

# グラフィックカードを用いた高速分子動力学シミュレーション

坂牧 隆司<sup>1</sup>, 成見 哲<sup>2</sup>, 泰岡 顕治<sup>3</sup>

慶應義塾大学理工学部機械工学科, 223-8522 神奈川県横浜市港北区日吉 3-14-1

<sup>1</sup>sakamaki@z6.keio.jp <sup>2</sup>narumi@a7.keio.jp <sup>3</sup>yasuoka@mech.keio.ac.jp

概要: 汎用の PC 用グラフィック専用カード(GPU)により分子動力学(MD)計算を実行した. Lennard-Jones ポテンシャルの相互作用力計算, Ewald 法[1]の波数空間成分の計算を GPU 内のパイプラインで並列化したところ, 数倍~数十倍の速度向上が見られた. また GPU 内は単精度実数を用いて計算を行っているが, 通常の計算機で倍精度実数を用いた計算と比較した結果, MD 計算における全エネルギーが通常用いられる時間刻み幅において十分保存した. この結果 GPU を用いることで高速かつ価格性能比に優れた MD 計算が可能と考えられる.

## 1 はじめに

現在の分子動力学(MD)計算において二点間相互作用力の計算は計算時間の大半を占めている. この相互作用力の計算は並列化が容易なアルゴリズムであるため, 並列計算機を用いて高速化する試みは古くから行われている.

本研究ではPC用のグラフィックカード(以下, GPU)であるGeForce8800GTXを用いて相互作用力計算の高速化を行った. これまでのGPUは基本的にグラフィック描画に特化したハードウェアであったが, 上記のGPUには汎用計算にも使用可能な並列の計算ユニットが備わっている. このGPUを用いて, van der Waals 力の計算およびEwald法の波数空間の計算を行い, 計算速度を一般のCPU(ホスト)と比較した. また, GPUの制約上単精度実数での計算しか出来ないため, MD計算の全エネルギーの保存から計算精度を評価した.

## 2 GPU

NVIDIA社製のGeForce8800GTXは 768MBのDevice Memoryとチップ上の 16 個のマルチプロセッサから成る. また 1 個のマルチプロセッサは, 1.35GHzで動作する 8 個のストリームプロセッサと 16KBのShared Memoryから構成される. 算術演算の計算精度は単精度のみであるが, ピーク性能は 518Gflopsとなる. ソフトウェアの開発には同じくNVIDIA社が提供する専用の開発環境CUDAを用いた.

## 3 計算結果

まず式(1)で表されるvdWポテンシャルを持つLennard-Jones単成分粒子のシミュレーション結果を示す. カットオフ半径は  $3\sigma$  とした.

$$V_1 = \sum_i^{N-1} \sum_{j>i}^N 4\epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right] \quad (\text{式 1})$$

図 1 は粒子数に対するMD計算全体の計算時間を, GPUを用いない場合(ホスト)とGPUを用いた場合(GPU)で比較している. ホスト計算にはIntel Core 2 Quad Q6600(2.4GHz)のsingle coreを用いた. 粒子数 5,000 以上においてGPUがホストに対し約 40 倍高速であることがわかる. それよりも粒子数が少ない場合はGPU内での並列実行の効率が落ちていと考えられる.

図2は時間刻み幅を 0.015, 0.017, 0.018 と変えた時の全エネルギーの時間発展の様子を示している. ホストですべて倍精度計算を行った場合(host-double), ホストでvdW力計算部分を単精度で行い他は倍精度で行った場合(host-single), GPUでvdW力計算を単精度で行い他はホストで倍精度で行った場合(GPU)と比較している. 時間刻み幅が 0.017 の時のみ倍精度計算と単精度計算(host-singleおよびGPU)との若干差が現れたが, 他の時間刻み幅では 3 つともほぼ同じ傾向を示している. 通常使用する時間刻み幅 0.015 の時のポテンシャルエネルギーの値を倍精度と単精度の計算で比較したところ, 相対精度でおよそ  $10^{-5}$  程のずれが確認された.

