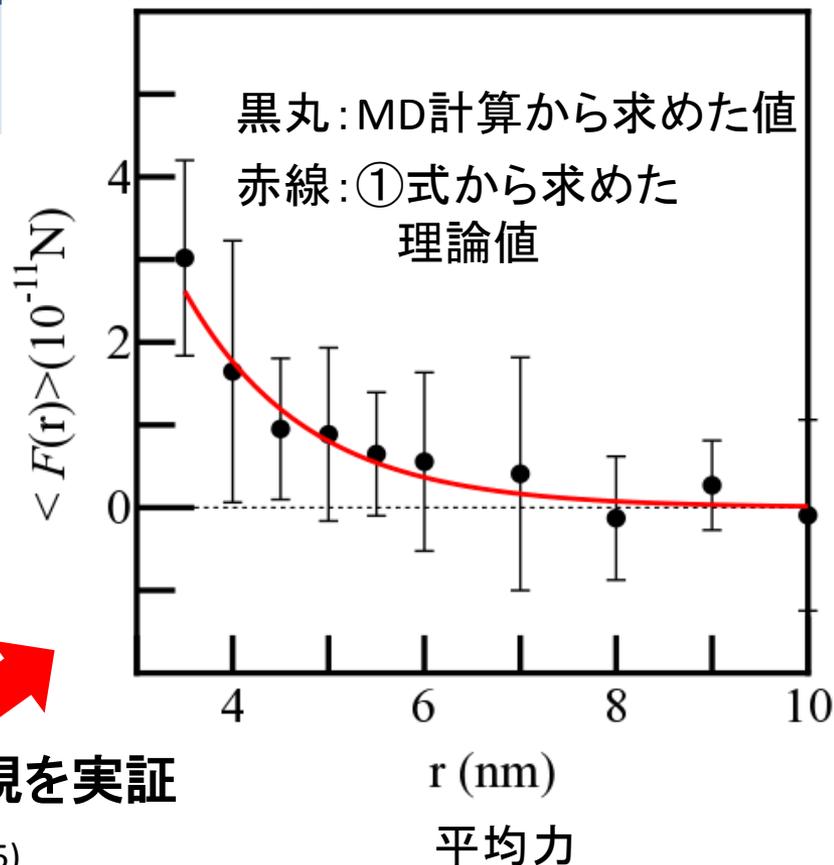
電気二重層を持つ会合体の静電斥力<sup>1</sup>

$$F(r) = \left(\frac{a}{2}\right) \kappa Z \exp\{-\kappa(r - 2a)\} \dots \textcircled{1}$$

