

準汎用計算機 GRAPE-DR による分子シミュレーションの加速

○松原裕樹^a 安田耕二^b 小池邦昭^c 牧野淳一郎^c 戎崎俊一^a
(理研^a 名大院情報^b 国立天文台^c)

【はじめに】

計算機の高速化とアルゴリズムの発展により、電子状態計算や古典分子動力学計算などの分子シミュレーションで扱える規模は年々大きくなっており、近年では生体分子や機能性材料など、より実用的な計算が行われるようになってきた。そのため分子シミュレーションの需要は急速に拡大しており、今後も計算機能力の向上とともにますます重要となってくるはずである。

近年、科学技術計算のプラットフォームとして SIMD (Single Instruction Multiple Data) 型プロセッサを利用する動きが活発になってきている。広く使われている汎用 CPU では CPU の動作速度に主記憶 (DRAM) のアクセス速度が追いつかないため、CPU 内に高速メモリ (キャッシュ) が大量に必要になり、これがチップ面積の大部分を占めている。これは汎用性を追求した結果であるが、実際の科学技術計算では演算に対して通信の少ない処理を行う特定のルーチンが計算時間のほとんどを占めている例は決して少なくない。例えば、多体粒子系の 2 体相互作用計算に対しては、汎用 CPU は明らかに最適設計ではない。一方で、CPU 内キャッシュを最小限にする (これによって汎用性が犠牲になるため、準汎用という位置づけである) 代わりに多数の演算器を高密度に集積させ、これらの演算器群を SIMD 動作 (単一命令によって動作させ複数データを一斉に処理する) させる超並列演算プロセッサが開発されている。GRAPE-DR はその一例であり、上記のような律速ルーチンをこれに担当させ、他の時間がかからない部分は汎用 CPU で計算することで計算時間を飛躍的に短縮できる。実際に同様のアーキテクチャーを持つ GPU (Graphic Processing Unit) を使用した密度汎関数計算の加速[1,2]や分子動力学計算の加速[3], Cell processor による分子動力学計算の加速[4]などの試みが行われている。分子シミュレーションでは、電子状態計算における 2 電子積分や交換相関項の計算、分子動力学計算におけるペア相互作用や Ewald 和の計算が代表的な律速ルーチンである。これらの計算では分子内力と分子間力の分離や、エネルギースケールの問題から、倍精度演算が要求されることも多い。GRAPE-DR は倍精度計算を高速に行えることと縮約ネットワークを持っているため、これらの計算の加速に適している。我々はこれまでチップシミュレータを用いて、これらが汎用 CPU の 10 倍程度加速できることを示してきた。今回は、評価版ではあるが GRAPE-DR 実機を用いて、2 電子積分計算と古典 2 体力の計算をどの程度加速できるのか評価することを目的とする。

【GRAPE-DR】

図 1 に GRAPE-DR[5]チップの構造を示した。内部に 512 個の PE (Processor Element) を持つ。PE は図 2 のように最小限の演算器及び記憶領域からなり、各演算器の動作及びデータの流れはプログラム可能な命令コードによって指定でき、これによって汎用性が実現されている。これらの PE は 16 の BB (Broadcast Block) と呼ばれるブロックに分割されている。各 BB は 1 つの BM (Broadcast Memory) を持ち、PE はこれを介してデータ及び命令を外部とやり取りする。通常各 PE には異なるデータが配置され、これを同一の命令によって処理していくことで超並列計算を実現する。また、多くの計算では結果の総和をとる必要があるが、各 PE での計算結果はツリー構造を持った縮約ネットワークによってブロック間で和をとりながら効率的にホストに回収することが可能である。動作周波数は 500MHz で 1 チップあたりのピーク演算性能は単精度が 512GFLOPS, 倍精度が 256GFLOPS である。このチップを 4 個搭載した PCI-Express x16 インターフェースの GRAPE-DR ボードが今年度中に量産される予定であるが、今回使用するボードは K&F 社製の model450[6]で、1 チップ搭載、400MHz 動作であり、ピーク性能は単精度で 409.6 Gflops, 倍精度で 204.8 Gflops である。現在、重力多体系以外の計算のために制御回路を調整中で、オンボードメモリが使用できない。このため扱えるデータサイズは最大で 8192 語 (1 語は

