

平成 22 年 5 月 31 日現在

研究種目：若手研究（B）
 研究期間：2008～2009
 課題番号：20700031
 研究課題名（和文） 準汎用計算機向け拡張GRAPEライブラリの開発
 研究課題名（英文） Development of Enhanced GRAPE library for
 Quasi general-purpose Computer
 研究代表者
 成見 哲（NARUMI TETSU）
 電気通信大学・電気通信学部・准教授
 研究者番号：10342825

研究成果の概要（和文）：分子動力学シミュレーションや渦法による乱流シミュレーションに使うために、専用計算機 MDGRAPE のライブラリを拡張して汎用計算機（PLAYSTATION 3 や GPU）向けのライブラリを開発した。最初に MDGRAPE-3 用ライブラリである MR3 ライブラリを PS3 や GPU に対応した。また、PS3 では粒子数が多いときは並列化により更に高速化が達成できた。GPU では渦法による乱流シミュレーションのために複数枚使って計算を更に高速化した。

研究成果の概要（英文）：I have extended a library program from MDGRAPE special-purpose computer to quasi general-purpose computer (PLAYSTATION 3 and GPU) for molecular dynamics and turbulence simulations with vortex method. First, new MR3 library, which is the library program for MDGRAPE-3, has supported PS3 and GPU. Second, Parallel PS3s further accelerated MD simulations for large number of particles. Third, parallel GPUs further accelerated turbulence simulations with the vortex method.

交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合 計
2008 年度	1,200,000	360,000	1,560,000
2009 年度	2,100,000	630,000	2,730,000
年度			
年度			
年度			
総 計	3,300,000	990,000	4,290,000

研究分野：総合領域

科研費の分科・細目：情報学・ソフトウェア

キーワード：並列処理・分散処理

1. 研究開始当初の背景

科学技術計算を高速化する手法として専用計算機 GRAPE・MDGRAPE はそれをここ 20 年に渡ってかなり成功させたプロジェクトであると言える。重力多体問題や分子動力学シミュレーションに特化した専用のハードウ

ェアを開発することで高性能を実現してきた。しかし近年の ASIC (Application Specific Integrated Circuit) の開発費は、半導体製造コストの上昇により研究者が詳細設計したとしても 10 億円を超えており、GRAPE のようなアプローチの継続が難しくなっている。一方近年ゲーム用の計算機

(PLAYSTATION 3 や GPU) が汎用計算に使えるようになってきた。これらの計算機を科学技術計算に有効に使うことができれば、これまで以上にコストパフォーマンスを向上させることが期待される。

2. 研究の目的

本研究では、グラフィックカードやゲーム機などの準汎用的な計算機を効率的に粒子ベースの科学技術計算に適応できるライブラリプログラムを開発する。そして分子動力学シミュレーションや渦法などのプログラムを加速する。

3. 研究の方法

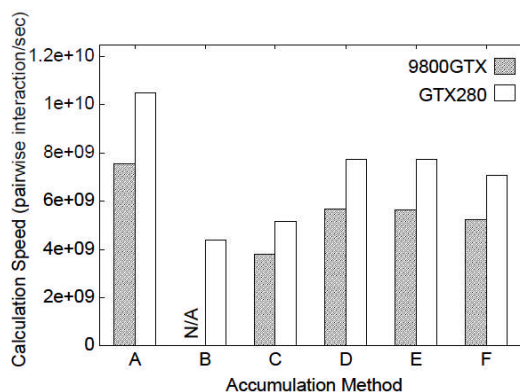
まず、PLAYSTATION 3 と NVIDIA のグラフィックカードを使用して、拡張 GRAPE ライブラリの基本部分を開発する。その際主に分子動力学シミュレーションに使える機能を実装する。次に、並列化して複数ノードに対応し、渦法や境界要素法などの分子動力学シミュレーション以外でも使えるように拡張する。