$\kappa$  : デバイ長の逆数

$a$  : 会合体の半径

$Z$  : 相互作用定数



表面電荷密度に由来

電気二重層モデルで再現を実証

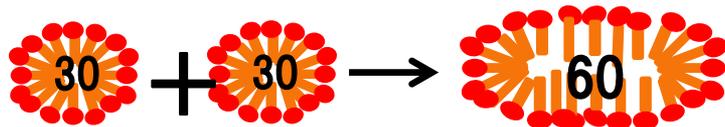
# 結果5 会合の速度定数

障壁を超えて融合する際の速度定数を考察

二段階のプロセス

- ① 斥力を受けながらも、熱ゆらぎの中で徐々に接近し融合するプロセス
- ② 混ざりあいながら全体を球に変形させるプロセス

反応①が律速段階である



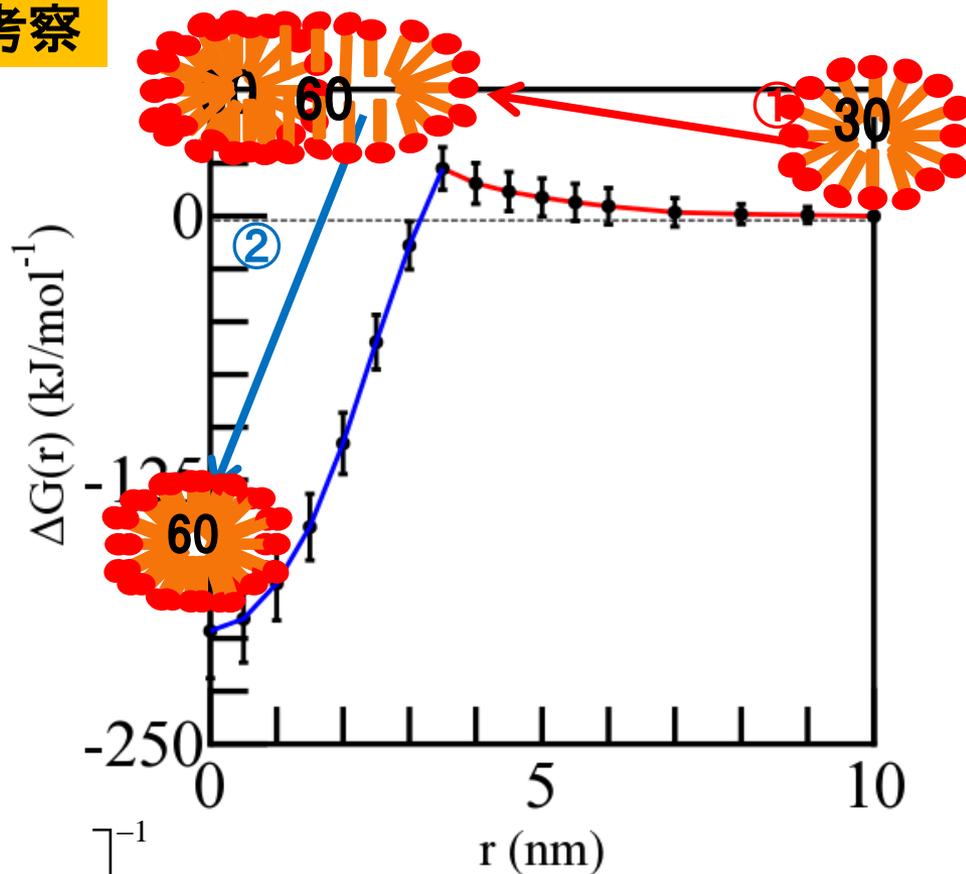
反応速度式: 
$$\frac{d}{dt} [N_{60}] = k [N_{30}]^2$$

$$k = D \left[ \int_{3.5\text{nm}}^{10\text{nm}} \frac{B \left( \frac{r-2a}{a} \right)}{4\pi r^2} \exp \left\{ \frac{\Delta G(r-2a)}{k_B T} \right\} dr \right]^{-1}$$

D: 拡散係数, a: 半径 B: 流体抵抗

代入すると

$$k = 5.2 \times 10^{-21} \text{ m}^3\text{s}^{-1}$$



40 CMCでは一つのミセルが生成するのに28  $\mu\text{s}$  要する

# MODYLASの公開

web site

MODYLAS  
MOlecular DYnamics software for LArge System

HOME OVERVIEW DOWNLOAD DOCUMENTATION RELEASE NOTES FORUMS LITERATURE DEVELOPERS CONTACT LINKS

[MODYLAS 1.0.4 was released.](#)  
**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 [read more](#)

[Tutorial Slide has been uploaded.](#)  
MODYLAS Tutorial Slide (30-Jun. 2015)(PDF) (English)  
Posted By yendo [read more](#)

[MODYLAS 1.0.3 was released.](#)  
**MODYLAS 1.0.3 was released on 26 Jan. 2015.**  
Subroutines for thermodynamic integration (TI) were implemented.  
Posted By yendo

[MODYLAS 1.0.2 was released.](#)

2013年 MODYLAS公開(9月24日)

USER LOGIN

USERNAME \*

PASSWORD \*

[Create new account](#)  
[Request new password](#)

[Slide Up](#)

