

レプリカ交換分子動力学シミュレータ REMD Toolkit のグリッド上での実行

佐藤 仁[†] 伊藤正勝^{††}
中田秀基^{††} 松岡 聡^{†,†††}

レプリカ交換法は、問題の粒度が大きく、計算機間のデータの通信量が少ないため、グリッドシステム上での計算に向いていると考えられている。しかし、実際にレプリカ交換法のアルゴリズムを実装したプログラムをグリッドシステム上で実行した場合の性能は明らかになっていない。われわれは、レプリカ交換法システム REMD Toolkit をさまざまな環境下で実行し、実行性能を測定した。さらに REMD toolkit に対して性能ヘテロな環境での実行を考慮した改良を加えた。この結果、1) REMD ツールキットは 100 台規模まで十分にスケールすること、2) 性能ヘテロに対応した改良版では性能ヘテロな環境で有効であることを確認した。

Execution of the replica exchange molecular dynamics simulator on the Grid

HITOSHI SATO^{,†} MASAKATSU ITO^{,††} HIDEMOTO NAKADA^{††}
and SATOSHI MATSUOKA^{†,†††}

Replica-exchange method is considered to be suitable for execution on the Grid environment because of its large granularity and small size data transfer. To confirm the suitability, we performed several experiments on various environment, using an application program called REMD toolkit that implements Replica-exchange method. We also improved the REMD toolkit to cope with performance-heterogeneous environment. The results showed that, 1) REMD toolkit is scalable upto around 100 workers, 2) the improved version is faster than original version in the performance-heterogeneous environment.

1. はじめに

複数の管理主体に属する計算機資源を集散的に活用して大規模な計算を行うグリッドと呼ばれる計算システムが普及しつつある。このようなグリッド上のアプリケーションとして、産業技術総合研究所（産総研）グリッド研究センターでは、REMD(Replica Exchange Molecular Dynamics) Toolkit⁷⁾ が開発されている。REMD Toolkit はタンパク質の立体構造に基づく薬物分子設計を目的としたアプリケーションであり、Simulated Annealing に似たレプリカ交換法⁴⁾⁵⁾と呼ばれるアルゴリズムを用いている。一般に、レプリカ交換法による分子シミュレーションは、問題の粒度が大きく、計算機間の情報通信量が少なくすることができ、並列計算に向いていると考えられている。また、REMD Toolkit がシミュレーションの対象とする分子のサイズは非常に大きく、莫大な計算時間が必要であるため、求解時間の短縮が切望されている。

このため、REMD Toolkit はグリッド上での実行に適していると考えられるものの、そのスケーラビリティや高レイテンシへの耐性は立証されていない。

また、REMD Toolkit のアルゴリズムは、バリア同期を含むため、性能ヘテロな環境においては著しく実行時間が低下することが予測される。

そこで、本稿では REMD Toolkit に対してさまざまな環境下での実験を行うとともに、性能ヘテロな環境に対応するための改良を行った。

この結果、REMD Toolkit のスケーラビリティは 100 台規模まで確保されていること、改良の手法は性能ヘテロ環境で有効であることを確認した。

2. レプリカ交換法と REMD Toolkit

2.1 レプリカ交換法

タンパク質の分子などの多自由度の複雑系では、エネルギー極小状態が無数に存在するため、分子シミュレーションを実行しても、構造がエネルギー極小状態に留まってしまう、信頼できる正確な物理量が得られないという問題がある。⁶⁾ この問題を解決する手法として、レプリカ交換法というアルゴリズムが知られている。レプリカ交換法による分子シミュレーションで

