

GPGPU による量子化学計算の高速化

○古川祐貴、古賀良太（株式会社クロスアビリティ）、安田耕二（名大・エコトピア研究所）

【緒言】

Yasuda (2008a[1], 2008b[2]) の研究成果をもとに、Nvidia 社が提供する統合開発環境 CUDA を用いて各種量子化学計算に結合可能な GPGPU 対応の汎用モジュールである XA-CUDA-QM を開発した。この汎用モジュールを Gaussian[3], GAMESS[4] に組み込み、相当な高速化を達成した。

【機能】

- ・ 密度汎関数(DFT)法、ハートリー・フォック法による電子状態計算
- ・ 構造最適化(エネルギー勾配)計算
- ・ マルチコア、マルチ GPGPU に対応
- ・ 各種汎関数、基底関数対応
- ・ 既存の GAMESS、Gaussian のインプットファイルをそのまま使用可能
- ・ 二電子積分(J 行列、K 行列)、DFT 法における格子点上の電子密度の計算と密度汎関数の基底空間への変換、および DFT 法によるエネルギー勾配計算における二電子積分の部分を GPGPU で加速

【測定結果】

Valinomycine の DFT 法によるエネルギー勾配計算の実行時間とエネルギーの値を表 1 に示す。Gaussian03 に対して 2~3 倍程度の高速化、GPGPU で実装された TeraChem[5] に対しても優位な速度での計算を達成した。インプットファイルは Gaussian の Test397、および擬似 Test397 を使用した。

表 1：パフォーマンス測定比較

	時間[秒]	収束エネルギー[a. u.]
Gaussian 03 rev. B.01	289.93	-3772.609959
GAMESS 2009 Jan	3819.50	-3772.609882
TeraChem beta3 (1GPGPU)	192.76	-3772.608483
Gaussian + XA-CUDA-QM (1GPGPU)	124.96	-3772.609078
Gaussian + XA-CUDA-QM (2GPGPU)	113.80	-3772.609077

密度汎関数は blyp、3-21G 基底を使用

実行環境は、CPU: Intel Xeon E5540 2.53 GHz 8 core、GPGPU: Tesla C1060 x 2

Intel Fortran Compiler 11.1/CUDA 2.3/Intel Math Kernel Library 10.2 を使用

他手法のパフォーマンス測定や、実装の詳細については、当日発表する。

【参考文献】

- [1] Yasuda, K. Two-electron integral evaluation on the graphics processor unit. *J. Comput. Chem.* **2008**, *29*, 334-342.
 [2] Yasuda, K. Accelerating Density Functional Calculations with Graphics Processing Unit. *J. Comput. Chem.* **2008**, *4*, 1230-1236.
 [3] Gaussian03 Revision B.01, M.J.Frisch, et al, Gaussian, Inc, Wallingford CT, 2004.
 [4] M.W.Schmidt et al., *J. Comput. Chem.*, **14**, 1347-1363(1993) [5] TeraChem beta3, PetaChem, LLC, Los Altos Hills, CA, 2009