オフィシャルサイト: <http://www.modylas.org/>

# MODYLASの公開

---

- Update to version 1.0.4 on 6 Jul. 2015:
- Correction of bug which caused slowdown of the program execution (ver.1.0.3 only): This bug occurred when interval of output of .dcd file or .mdtrj.bin file was not explicitly set in .mddef file by "interval" variable. Its default value is 1, thus unnecessary communications to gather trajectory for output were performed per MD step. (followed by small bug fix on 7 Jul. 2015).
- Update to version 1.0.3 on 27-Jan.2015:
- Implementation of subroutines for thermodynamic integration (compile with -DSEGSHAKE, see also sample/Met2)  
Support of MPI parallel execution with NPROCS less than 8 (compile with -DONEPROC\_AXIS)  
Support of **output of trajectory in dcd** format (add dcd=yes, and <trjdcd> tag in .mddef file, see also sample/Met2)
- Update to version 1.0.2 on 4-Nov.2014:
- Addition of **documents** in English  
Correction of **sample inputs**
- Update to version 1.0.1 on 26-Aug.2014.
- Update MODYLAS 1.0.0 **Reference Manual** on 15-Apr. 2014.
- New release MODYLAS 1.0.0 on 1-Apr. 2014.
- **New release MODYLAS 0.9.0-beta on 24-Sep. 2013.**

# ドキュメント

---

- MODYLAS Tutorial Slide [[English](#)] (30-Jun. 2015)
- MODYLAS 1.0.2 Reference Manual [[English](#) / [Japanese](#)] (4-Nov. 2014)
- MODYLAS 1.0.2 Tutorial [[English](#) / [Japanese](#)] (4-Nov. 2014)
- MODYLAS 1.0.0 Reference Manual\_v2 [[Japanese](#)] (15-Apr. 2014)
- MODYLAS 1.0.0 Tutorial [[Japanese](#)] (1-Apr 2014)

# License

- ・ユーザー登録性
- ・ソース、バイナリーの再配布禁止
- ・文献の引用  
[J. Chem. Theory Comp., 9, 3201–3209 (2013)]
- ・許可なくベンチマーク結果の出版を禁止
- ・改良したソースコードのフィードバック義務

詳細はダウンロードファイル内に記載 ([www.modylas.org](http://www.modylas.org))  
日本語によるライセンスあり.

The screenshot shows the MODYLAS website interface. At the top, the logo 'MODYLAS' is displayed in large white letters, with the tagline 'MOlecular DYnamics software for LArge System' below it. A navigation bar 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)'. Below the title, the text reads: '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.' The section 'Article 1 (Definition)' is also visible, with the first item starting: '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.'

# MODYLASのダウンロード数

---

MODYLAS本体

180 (18)

→国内からは162

MODYLAS-MINI (理研のミニアプリ)

19 (9)

( )内は国外からのDL数

既存のMDのミニアプリは短距離MDのものが多く  
長距離MDは少ない  
→スパコンの性能用に関心

## Anton 2: raising the bar for performance and programmability in a special-purpose molecular dynamics supercomputer

DE Shaw, JP Grossman, JA Bank, B Batson... - Proceedings of the ..., 2014 - dl.acm.org  
Abstract Anton 2 is a second-generation special-purpose supercomputer for molecular dynamics simulations that achieves significant gains in performance, programmability, and capacity compared to its predecessor, Anton 1. The architecture of Anton 2 is tailored for ...  
引用元 16 関連記事 全 2 バージョン 引用 保存 その他

## All-atom molecular dynamics calculation study of entire poliovirus empty capsids in solution

Y Andoh, N Yoshii, A Yamada, K Fujimoto... - The Journal of ..., 2014 - scitation.aip.org  
Small viruses that belong, for example, to the Picornaviridae, such as poliovirus and foot-and-mouth disease virus, consist simply of capsid proteins and a single-stranded RNA (ssRNA) genome. The capsids are quite stable in solution to protect the genome from the ...  
引用元 6 関連記事 全 7 バージョン Web of Science: 4 引用 保存済み

## Effect of bubble formation on the dissociation of methane hydrate in water: A molecular dynamics study

T Yagasaki, M Matsumoto, Y Andoh... - The Journal of ..., 2014 - ACS Publications  
We investigate the dissociation of methane hydrate in liquid water using molecular dynamics simulations. As dissociation of the hydrate proceeds, methane molecules are released into the aqueous phase and eventually they form bubbles. It is shown that this bubble ...  
引用元 8 関連記事 全 4 バージョン Web of Science: 5 引用 保存済み