[†] 東京工業大学 Tokyo Institute of Technology

^{††} 産業技術総合研究所 National Institute of Advanced Industrial Science and Technology

^{†††} 国立情報学研究所 National Institute of Informatics

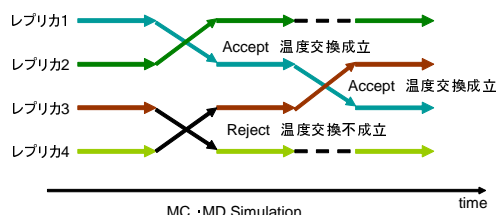


図 1 レプリカ交換法

は、分子の構造の複数のレプリカを用意し、それぞれに異なった温度を割り振り、構造サンプリングを行う。サンプリングのためのシミュレーションには、分子動力学法 (MD) あるいはモンテカルロ法 (MC)⁸⁾ を用いるが、分子レプリカの間に相互作用がないので、サンプリングステップは独立かつ並列に計算することができる。低温でサンプル構造が準安定状態に囚われるという MC/MD の欠点は、レプリカ間で温度交換を行うことで解消されるので、この手法では信頼性の高い物理量が得られる。

2.2 REMD Toolkit

REMD Toolkit は、産総研グリッド研究センターで開発されているタンパク質の立体構造に基づく薬物分子設計を目的としたアプリケーションである。

薬物分子の設計において、タンパク質分子の 3 次元構造がどのようにになっているか、また、タンパク質分子がどのように空間中を揺らぐのかというような情報が非常に有用であるとされる。タンパク質の構造に関する情報は、ターゲットとなるタンパク質に特異的に結合するリガンドと呼ばれるタンパク質を予測する際に必要とされるのに対し、タンパク質構造の揺らぎに関する情報は、ターゲットとなるタンパク質中の問題となっている部分ヘリガンドをドッキングさせる際に必要な情報となる。

ドッキングの際の結合親和力を正確に評価するためには、リガンドとなるタンパク質構造の揺らぎの複雑さがその構造の部分状態の統計集団として表現されるように統計力学を厳密に適用させることが必要とされる。また、このような統計力学を用いた評価は、タンパク質の様々な構造の変化と関連するタンパク質の機能を理解するために本質的でもある。

しかしながら、2.1 節で述べたように、タンパク質は、エネルギー極小状態が無数に存在するため、従来のモンテカルロ法や分子動力学法による分子シミュレーションでは、それらのエネルギー極小状態に留まってしまったため、信頼できる定量的な予測を行うことが絶望的

に難しいため、このようなシミュレーションを行う際は、レプリカ交換法を用いることが必要とされる。

REMD Toolkit は、レプリカ交換法を用いてタンパク質構造を効率よくサンプリングを行う。また、オブジェクト指向言語である C++ により記述されているため、プログラムのモジュールを変更することにより、様々な統計集団の分子シミュレーションに対応することができ、また、様々な並列化を行うことができる。現状では、REMD Toolkit の並列化は MPI を用いている。

2.3 REMD Toolkit の並列化手法 (割り当て固定法)

REMD Toolkit は、マスタとワーカ以外に通信を行わないという点において純粋なマスタ・ワーカ方式である。図 2 のようにワーカがそれぞれにひとつの分子の構造座標 (レプリカ) の情報を管理しているのに対し、マスタはすべてのレプリカのエネルギー分布と温度分布を管理している。

ワーカはそれぞれ独立に分子動力学法やモンテカルロ法による構造サンプリングを行うが、定まった間隔においてマスタにエネルギー、反応座標 ($double \times 2$ の情報量) をバッファして送信する。反応座標とは、シミュレーションによりどの程度構造のサンプリングが進んだかを表す指標である。

マスタはいったん全てのワーカから情報を受け取り、それらの情報を集計し、このうちのエネルギーをもとにレプリカの温度を決め直し (交換し)、新しい温度をワーカに送信する。この際のマスタからワーカへの通信量は $double \times 3 + bool$ ($bool$ は温度更新のフラグ) となる。温度の他にも 2 つの熱力学的パラメータがワーカに送信されるので、REMD Toolkit では、通常のカノニカル統計集団の他にも一般化された統計集団を扱うことができる。

