

1P085

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・エコトピア科学研究所）

【要旨】

汎用 CPU より 1 桁価格性能比に優れる Graphics Processing Unit (GPU) を使って、量子化学計算を高速化した。参考文献 [1,2] をもとに、各種量子化学計算ソフトに結合可能な GPU 計算エンジンである 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、通常の ab-initio 計算やフラグメント分子軌道法計算を高速化した。XA-CUDA-QM は以下のような機能を備えている。

【機能】

- ・ 密度汎関数(DFT)法、ハートリー・フォック法によるエネルギー及び構造最適化計算
- ・ OpenMP によるマルチコア、マルチ GPU に同時に対応
- ・ 各種汎関数、基底関数対応、GPU 未対応機能は CPU で実行
- ・ 既存の GAMESS、Gaussian のインプットファイルをそのまま使用可能
- ・ 計算負荷のほとんどを占める部分、つまり二電子積分(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 GPU で加速

【結果】

Valinomycin 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。インプットファイルは Gaussian の Test397 を使用した。Gaussian03 に対して現状では 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。エネルギー誤差は事実上問題にならない程度である。

表 1 : Valinomycin(C₅₄H₉₀N₆O₁₈)での計算時間の比較 (3-21G 基底、blyp 汎関数)

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

CPU: Intel Xeon E5540 2.53 GHz 8 core、GPU: Tesla C1060 x 2、

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

フラグメント分子軌道法(FMO)[6]ではアミノ酸 1~2 残基を多数並列に計算する。これら基底サイズが小さい対象では通信量に比べ計算量がそれ程多くないため高速化が難しい。小分子では Ufimtsev ら研究[6]に基づく TeraChem[5]では CPU より遅くなる事が分かっている。最も困難なハートリー・フォック交換項 (K 行列) を求める新しいアルゴリズムを開発し、現時点で CPU 1 core に対し 20 倍程度の高速化を実現したので表 2 に示す。Ufimtsev らの先行研究[6]では 2 電子積分対称性の一部しか使えなかったが、我々の新アルゴリズムでは対称性を完全に使っている。また、実装時の Fermi アー

キテクチャに新規搭載された L1/L2 キャッシュを活用している。アルゴリズムの詳細は当日発表する。

表 2 : K 行列の計算時間 (1CPU vs 1GPU)

Software Processor	GAMESS Core 2	GAMESS Xeon	GAMESS + XA-CUDA-QM GTX470(Fermi)
Glycine	0.161	0.171	0.013
Glutamine	1.425	1.44	0.098
Tryptphan	4.415	4.393	0.275

さらに、6つに分割した FK5 リガンド分子を GAMESS の FMO2 で計算した結果を以下に示す。RHF 法と 6-31G 基底を用いた。表 3 で、CPU とは Core i7 860 2.80GHz×4 core を使い、GPU ではそれに GTX470×1 を加えた。GAMESS2009 は gfortran + Atlas でコンパイルした。

表 3 : FMO2 の FK5 リガンド分子の各フラグメントの monomer 特性

	E (CPU)	E (GPU)	DX	DY	DZ
1(FK5001 L1)	-402.317404135	-402.317404147	-0.20994	4.36026	1.16317
2(FK5002 L1)	-459.054761634	-459.054761645	6.7929	0.2928	-3.10568
3(FK5003 L1)	-466.843941102	-466.843941089	1.02059	-1.28229	-2.07834
4(FK5004 L1)	-293.669434284	-293.669434291	-1.14973	-1.54089	1.95314
5(FK5005 L1)	-407.321099998	-407.321099990	-2.14597	1.88929	-3.06977
6(FK5006 L1)	-537.570750054	-537.570750051	-2.58186	2.29468	-1.05552

表 3 から分かるように、フラグメントのエネルギーは事実上完全に一致した。また双極子モーメント (DX, DY, DZ) は完全に一致した。FMO エネルギーは、-2657.853462811 (CPU) と、-2657.853429457 (GPU) であり、誤差は 3.3×10^{-5} a.u. であり、事実上無視できる。また現時点での計算時間は dimer の scf 計算も含め、CPU 986.7 秒に対し、GPU 378.3 秒だった。

【今後の展望】

K 行列の大規模サイズ対応および Tesla C1060 対応、CPU コードの SSE 化、MP2 および d 軌道対応 ERI の GPU 高速化、2CPU-2GPU の分割、および GAMESS DFT の I/F の開発を予定している。

【参考文献】

- [1] Yasuda, K. *J. Comput. Chem.* **2008**, *29*, 334-342.
- [2] Yasuda, K. *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
- [6] Ufimtsev et al., *J.Chem.Theory.Comput*, 2009, *5*, 2619-2628
- [7] D. G. Fedorov, K. Kitaura, in "Modern methods for theoretical physical chemistry of biopolymers", E. B. Starikov, J. P. Lewis, S. Tanaka, Eds., pp 3-38, Elsevier, Amsterdam, 2006.