## Midpoint cell method for hybrid (MPI+ OpenMP) parallelization of molecular dynamics simulations

J Jung, T Mori, Y Sugita - Journal of computational chemistry, 2014 - Wiley Online Library  
Molecular dynamics (MD) simulations have become a powerful tool to solve many-body problems in several research fields. In biological systems, in particular, conformational dynamics of biomolecules are simulated to investigate relationships between structure ...  
引用元 4 関連記事 全 4 バージョン Web of Science: 2 引用 保存

## Molecular dynamics study on the free energy profile for dissociation of ADP from N-terminal domain of Hsp90

K Kawaguchi, H Saito, S Okazaki, H Nagao - Chemical Physics Letters, 2013 - Elsevier  
Abstract The free energy profile for dissociation of ADP from Hsp90 was calculated as a function of the distance  $r$  between the centers of mass of Hsp90 and ADP by using molecular dynamics simulations and the thermodynamic integration method. The free energy profile ...  
引用元 4 関連記事 全 4 バージョン 引用 保存

## Including the Dispersion Attraction into Structure-Adapted Fast Multipole Expansions for MD Simulations

K Lorenzen, C Wichmann, P Tavan - Journal of Chemical Theory ..., 2014 - ACS Publications  
Molecular dynamics (MD) simulations of protein-solvent systems, which are modeled by polarizable or nonpolarizable all-atom force fields and are enclosed by periodic boundaries, require accurate and efficient algorithms for the computation of the long-range interactions ...  
引用元 4 関連記事 Web of Science: 3 引用 保存

## Filtering, reductions and synchronization in the anton 2 network

JP Grossman, B Towles, B Greskamp... - ... (IPDPS), 2015 IEEE ..., 2015 - ieeeexplore.ieee.org  
(MD) simulation require significant inter-node communication, but off-chip communication bandwidth is not scaling as quickly as on-chip logic density. We present three network features targeting this problem that have been implemented in Anton 2, a massively ...  
引用元 1 引用 保存 その他

## Third-order density-functional tight-binding combined with the fragment molecular orbital method

Y Nishimoto, DG Fedorov, S Irle - Chemical Physics Letters, 2015 - Elsevier  
Abstract We developed the energy and its analytic gradient for the self-consistent-charge density-functional tight-binding method with the third-order expansion (DFTB3) combined with the fragment molecular orbital (FMO) method, FMO-DFTB3. FMO-DFTB3 reproduced ...  
引用元 1 引用 保存

## An efficiently extendable and fine-grain parallelised molecular dynamics simulation program: Mid

T Koishi, H Takeichi - Molecular Simulation, 2014 - Taylor & Francis  
A new implementation of molecular dynamics simulation is presented. We employed policy-based design to achieve static polymorphism within our simulation programs. This technique provides flexibility and extensibility without additional if-statement branching in the ...  
関連記事 引用 保存 その他

## Convergence of Parareal Algorithm Applied on Molecular Dynamics Simulations

J Pazúriková, L Matyska - MEMICS 2014, 2014 - memics.cz  
Abstract. Parallel and distributed computations based on the spatial decomposition of the problem are beginning to fail to saturate large supercomputers with their limited strong scalability. An application of the high performance computing, a molecular dynamics ...  
関連記事 全 2 バージョン 引用 保存 その他

## Parallel implementation of 3D FFT with volumetric decomposition schemes for efficient molecular dynamics simulations

J Jung, C Kobayashi, T Imamura, Y Sugita - Computer Physics ..., 2015 - Elsevier  
Abstract Three-dimensional Fast Fourier Transform (3D FFT) plays an important role in a wide variety of computer simulations and data analyses, including molecular dynamics (MD) simulations. In this study, we develop hybrid (MPI+ OpenMP) parallelization schemes of ...  
引用 保存 その他