温度交換が発生した場合 (温度更新のフラグが $true$ の場合) は、マスタから送られてきた温度情報を元に、ワーカの温度の情報の再設定を行う。温度交換が発生しない場合 (温度更新のフラグが $false$ の場合) は、何の処理も行わず、そのまま次のシミュレーションを行う。この手法を以下、割り当て固定法と呼ぶ。

2.4 割り当て固定法の問題点

2.3 節で述べた割り当て固定法では、レプリカを交換する周期ごとにすべてのワーカが同期する。この構造ではワーカに性能差があった場合、最も速度の遅いワーカがボトルネックとなり、高速なワーカは遅いワーカの終了を待つことになる。このため、本質的に性能ヘテロなグリッド環境では有効に運用することが難しいことが予想される。

3. REMD Toolkit の性能ヘテロ環境対応

性能ヘテロ環境に対応するために REMD ツール

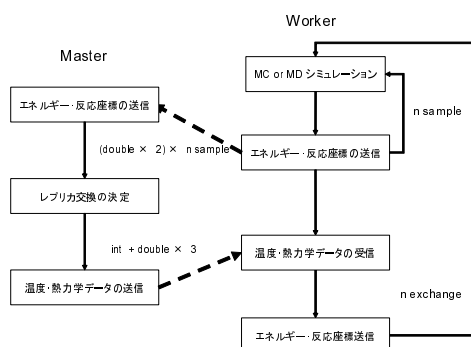


図 2 REMD Toolkit アルゴリズム

キットに以下の変更を加えた (以降割り当て交換法と呼ぶ).

- (1) 各レプリカの進捗状況をモニタし、進捗が遅れているレプリカと進捗の進んでいるレプリカに対するワークの割り当てを交換する。
- (2) レプリカ交換時にすべてのワークでバリア同期を行うかわりに、交換する相手との1対1の同期とする。これにより、ワーク間の速度相違をある程度の幅で吸収する。

3.1 割り当て交換法の動作

割り当て交換法は以下のように行う。まずレプリカ交換の期間を任意の数の区間に分割する。この区間をレポート区間と呼ぶ。

マスタは、各ワークに対して特定のレプリカ、特定の温度で特定のレポート区間をサンプリングするように命令する。ワークはサンプリングが終了すると、各サンプルでのエネルギー値を配列としてマスタにレポートする。これによりマスタは各レプリカのサンプリングの進捗状況を把握することができる。

マスタは、ワークからのレポートを受け取った際に、そのレプリカの進捗が現在最も進捗しているレプリカよりも、特定の閾値以上に遅れている場合に、それらのレプリカに割り当てられているワークの交換を指令する。これによりレプリカの進捗が平滑化される。ワークの交換は実際には、レプリカをワーク間で交換することで行われる。レプリカの交換では、温度の交換と比較して大きいデータを交換しなければならないため、マスタを経由することなく、ワーク間で直接通信を行って交換している。

この方法をナイーブに適用すると、たとえば極端に進捗が遅れたレプリカがあった場合に、そのレプリカに対して連続して交換が発生することがありうる。これを防ぐために、ワーカの割りあてを変更したレプリカに対しては、一定の期間は交換の対象にならないように制約を加えている。