4. 研究成果

平成 20 年度は、ライブラリの基本部分を開発した。GPU を搭載した PC を購入し、MDGRAPE-3 用の MR3 ライブラリの互換ライブラリを、GPU と PLAYSTATION 3 (PS3) 向けに開発した。MR3 ライブラリは、研究代表者が以前に開発した MDGRAPE-3 用のライブラリである。MDGRAPE-3 に特化したライブラリであるが、このライブラリ互換にすることで動作するアプリケーションがいくつかある。例えば、AMBER や CHARMM などの生体高分子の分子動力学シミュレーションによく使われるプログラムを動かすことが出来る。

その際注意しなければならないのは計算精度である。GPU や PS3 では基本的に単精度しか高速に演算出来ないため、複数の単精度変数を組み合わせて精度を向上させる方法を実装した。図 1 にこの方法 (擬似倍精度) を用いた分子動力学シミュレーションの計算速度の比較を示す。方法 A は単精度演算のみのため高速だが計算精度が悪い。方法 B は一部倍精度演算を行うため計算精度は良いが計算速度が遅くなる。提案手法の方法 F は計算精度が方法 B と同等である上に計算速度が速い。

図 1 : 擬似倍精度の速度
(T.Narumi et al., Proc. HPCAsia09)



次に MDGRAPE-3 では計算出来ないような粒子間相互作用も計算できるようにした。例えば MDGRAPE-3 では、ペアの原子種の組み合わせに応じてパラメータを変化させることができるが、そのパラメータの数は 2 個までしか対応しない。Lennard Jones のような典型的な分子間力の形であれば問題がないが、例えば Tosi Fumi ポテンシャルでは 4 つのパラメータが必要になる。GPU を用いることで Tosi Fumi ポテンシャルを使いながらも効率的に NaCl の分子動力学シミュレーションを加速した。

平成 21 年度は、平成 20 年度に開発したライブラリを拡張した。一つは並列化に対応させたことである。PS3 用には、MR3 ライブラリを並列化し AMBER による分子動力学シミュレーションを複数台の PS3 で加速した。3 万粒子のシミュレーションでは 16 台の PS3 を用いることにより 7 倍程度加速されたが、逆に 1 万粒子では台数が 8 台を超えると加速しなくなった。これは PS3 のネットワークが比較的低速であるためである。

もう一つの拡張は GPU を用いて渦法に対応したことである。渦法は乱流の直接計算の手法の一種であり、Fast Multipole Method を用いることで計算量を $O(N)$ にまで減らせることが特徴である。MDGRAPE-3 を用いた実装は以前からあったが、専用計算機であるため何倍も無駄な計算を行う必要があった。今回 GPU を用いることで無駄な計算を省いた。

これらの拡張を応用して、GPU を用いた渦法による一様等方性乱流の大規模シミュレーションを行った。64GPU を用いて \$9.4/\text{Gflops}\$ を達成し、通常の PC に比べて一桁以上コストパフォーマンスに優れた計算を行うことが出来た。

コンシューマー向け GPU は現在でも倍精度計算は遅い。このため、なるべく単精度計算を使って精度良い計算を行う手法に対し期待が高まっている。実際いくつかの会議での発表では精度に関する質問が多くあった。

GPU を並列化することに関しては世界的にリードしていると考えられる。特に 2009 年

の国際会議 SC2009 の論文では、長崎大学と協力して並列に GPU で計算し、世界で最もコストパフォーマンスがよかったとしてゴールドンベル賞を受賞した。

今後は汎用計算機の中でも GPU が更に普及すると考えられるが、科学技術計算以外の分野でも使われるためにはまだ敷居が高いようである。使い勝手の良い開発環境が望まれていると考えられる。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

〔雑誌論文〕 (計 7 件)