## Modeling a virus atom by atom

JL Miller - Physics Today, 2014 - adsabs.harvard.edu  
関連記事 全 4 バージョン 引用 保存

## Molecular dynamics study of changes in physico-chemical properties of DMPC lipid bilayers by addition of nonionic surfactant C12E10

Y Andoh, S Muraoka, S Okazaki - Molecular Simulation, 2014 - Taylor & Francis  
Changes in physico-chemical properties of dimyristoyl phosphatidylcholine (DMPC) lipid bilayers caused by the addition of 9.4 mol% nonionic surfactant decaoxyethylene monododecyl ethers (C12E10) have been investigated by molecular dynamics ...  
関連記事 引用 保存済み その他

## Multilevel summation method for electrostatic force evaluation

DJ Hardy, Z Wu, JC Phillips, JE Stone... - Journal of chemical ..., 2015 - ACS Publications  
The multilevel summation method (MSM) offers an efficient algorithm utilizing convolution for evaluating long-range forces arising in molecular dynamics simulations. Shifting the balance of computation and communication, MSM provides key advantages over the ubiquitous ...  
関連記事 全 3 バージョン 引用 保存

## Decomposition analysis of free energy profile for Hsp90-ADP association

K Kawaguchi, H Saito, H Nagao - Molecular Simulation, 2015 - Taylor & Francis  
Abstract The functional cycle of heat shock protein 90 (Hsp90) is driven and inhibited by the association/dissociation mechanism of the at:  
引用 保存 その他

## Etude structurale moléculaire.

A Gulenko - 2014 - t  
Résumé Ce travail a d'étudier en profond dynamique molécule  
関連記事 全 2 バ

## MODYLAS: A F

N Yoshii, Y Andoh, H  
Molecular dynamics as bioscience and rr calculation program  
関連記事 全 2 バ

## 細胞膜脂質組成を模倣した混合脂質二重層膜の分子動力学シミュレーション

安藤嘉倫 - アンサンブル, 2013 - jlc.jst.go.jp  
分子動力学 (MD) シミュレーションは、計算機能力の向上、全原子力場モデルの精巧化、および方法論の成熟によって、脂質二重層膜の物性を議論する上で不可欠な手法となっている。本研究ではマウス膵腺細胞およびその癌化細胞の細胞膜について両者の膜の物性の違いを ...  
関連記事 全 4 バージョン 引用 保存

## “実験技術”としての量子多体系シミュレーションソフトウェア ALPS

藤室資治 - 日本物理学会誌, 2015 - exa.phys.su-tokyo.ac.jp  
スーパーコンピュータやワークステーションが計算物理における「実験装置」であるとする、シミュレーションソフトウェア(プログラム)はそれらを使いこなすための「実験技術」であると言える。我々の研究成果につながる「技術」は、個々の研究者あるいは研究グループが、門外不出のもの ...  
関連記事 全 2 バージョン 引用 保存 その他

Etude structurale du verre de TeO<sub>2</sub> et de la variété désordonnée TeO<sub>2</sub>-δ par dynamique moléculaire.

A. Gulenko - 2014 - tel.archives-ouvertes.fr  
Ce travail a pour but d'améliorer la description structurale du verre de TeO<sub>2</sub> pur et d'étudier en profondeur la structure de la phase désordonnée δ-TeO<sub>2</sub> au moyen de la dynamique moléculaire (DM). Nous avons établi des potentiels interatomiques (IAP), simples mais ...  
関連記事 全 2 バージョン 引用 保存

## Molecular Dynamics Study of Free Energy Profile of Solubilization of Insoluble Molecules in Ionic SDS and Non-ionic C12E8 micelles

H Takabayashi, K Fujimoto, N Yoshii, S Okazaki - molsci.center.ims.ac.jp  
[要] ミセルの存在下では、溶媒に溶けにくい分子がミセルに結合することにより溶解する。これを可溶化という。これより疎水性の分子が水中に溶解することでできる。化粧品、食品、インクなどでは、この性質を利用して難水溶性の成分を水中に分散させている。可溶化について、...  
関連記事 全 2 バージョン 引用 保存