割り当て固定法と割り当て交換法の動作を図で説明

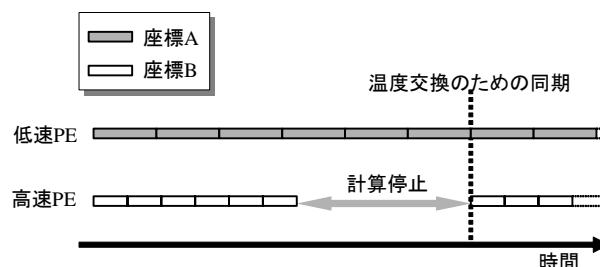


図 3 割り当て固定法による動作

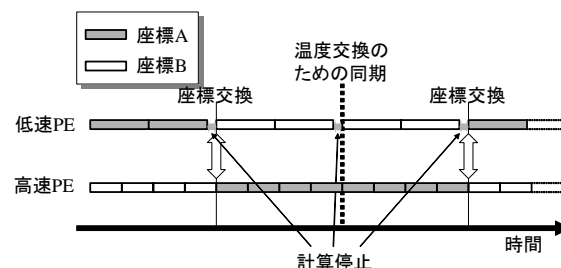


図 4 割り当て交換法による動作

する。

まず、図 3 に割り当て固定法による動作を示す。図中の長方形はひとつのリポート区間の実行を意味する。下段の高速 PE では個々のリポート区間の実行が短時間で行われるが、上段の低速 PE では高速 PE よりも時間がかかる。このため、温度交換をする際には高速 PE は低速 PE の終了を待たねばならず、全体の実行時間は低速 PE に制約される。

次に、図 4 に割り当て交換法による動作を示す。割り当て交換法では、実行の進捗に大きな差ができた時点で、レプリカに対するワーカの割り当ての交換、すなわち座標および温度の交換を行う。この図では、上段の PE で座標 A の実行が 2 レポート区間分終了した時点で、進捗に大きな差ができていたため、下段の PE が現在のレポート区間の実行を終了するのを待って割り当てを交換している。この結果、計算停止時間が大きく縮小され全体の実行時間が短縮されている。

なお、これらの制御構造の変更は、REMD toolkit の拡張性をまったく損なうことなく行うことができた。これは、REMD toolkit が高度にオブジェクト指向設計されていたためである。

4. 実験

4.1 実験の概要

REMD toolkit の性能の特性を検証するために、下記の 3 つの環境で実験を行った.

- ネットワーク性能が不均一な環境
- 性能ヘテロな環境

● グリッド環境

4.2 実験環境

本実験で用いる実験環境は、東京工業大学松岡研究室 PrestoIII クラスタ、産業技術総合研究所 ume クラスタ、東京工業大学学術国際情報センターの GSIC-Presto クラスタ、東京工業大学学術国際情報センターに設置された Titech Grid クラスタである。表 1 に各計算機の仕様を示す。ただし、Presto III 以外のクラスタは、占有可能ではないため、他のユーザも頻繁に利用しているような状況下における実行結果である。

シミュレーションに用いたタンパク質は、オリゴペプチド (*Ala*)₁₀ であり、温度は、下限を $T_L = 168.2$ 、上限を $T_H = 2262.7$ に固定し、指数関数的にレプリカ数に応じて変化させた。例えば、 i 番目のレプリカの担当する温度は以下になる。ここで、 N は、レプリカ数である。

$$T_i = T_L \times \left(\frac{T_H}{T_L} \right)^{\frac{i}{N-1}}$$

4.3 ネットワーク性能が不均一である環境での評価
ネットワークの性能が不均一である環境での REMD Toolkit の実行を評価するために、割り当て固定法、割り当て交換法のそれぞれについて、Titech Grid 内のサイトの同一クラスタにワークを割り当てて実行させたもの（クラスタ環境）と、Titech Grid 内の異なるサイトのクラスタにワークを割り当てて実行させたもの（キャンバスグリッド環境）の実行時間を比較した。割り当て交換法においては、交換の閾値 T を 0.3 および 0.7 に設定して実行した。ここで 閾値が 0.3 とは、温度交換の周期を 1 とした相対値である。MPI には、mpich-1.2.5²⁾ を使用した。マスタとワークを担当する各サイト間のネットワーク性能は十分高速であり、ノードとスイッチ間の 100base/T のネットワークがボトルネックとなる。このため、クラスタ内とキャンバスグリッド環境で、スループットは同一の 100Mbps である。しかし、レイテンシはクラスタ内が 50us 程度であるのに対しキャンバスグリッド内では 130us 程度と若干遅くなっている。