- ① Noriaki Okimoto, Noriyuki Futatsugi, Hideyoshi Fuji, Atsushi Suenaga, Gentaro Morimoto, Ryoko Yanai, Yousuke Ohno, Tetsu Narumi, Makoto Taiji, High-Performance Drug Discovery: Computational Screening by Combining Docking and Molecular Dynamics Simulations, PLoS Computational Biology, 査読有, vol. 5 (10), e1000528, (2009).
- ② E. Dushanov, Kh. Kholmurodov, G. Aru, V. Korenkov, W. Smith, Y. Ohno, T. Narumi, G. Morimoto, M. Taiji, and K. Yasuoka, JINR CICC in Computational Chemistry and Nanotechnology Problems: DL_POLY Performance for Different Architectures, Physics of Particles and Nuclei Letters, 査読有, vol. 6(3), p. 251, (2009).
- ③ Tetsu Narumi, Kenji Yasuoka, Makoto Taiji, Siegfried Hofinger : Current Performance Gains from Utilizing the GPU or the ASIC MDGRAPE-3 within an Enhanced Poisson Boltzmann Approach, Journal of Computational Chemistry, 査読有, vol. 30, p. 2351 (2009).
- ④ 坂牧隆司, 成見哲, 泰岡顕治: グラフィックカードを用いた水表面張力の高速分子動力学シミュレーション, 情報処理学会論文誌コンピューティングシステム, 査読有, Vol.2, No.2, pp. 89-97, (2009).
- ⑤ Yokota, R., Narumi, T., Sakamaki, R., Kameoka, S., Obi, S., and Yasuoka, K., "Fast Multipole Methods on a Cluster of GPUs for the Meshless Simulation of Turbulence", Comput. Phys. Comm., 査読有, vol. 180, p. 2066 (2009).
- ⑥ Tetsu Narumi, Shun Kameoka, Makoto

Taiji, Kenji Yasuoka: Accelerating Molecular Dynamics Simulations on PLAYSTATION 3 Platform Using Virtual-GRAPE Programming Model, SIAM Journal on Scientific Computing, 査読有, vol. 30, No. 6, pp. 3108-3125 (2008)

- ⑦ Toshiki Mima, Tetsu Narumi, Shun Kameoka, Kenji Yasuoka: Cell Size Dependence of Orientational Order of Uniaxial Liquid, Molecular Simulation, 査読有, vol. 34, pp. 761-773, (2008)

〔学会発表〕 (計 5 件)

- ① Tetsu Narumi, Achieving Enough Accuracy without Double-Precision Hardware to Accelerate Molecular Dynamics Simulations with GPUs, 2nd International Workshop on Advances in Computational Mechanics (IWACOM-II), Mar. 31, Yokohama, Japan, (Mar.31, 2010)
- ② Tsuyoshi Hamada, Rio Yokota, Keigo Nitadori, Tetsu Narumi, Kenji Yasuoka, Makoto Taiji, Kiyoshi Oguri, 42 TFlops Hierarchical N-body Simulations on GPUs with Applications in both Astrophysics and Turbulence, Proceedings of the SC2009, 査読有, USB memory, Portland, USA, (Nov.18, 2009).
- ③ Tetsu Narumi, Tsuyoshi Hamada, Keigo Nitadori, Ryuji Sakamaki, Shun Kameoka, Kenji Yasuoka: High-Performance Quasi Double-Precision Method using Single-Precision Hardware for Molecular Dynamics Simulations with GPUs, Proceedings of HPC Asia 2009, 査読有, pp. 160-167, Kaohsiung, Taiwan, (Mar.3, 2009)
- ④ Tetsu Narumi, Ryuji Sakamaki, Shun Kameoka, Kenji Yasuoka: Overheads in Accelerating Molecular Dynamics Simulations with GPUs, Proceedings of the 9th International Conference on Parallel and Distributed Computing, Applications, and Technologies (PDCAT'08), 査読有, pp. 143-150, Dunedin, New Zealand, (Dec.3, 2008)
- ⑤ Tetsu Narumi, Ryuji Sakamaki, Shun Kameoka, Kenji Yasuoka: Using Special-Purpose and Video-Game Computers for Accelerating Molecular Dynamics Simulations, International Workshop on Molecular Simulation Studies in Material and Biological

Sciences, Dubna, Russia, (Sep. 12, 2008).

6. 研究組織

(1) 研究代表者

成見 哲 (NARUMI TETSU)

電気通信大学・電気通信学部・准教授

研究者番号：10342825

(2) 研究分担者 なし

(3) 連携研究者 なし