## 細胞膜脂質組成を模倣した混合脂質二重層膜の分子動力学シミュレーション

安藤嘉倫 - アンサンブル, 2013 - jlc.jst.go.jp  
分子動力学 (MD) シミュレーションは、計算機能力の向上、全原子力場モデルの精巧化、および方法論の成熟によって、脂質二重層膜の物性を議論する上で不可欠な手法となっている。本研究ではマウス膵腺細胞およびその癌化細胞の細胞膜について両者の膜の物性の違いを ...  
関連記事 全 4 バージョン 引用 保存

## “実験技術”としての量子多体系シミュレーションソフトウェア ALPS

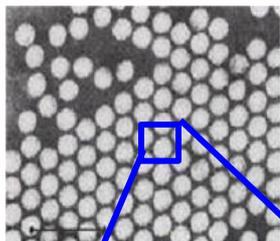
藤室資治 - 日本物理学会誌, 2015 - exa.phys.su-tokyo.ac.jp  
スーパーコンピュータやワークステーションが計算物理における「実験装置」であるとする、シミュレーションソフトウェア(プログラム)はそれらを使いこなすための「実験技術」であると言える。我々の研究成果につながる「技術」は、個々の研究者あるいは研究グループが、門外不出のもの ...  
関連記事 全 2 バージョン 引用 保存 その他

# 計算例 ウィルスカプシドの 大規模MD (2014)

- 約650万原子系
- ウィルスカプシドのMD
- 京コンピュータ
- 200 ns
- ウィルスカプシド丸ごと一つの全原子MD

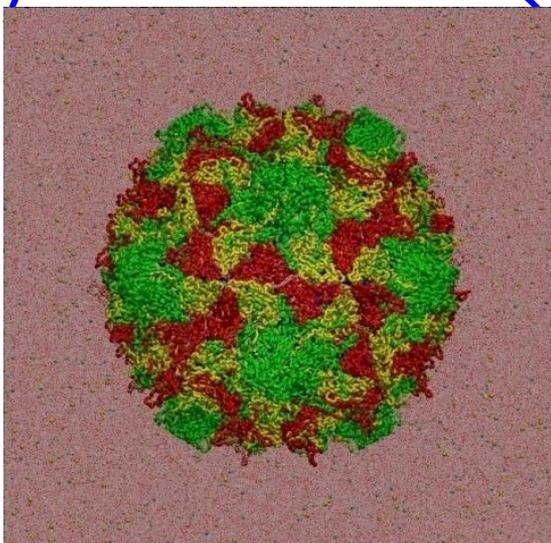
# 感染機構を解き明かす

## ウイルスとレセプターの特異な相互作用



小児麻痺  
ウイルス  
"Medical Virology",  
edited by D. O. White and  
F. Fenner, Academic Press

10,000,000原子

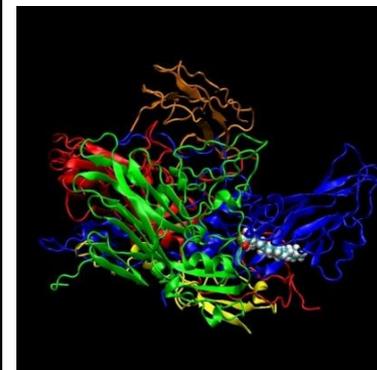
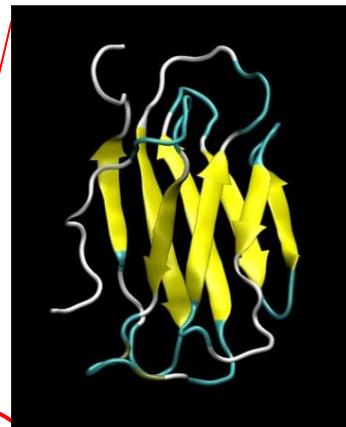
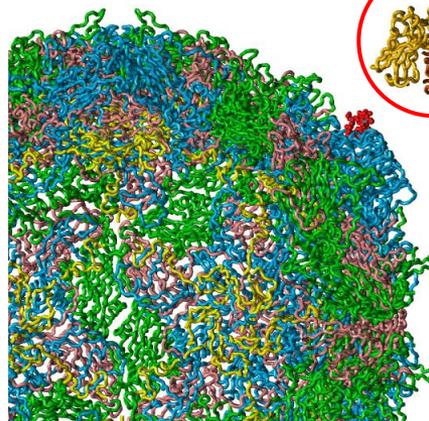