割り当て固定法のクラスタ環境とキャンバスグリッド環境での実行結果を図 5 に示す。ワーク数を増加させた場合、クラスタ環境と比較してキャンバスグリッド環境では実行時間の増加がみられるが、ネットワークによるボトルネックは小さいと考えられる。また、クラスタ環境とキャンバスグリッド環境のどちらもワーク数を増加させた場合の実行時間の増加が、ワーク数の増分比べ低く抑えられている。

次に、割り当て固定法と割り当て交換法をキャンバスグリッド環境で実行し、比較したものを図 6 に示す。

ワーク数が増加するにつれ、割り当て交換法の実行時間が大幅に低下している。これは、ワークの数が増加するに連れ、座標交換回数が増加するためであると

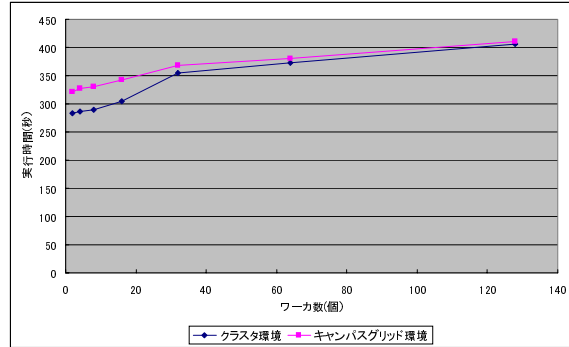


図 5 割り当て固定法のクラスタ環境とキャンバスグリッド環境での実行時間の比較

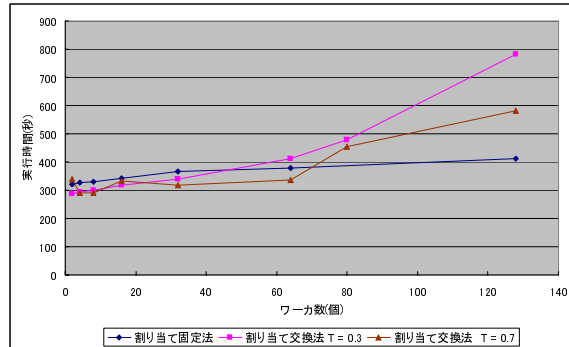


図 6 キャンバスグリッド環境における割り当て固定法と割り当て交換法の実行時間の比較

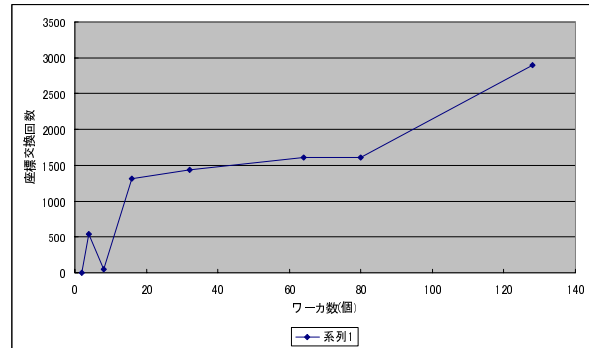


図 7 キャンバスグリッド環境における割り当て交換法のワーク数と座標交換回数の比較

考えられる。図 7 にワーク数と交換回数の関係を示す。

4.4 性能ヘテロである環境での評価

性能ヘテロである環境での REMD Toolkit の実行を評価するために、東京工業大学松岡研究室 PrestoIII クラスタで次のような実験を行った。

性能ヘテロな環境を実現するために、一部の計算機に複数のワークを割り当て擬似的に計算機性能が低下したのと同様な環境を設定した。

この実験では、ワーク数は、32 に固定した。また、交

表 1 使用計算機システムの仕様			
名称	設置場所	PE	台数
Presto III	東工大大岡山キャンパス	Athlon MP 1900 x 2	256
ume クラスタ	産総研つくば	Pentium III 1.4G x 2	32
GSIC Presto	東工大大岡山キャンパス	Pentium III 800M x 4	4
Titech Grid	東工大大岡山キャンパス	Pentium III 1.4 x 2	400
	東工大すずかけ台キャンパス		

