

GPUによる分子動力学法的高速化と応用

○ 本山雅孝、小倉鉄平、石元孝佳、古山通久

九州大学稲盛フロンティア研究センター（〒819-0395 福岡市西区元岡 774）

【緒言】近年 CPU の演算速度が頭打ちとなっており、並列計算による高速演算が多く取り組まれている。中でも並列プロセッサ-GPGPU (General Purpose Graphics Processing Unit) による計算に高い注目が集まっている。分子シミュレーションの分野においても、分子力学および量子化学の計算プログラムが GPU を用いた高速化で成果を上げている [1, 2]。本研究では、GPGPU を動作させる為の「プログラミングモデル」である CUDA (Compute Unified Device Architecture) 環境において、分子動力学プログラムを実装し、高速化を図った。

【方法】分子動力学プログラムとして ryudo を使用した。

【結果】分子動力学プログラム ryudo の計算フローを Fig. 1 に示す。まず読み込んだ設定ファイルを基に相互作用エネルギーをテーブル化する。各原子に対するエネルギー、力、圧力を計算した後、速度と位置の計算を行う。これを設定条件を満たすまで繰り返すことで、計算終了となる。

Fig. 1 の計算フローの中で処理負荷の高い計算を行っている部分は” エネルギー、力、圧力の計算”であることを特定し、CUDA プログラミングにより並列化を行った。ZrO₂ 結晶モデルを用いて並列処理後のプログラムで分子動力学計算を行い、計算速度、計算精度などを解析した。なお、ポテンシャルには BMH ポテンシャルを用いた。酸素原子の x 方向に働く力を例にとり、CUDA と CPU における計算の差を Fig. 2 に示す。ステップ数が増えるにつれて CUDA と CPU のずれが大きくなっているのが分かる。この差は Simulation Step のさらなる増加とともに顕著となり、1000step においては 8.53 の差となった。この原因としては、現在の GPU では倍精度に対応しておらず、単精度での計算を行っているためである。詳細な解析および応用計算の結果については当日報告する。

【参考文献】

1. J. E. Stone et al., J. Comput. Chem., **28**, 2618 (2007).
2. K. Yasuda, J. Chem. Theory Comput., **4**, 1230 (2008).

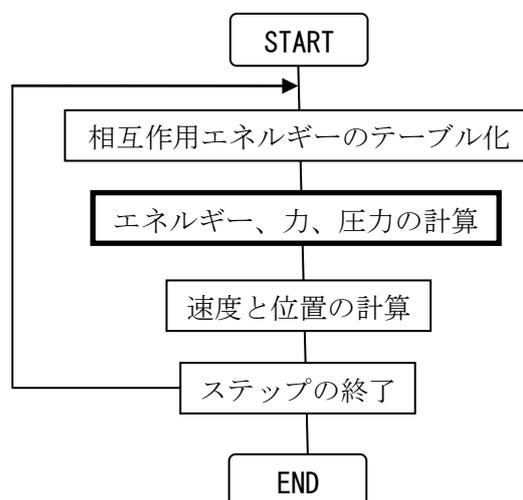


Fig. 1 ryudo の計算フロー

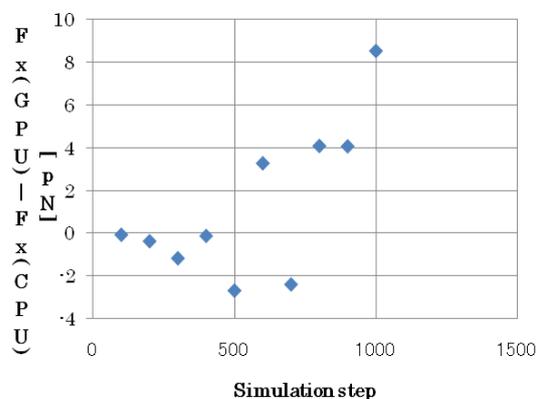


Fig. 2 酸素原子に働く力のずれ