小児マヒウイルス  
P=1 atm, T=310.15 K

「京」スパコンが不可欠

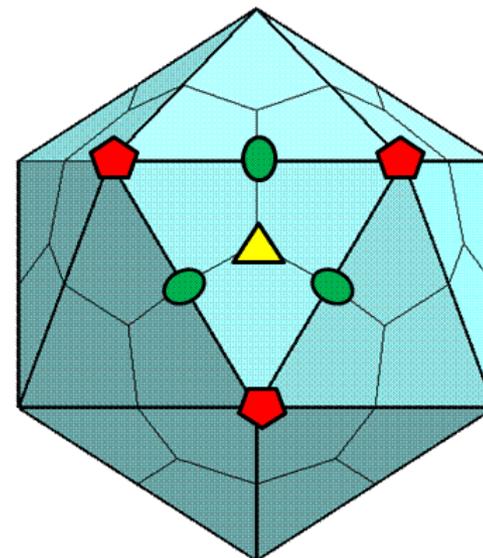


ウイルス全体1000万原子系の  
分子動力学計算が必要



レセプター

カプシドとレセプターの結合  
・レセプターの構造変化？



# ウイルスカプシドの分子動力学計算

## 全原子計算

マイクロ秒程度の軌跡

~1000万原子系

- ・周期境界条件下
- ・長距離相互作用



## 京スパコン

10<sup>0</sup>ms/step

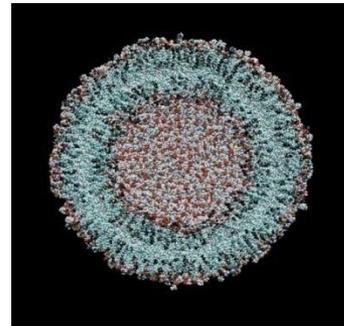
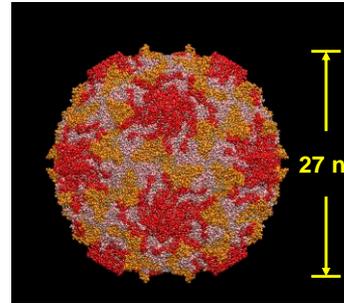
- ・大規模並列が不可欠
- ・通信もms



隣接通信化が不可欠  
(FFTは不可)

## 小中規模系の計算

- ・2~3万原子系
- ・Ewald法  
領域分割  
FFT



## 専用計算機

- ・ANTON  
512並列  
数 $\mu$ s/step
- ・MDGRAPE

## 従来のスパコン

1マイクロ秒: 10年(解析不可能)  
(実効性能 0.1ペタフロップス)



# 普及・ユーザーサポート

Registration to CMSI MateriApps



12thCMSI Kobe Hands-on:  
MODYLAS 1<sup>st</sup> tutorial, FOCUS (2013)  
21thCMSI Kobe Hands-on:  
MODYLAS 2<sup>nd</sup> tutorial, CMSI Kobe (2015)

CMSI特論 on Web:  
CMSI計算科学技術特論A (2013、2015)  
12<sup>th</sup>, (13<sup>th</sup>) lectures by N.Yoshii [Nagoya University]  
CMSI計算科学技術特論B (2014)  
10<sup>th</sup>, 11<sup>th</sup> lectures by Y. Andoh [Nagoya University]  
CMSI計算科学技術特論C (2015)  
by N.Yoshii & Y. Andoh

MODYLAS Web講習会 (MateriApps)  
[http://ma.cms-  
initiative.jp/ja/listapps/modylas/modyla  
s\\_lecture/modylas\\_weblecture](http://ma.cms-initiative.jp/ja/listapps/modylas/modylas_lecture/modylas_weblecture)