72bit)までとなっており、また通信には PCI-Express x4 を使用している。

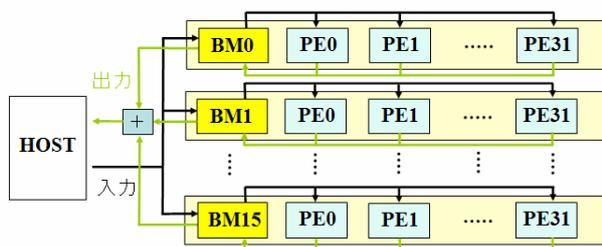


図 1 : GRAPE-DR チップの構造. 32 個の PE (Processor element)と 1つの BM (Broadcast Memory, 1024 語×72bit) が 1つの BB (Broadcast Block)を構成する. BB は 16 個あり、各 BB からのデータ出力を加算する縮約ネットワークを持っている。

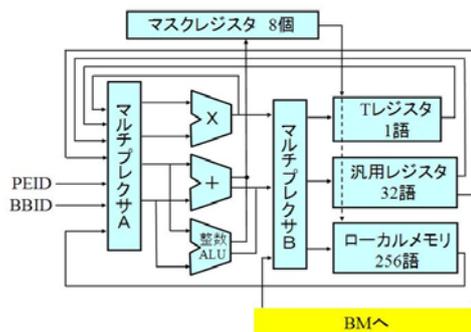


図 2: PE の構造. 浮動小数の加算器と乗算器, ALU(Arithmetic Logic Unit), T レジスタ(1 語), 汎用レジスタ (32 語), ローカルメモリ (256 語), データ流制御用のマルチプレクサ, 条件分岐用のマスクレジスタで構成される。

【GRAPE-DR(model450)によるテスト】

2 電子積分に関して最も単純な(ss|ss)型, 古典 2 体力に関して Lennard-Jones (LJ) 型の計算について, GRAPE-DR とホスト (Core2Quad 2.66GHz, コンパイラとオプションは gcc -O2 で core の並列化はしていない) 計算の比較を行った。

(1) 2 電子積分 : Gauss 型基底関数を使用し, Hermite Gauss 基底に変換した後 Rys 求積法を用いて計算した. この方法は使用メモリが少なく済むため, チップ内で使用可能なメモリが極端に少ない GRAPE-DR に適している. また計算はすべて倍精度である. この計算は Gauss 関数のペアによって作られる shell pair P と shell pair Q 間の 2 体相互作用の形に帰着される. 表 1 の結果は, 任意に選んだ shell pair P 172 粒子×shell pair 768 粒子について(ss|ss)型の積分計算 1 回あたりにかかった時間である. かかった時間はホスト計算の 1/60 程度である。

(2) LJ 力の計算 : こちらは基本的には単精度で計算を行うが, データ入出力は倍精度で行い, 誤差の出やすい $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$ の引き算と最後の加算部分は倍精度で行った. 表 1 の結果は, 1024 粒子での相互作用計算 1 回あたりにかかった時間である. こちらはホスト計算の 1/80 程度の時間で実行できている. ただし, 現状ではこれらの計算ではホストと GRAPE-DR 間の通信が全体の 7-8 割を占めている. これはオンボードメモリの制約から粒子数が充分増やせないことと通信ライブラリの調整中であることが原因であり, これらの改善によってさらなる高速化が望める. 当日は, このあたりのチューニングを行った上での結果を報告する. また, 2 電子積分のより高次の項や Ewald 法の逆空間部分などに対しても言及したい。

表 1 : 計算時間の比較 (sec)

	ホスト (Core2Quad 2.66GHz)	GRAPE-DR (model450)	加速
2 電子積分(ss ss)	0.0599	0.000952	63 倍
古典 2 体力 (LJ)	0.203	0.00234	87 倍

[1] K. Yasuda, J. Comput. Chem. **29**, 334 (2008).

[2] K. Yasuda, J. Chem. Theory Comput., published online July 4 (2008).

[4] <http://www.ks.uiuc.edu/Research/gpu/>

[3] T. Narumi, S. Kameoka, M. Taiji, K. Yasuoka, SIAM J. Sci. Comput., *in press*.

[5] <http://grape-dr.adm.s.u-tokyo.ac.jp/>

[6] <http://www.kfcr.jp/gdr450.html>