表 2 性能ヘテロ環境での負荷

	高速ワーカー数	低速ワーカー数	低速ワーカー相対速度
負荷なし	32	0	
負荷 1	28	4	1/2
負荷 2	26	6	1/3
負荷 3	24	8	1/4

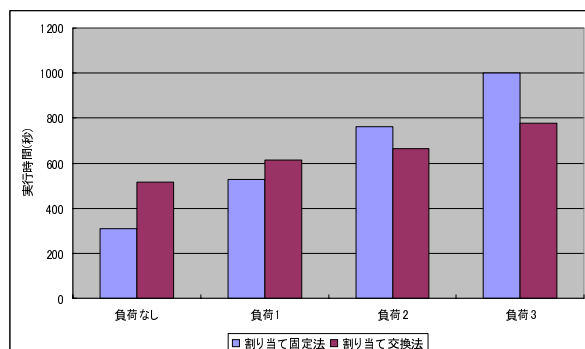


図 8 ワーカー数 32 の場合における負荷をかけた環境での割り当て固定法と割り当て交換法の時間の比較

換の閾値 T は 0.3 に設定している。負荷のかけ方は表 2 に示す 4 通りを用意した。

結果を図 8 に示す。負荷を増やすにつれて、割り当て固定法による実行ではもっとも低速なプロセッサの性能に応じて性能が低下している。これに対して割り当て交換法では、それほど大きな影響を受けていない。このため、負荷なし、1 では割り当て固定法のほうが高速だが、負荷 2、3 では割り当て交換法のほうが高速となっている。

同様に、ワーカー数を 16 に固定した結果を図 9 に示す。ワーカー数が 32 の場合と同様の結果が得られた。

4.5 グリッド環境での実験

Globus¹⁾ を用いた場合の性能を評価するために、REMD Toolkit を MPICHG2³⁾ を用いて実行した。マスタを GSIC-Presto の 1 ノードに割り当て、ワーカーを産総研 ume クラスタに割り当てて実行した。両者の間のスループットは 10Mbyte/s、レイテンシは 7ms 程度である。結果は、図 10 のようになった。

台数が増加するとともに大幅に実行時間が増加している。ただし、前述のとおり ume クラスタは占有できるクラスタではないため、他のユーザが使用していた可能性があり、その影響を受けたことも考えられる。