次にSPC/E水分子のシミュレーションを行った。周期境界条件におけるCoulombポテンシャルの計算にはEwald法を用いた。GPUでは式(2)で表されるEwald法波数空間の計算のみを行った。波数ベクトルのカットオフ半径は5とした。

$$V_2 = \frac{2\pi}{L^3} \sum_G \frac{\exp(-G^2/4\alpha^2)}{G^2} \sum_i^N \sum_j^N Q_i Q_j \cos[G \cdot (r_i - r_j)] \quad (式 2)$$

図3は波数空間計算ルーチンの計算速度をホストとGPUで比較したものである。GPUはホストの計算に比べて約30倍高速化している事が確認された。また先ほどと同様にポテンシャルエネルギーの比較を行った所、倍精度と単精度の差は $10^{-6}$ ~ $10^{-5}$ 程であった。

#### 4 まとめ

汎用的なGPUを用いてMD計算を高速化することができた。また、今回用いたGPUでは倍精度実数が計算できなかったが、単精度実数を用いた場合でも全エネルギーの保存を見る限り大きな問題が発生しないことが確かめられた。開発に多大なコストを要する専用計算機に比べ性能は落ちるものの、今後GPUの並列化により専用計算機と同等以上の性能を低コストで実現できる事が期待される。

#### 謝辞

本研究は科学技術振興機構(JST)戦略的創造研究推進事業(CREST)の支援の下推進されました。

#### 参考文献

- [1] P. Ewald, Die Berechnung optischer und electrostatisher Gitterpotentiale, Ann. Phys. 64, 253-287(1921).
- [2] T. Hamada & T. Iitaka, The Chamomile Scheme : An Optimized Algorithm for N-body simulations on Programmable Graphics Processing Units, submitted to New Astronomy, astro-ph/ 0703100

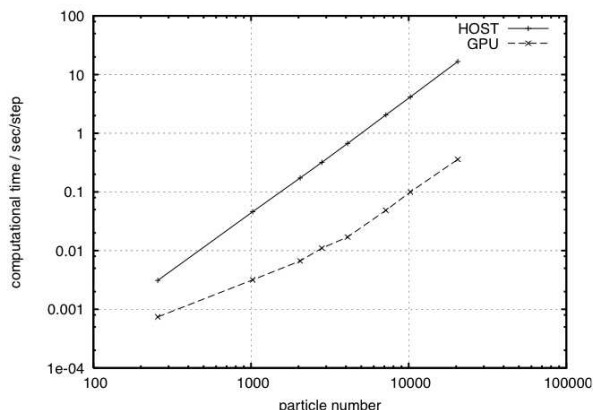


図1 LJ計算の計算速度

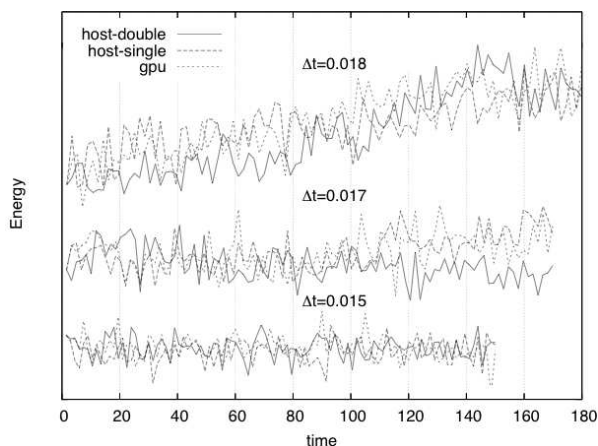


図2 LJ計算における全エネルギーの時間発展

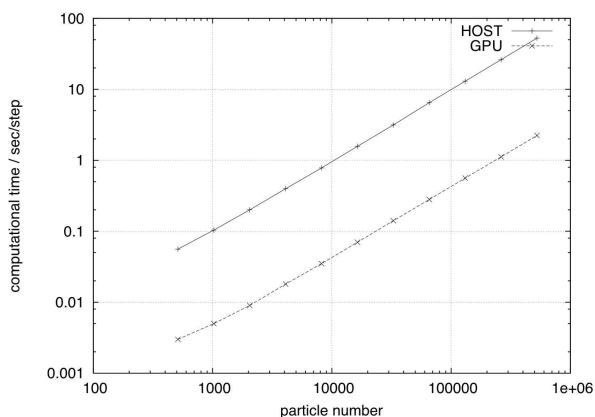


図3 Ewald法波数空間の計算速度