

GPUを用いたフラグメント分子軌道法の高速度化

○西村涼平[†], 古川祐貴[‡], 古賀良太[‡], 平木敬[†]

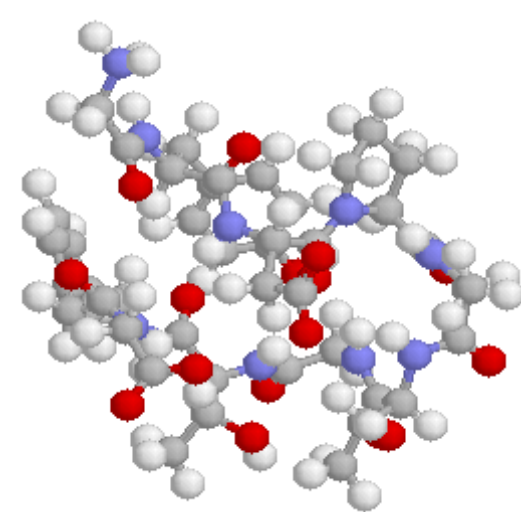
[†]東京大学大学院情報理工学系研究科 [‡]株式会社クロスアビリティ

背景

GPUを汎用計算に用いるGPGPUが、低コストで高い性能を出せる点から、近年注目されている。第一原理量子化学計算においても、GPUを用いた例がいくつかあるが、並列化効率が高く、タンパク質を始めとする巨大分子を実用的な時間で計算できる、フラグメント分子軌道法に対しては、未だに例が無い。

本研究の目的

FMO/MP2のGPGPUアルゴリズムを開発し、複合体1FKFを対象として速度と精度を評価する。



実装

- 行列積をCUBLAS等でGPU上に実装
 - CUBLAS以上に高速な実装を実現した部分は、この高速実装を利用
- 2電子3中心積分と最後のエネルギー計算を、CUDAを用いて実装
 - データは極力GPU上に置き、ホスト・GPU間の転送を削減
- 1, 2の実装に対して、1フラグメント対1スレッドで、OpenMPで並列化

計算アルゴリズム

Hartree-Fock:

McMurchie-Davidson法とRys積分法の2通りで実装を行った。Ufimtsev *et al.* 2008およびYasuda 2007は10~数十倍の高速化を達成しているが、本研究では未達である。

RI-MP2:

MP2法には、近似法であるRI-MP2法を用いた。計算コストの大きい、 $O(N^4) \sim O(N^5)$ の縮約演算には、CUBLAS等を使用して高速に計算する。Vogt *et al.* 2008はこの方法で約4倍の高速化を達成している。

基底関数: 6-31G

補助基底関数: SVP

比較プログラム: GAMESS 2009 Jan.

表1: 評価用分子

| | 1FKF | FKBP | FK506 |
|---------|-------|-------|-------|
| 原子数 | 1789 | 1663 | 126 |
| フラグメント数 | 113 | 107 | 6 |
| 基底の数 | 11668 | 10842 | 826 |

評価

【評価環境】

CPU: Intel Xeon E5520 2.26GHz×2基

GPU: NVIDIA Tesla C1060×4基

OS: Fedora 10 (Linux 2.6.27.5/GCC 4.3.2)

Memory: DDR3-1333 Triple Channel 計12GB

【速度・精度比較】

表2: 複合体1FKFの計算時間(sec)とエネルギー値(a.u.)

| | GAMESS | CPU実装 | 1GPU使用 | 4GPU使用 |
|--------------|------------|------------|------------|------------|
| MP2 | 43205.5 | | | |
| RHF | 33145.2 | | | |
| Perturbation | 10060.3 | 3711.8 | 2190.0 | 662.9 |
| エネルギー | -89.079222 | -89.094754 | -89.154438 | -89.154438 |

表3: レセプターFKBPの計算時間(sec)とエネルギー値(a.u.)

| | GAMESS | CPU実装 | 1GPU使用 | 4GPU使用 |
|--------------|------------|------------|------------|------------|
| MP2 | 35708.9 | | | |
| RHF | 27592.5 | | | |
| Perturbation | 8116.4 | 3248.9 | 1928.3 | 566.6 |
| エネルギー | -83.398488 | -83.413019 | -83.467994 | -83.467994 |

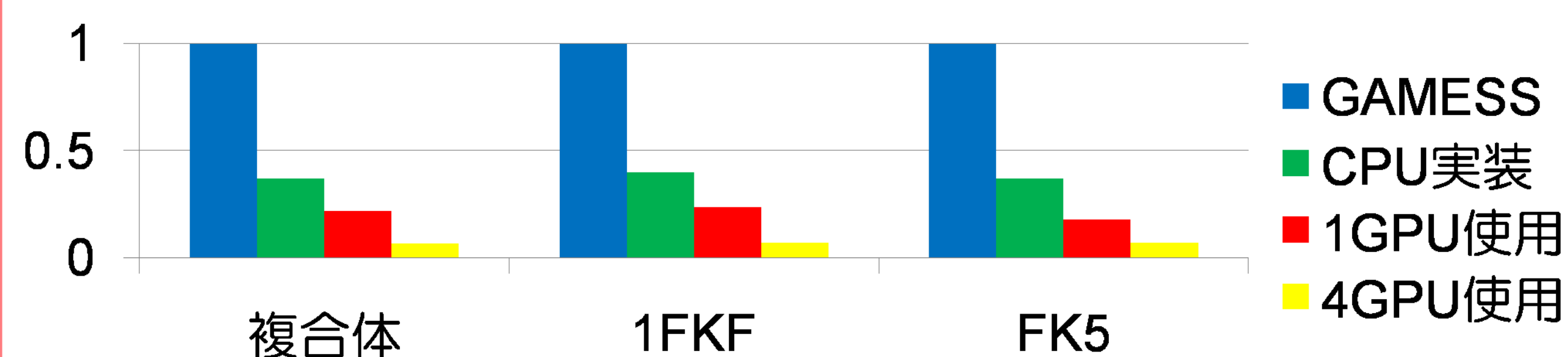
表4: リガンドFK506の計算時間(sec)とエネルギー値(a.u.)

| | GAMESS | CPU実装 | 1GPU使用 | 4GPU使用 |
|--------------|-----------|-----------|-----------|-----------|
| MP2 | 905.7 | | | |
| RHF | 585.3 | | | |
| Perturbation | 320.4 | 118.1 | 57.3 | 21.9 |
| エネルギー | -5.603140 | -5.603970 | -5.604204 | -5.604204 |

※ FMOは1残基1フラグメント、ダイマーまで計算

※ 「GAMESS」「CPU実装」は8スレッド、「1GPU使用」は1スレッド、「4GPU使用」は4スレッドで実行

※ GAMESSはRI-MP2未実装、Conventional MP2を使用



まとめと今後の課題

RI-MP2のCPU実装は、対GAMESS比最大2.71倍の高速化である。GPUの利用により、最大5.59倍の高速化となる。さらにマルチGPU実行より、最大15.2倍の高速化となった。

GPU実装の誤差は最大で 7.52×10^{-2} a.u.であり、RI-MP2近似による誤差とオーダーは同じである。単精度計算による誤差の蓄積より、問題サイズの拡大で誤差が拡大する。マルチGPU化による誤差は、ほとんど無い。

今後の課題は、1. MPIによるマルチノード並列化、2. 既に出回っているLAPACKのCUDA実装を用いた、非GPU化部分の高速化、3. GPUによる2電子積分のさらなる高速化、4. 補助基底関数を自動生成するアルゴリズムの効率化、である。