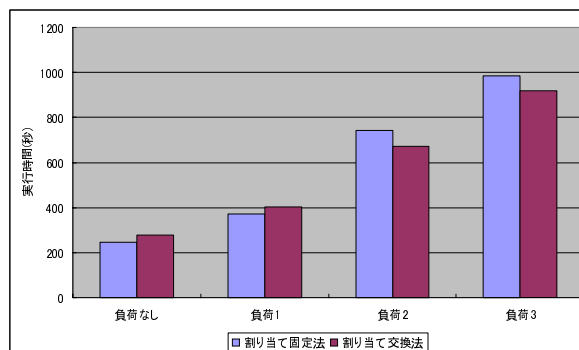


図 9 ワーカー数 16 の場合における負荷をかけた環境での割り当て固定法と割り当て交換法の時間の比較

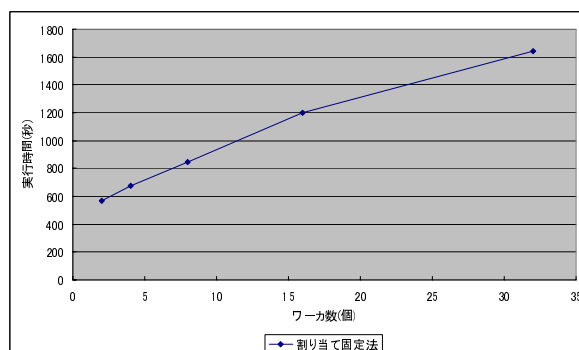


図 10 グリッド環境での実験

4.6 議 論

キャンバスグリッド環境での実験から、REMD toolkit は 100 台規模までスケラブルであることが確認できた。

グリッド環境の実行においては、台数の増加に応じた速度の低下が観測された。サーバ側のクラスタが占有できず、他のプロセスが走っていた可能性があること、割り当て固定法の REMD Toolkit はバリア同期を行うためもっとも低速なプロセスに律速されてしまうことを考えると、速度低下がグリッド環境のレイテンシのためだけであるとはいいたい。レイテンシの影響のみを観測するためには、より精密でコントロールされた実験が必要である。

キャンバスグリッドにおける割り当て交換法の実験では台数を増やすにつれて大きく性能が低下している。また、性能ヘテロな環境での評価でも負荷なし、負荷 1 で割り当て固定法よりも低速である。これは、割り当

での交換を決定するアルゴリズムやパラメータが未成熟なため、本来必要でない場合や、交換のコストに引き合わないような場合にも交換が起きているためであると思われる。

しかし、性能ヘテロ環境でのヘテロ性が高い場合には、固定法よりも高速であることから、割り当て交換法自体は有効であることがうかがえる。

これらにより、割り当て交換法の有効性は立証されたが、交換決定のアルゴリズム、およびパラメータに関しては改善する必要があることがわかった。

5. おわりに

本稿では、レプリカ交換法プログラムである REMD toolkit をさまざまな環境下で評価した。また、性能ヘテロな環境に対応させる割り当て交換法の提案を行い、MPI を用いて実装された REMD Toolkit に提案手法を実装し、評価した。

この結果以下のことが確認できた。

- REMD ツールキットは 100 台規模まで十分にスケールする
- 割り当て交換法は、いくつかの環境では性能が逆に低下したものの、性能ヘテロな環境では効果がある

今後の課題としては以下が挙げられる。

- 割り当て交換法のアルゴリズムおよびパラメータの改良
本来、割り当て交換法は交換の必要がない場合には、割り当て固定法とまったく同じように動作し、オーバーヘッドが生じないように動作することを想定していた。しかし交換判定のアルゴリズムおよびパラメータが未成熟であったため、今回の実験では環境によって割り当て固定法よりも低速となってしまった。これを改善し、いかなる環境下でも固定法と同等な性能を上げることが課題である。
- 高レイテンシ環境での性能測定
本稿で用いたグリッド環境は地理的には隔絶しているものの、ネットワーク的には非常に高速であり、レイテンシ耐性を検証するために良好な環境であったとはいいいがたい。国際回線などを使用した高レイテンシ環境での評価が必要である。

参 考 文 献

- 1) The globus project. <http://www.globus.org>.
- 2) Mpich- a portable mpi implementation. <http://www-unix.mcs.anl.gov>.
- 3) Mpich-g2. <http://www3.niu.edu/mpi>.
- 4) Koji Hukushima and Koji Nemoto. Exchange monte carlo method and application to spin glass simulations. *Journal of the Physical Society of Japan* Vol 65 1604-1608page, 1996.
- 5) Yuji Sugita and Yuko Okamoto. Replica-

exchange molecular dynamics methods for protein foldings. *Chemical Physics Letters* Vol.314 page 141-151, 1999.

- 6) 岡崎進, 岡本祐幸 (編). 生体系のコンピュータシミュレーション. 化学同人, 2002.
- 7) 伊藤正勝, 長嶋雲兵. レプリカ交換分子動力学法による分子シミュレーションの並列化 remd toolkit. 情報処理学会研究報告 HPC-95(to appear), 2003.
- 8) 片岡洋右. 分子動力学法とモンテカルロ法. 講談社, 1994.