

CUDA/OpenACC を用いた GPU による分割統治法の高速度化

○吉川武司¹、中井浩巳^{1,2,3,4}

¹早稲田大学先進理工学部化学・生命化学科 (〒169-8555 東京都新宿区大久保 3-4-1)

²早稲田大学理工学研究所 (〒169-8555 東京都新宿区大久保 3-4-1)

³JST-CREST (〒332-0012 埼玉県川口市本町 4-1-8)

⁴京大 ESICB (〒618-8520 京都府京都市西京区京都大学桂 京都大学ローム記念館 316 号室)

【緒言】

これまで当研究室では線形スケーリング法である分割統治(DC)法^[1,2]を様々な電子状態理論に応用し、大幅な高速化に成功してきた。これにより、化学現象に対して大規模分子シミュレーションを行うことが可能となったが、数千原子を超える巨大系に対して電子状態計算を実行するためには、並列処理等による計算時間の更なる短縮を行う必要がある。最近では GPU (Graphics Processing Unit)を用いて汎用的な計算を行う GPGPU (General Purpose computation on GPUs)が幅広い分野で注目されている。GPU は、数万スレッドにもおよぶ非常に大量のマルチスレッド方式によって、高い並列演算処理を実現することが可能である。この技術は、科学技術計算の分野でも広く使われており、統合開発環境である CUDA (Compute Unified Device Architecture)を用いることにより、汎用 CPU よりも数倍から数十倍の高速化に成功している^[3]。本発表においては、アクセラレーターである GPU を用いた DC 法の更なる高速化について報告する。

【GPU を用いた DC-HF 法の高速度化】

DC 法は全系をいくつかの部分系に分けて対角化計算を行うことで計算コストを削減する方法である。部分系の周りのバッファ領域を含めた局在化領域で部分系 α の軌道を構築することで、周囲の効果を取り込むことが可能となる。

しかし、SCF サイクルにおいて、DC 法は全系の Fock 行列を生成する必要がある、その生成時間が大きな DC-HF 法のボトルネックとなっている。本発表では、Fock 行列生成部分に対して CUDA を用いて高速化を施した。CPU は Intel Xeon X5650 (2.67 GHz)、GPU は NVidia Tesla C2075 を用いて性能評価を行った。

【検証結果】

本研究で開発した GPU コードを用いて、フッ化水素(FH) 30 量体を RHF/6-31G**で計算を行った。DC 法による計算では部分系は FH 1 分子からなるユニットとし、バッファは左右 4 ユニットした。図 1 には CPU と GPU を使った場合の従来の HF 計算と DC-HF 計算の計算時間を示す。計算時間の 90%以上を占めていた Fock 行列生成が、GPU を用いることによって 6.7 倍高速に計算することが可能となった。また、全体として 4.4 倍の高速化に成功した。発表当日は、コンパイラディレクティブベースのプログラミングモデルである OpenACC^[4]を用いた動的分極率計算手法である DC-Green 関数法^[5]の高速化についても報告する予定である。

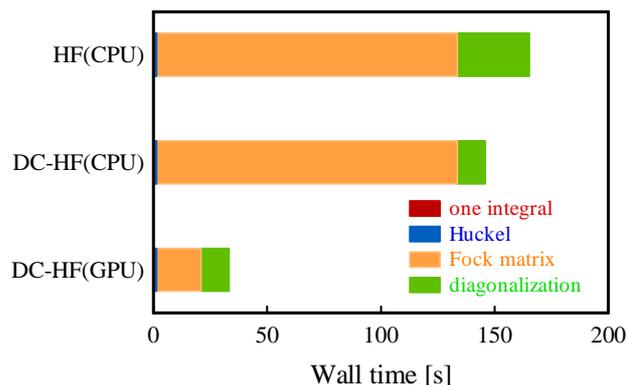


Fig. 1 Wall time [s] of (FH)₃₀ for each parts

[1] W. Yang and T.-S. Lee, *J. Chem. Phys.* **103**, 5674 (1995).

[2] M. Kobayashi and H. Nakai, in *Linear-Scaling Techniques in Computational Chemistry and Physics: Methods and Applications* (2011, Springer), pp. 97-127.

[3] I. S. Ufimtsev and T. J. Martinez, *J. Chem. Thor. Comput.* **4**, 222 (2008).

[4] <http://www.openacc-standard.org/>

[5] 中井浩巳、吉川武司、野中祐太郎, 第 6 回分子科学討論会(東京), 1E18 (2012).