## MODYLAS Web講習会

MODYLASの講習会をWeb上で擬似体験することが出来ます。  
ハンズオン講習会で説明した項目を、順にスライドシェア形式で紹介します。



Modylas講習会 from Computational Materials Science Initiative

## 分子動力学法

- 分子動力学法の概要説明 ( P.3)
- 研究事例の紹介 ( P.12)

# MODYLASの普及先

- 産業

大手製薬会社

医薬品開発

自動車メーカー

材料開発

カーエアコン大手

材料開発

大手化学品メーカー 数社 高分子、洗剤、分離膜等

- 大学

名大

レプリカ交換法 (REM) との連携

岡山大

クラスとレートハイドレートの大規模系を京で実行

阪大

自由エネルギー表示法 (ermod) との連携

金沢大

共同開発、大規模系を京で実行

分子研

共同開発

名市大

肝炎ウイルス系共同研究

# 普及しているソフトの特徴

ソフトを習得するのは忍耐を要する。

ユーザーはできるだけ多くのことを1つのソフトで済ませたい。

- 簡単に入手、簡単にインストール
- 利用制限がゆるい
- 利用できる計算手法、解析手法が豊富
- 結果の信頼性が高い
- 新しい手法が導入される
- フォーラム等が充実している
- チュートリアル、マニュアルが充実
- 入力データの作成が容易
- 研究例が豊富
- コードの改変ができる(可読、ライセンス)

**NMR測定** たった1つの機器で多様な測定

1D,2D...、多核、NOESY、DOSY

化学種の同定、構造情報、拡散係数、反応速度...

サンプルの制限も少ない(固体、液体、ガラス、超臨界流体)



# 普及に向けての問題点と対策

---

- exampleが少ない。  
→研究で得られたものを追加
- インストールでこけることがある。  
→利用可能なマシン環境にて対応
- 座標やパラメータの入出力データ形式が他の人気ソフトと異なる。互換性が低い。  
→変換ツールの開発、VMDのプラグイン、nano-ignition
- 計算結果の解析ツールが少ない。  
→研究で得られたものを追加
- 入力データの作成が面倒。  
→研究で得られたものを追加
- わからないことがあった時の情報入手先が少ない。  
→HP上のFORUMの成長、直接の問い合わせ対応、youtubeなどでの発信
- 他に有力な類似ソフトがあり、計算環境によってはパフォーマンスで後れを取っている。  
→超並列で優れているという特長を維持

# Nano-Ignition/MODYLAS

## 質問、要望

---

Nano-Ignition:

岩橋建輔氏, 分子研 (IMS)

E-mail: [iwahashi@ims.ac.jp](mailto:iwahashi@ims.ac.jp)

MODYLAS:

Webのフォーラムへ

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

安藤さんに直接メールしないでください。

# 今後の取り組み

- ・拡張を適用した公開版をウェブサイト[www.modylas.org](http://www.modylas.org) で公開
- ・FMMによる圧力テンソル計算コードを実装。平行六面体セルでのパリネロ・ラーマン法での異方的NPTアンサンブル計算に対応。
- ・演算のホットスポット (p2pおよびM2L) について, 京コンピュータ以降の8個以上のコアを持つメニーコアアーキテクチャ対応のスレッド並列化, およびベクトル長のより長い SIMDに対応したコードの開発

FX10, FX100

Xeon-phi クラスタ (ポストT2K)

JHPCN課題「分子動力学計算ソフトウェアMODYLASのメニーコアアーキテクチャ対応並列化に関する研究」

- ・他性能面, 機能面での多数の開発項目

# まとめ

---

- MODYLASは2013年に公開し、少しずつ利用されつつある。
- 超並列に適しているという特長を伸ばして、ユーザーを確保していきたい。
- 開発にはこれまで外注を利用してきた。これからは協力者からの寄与が得られるように努める。
- HP、学会発表、産学との共同研究などを通して普及活動を行っている。
- 他のソフトとの連携も進めている。

# まとめ

---

## 第一回(12月17日)

- 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

## 第二回(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