

- 共同利用 成果報告書 平成 21 年度 課題種別

利用課題名 CUDA を用いた GPU によるフラグメント分子軌道法の高速化  
英文: Acceleration of Fragment MO method using CUDA on GPGPU

利用課題責任者 古賀良太  
First name Surname Ryota Koga

所属 株式会社クロスアビリティ  
Affiliation X-Ability Co.,Ltd.  
URL <http://x-ability.jp/>

#### 邦文抄録

本プロジェクトでは、GPGPU による高速量子化学計算ソルバーを CUDA を用いて開発し、TSUBAME 上の NVIDIA Tesla C1060 で実行することを目標とした。具体的には、二電子積分など計算負荷の大きい部分を GPGPU で高速化した、各種量子化学ソフトウェアに結合可能な汎用量子化学モジュールである“XA-CUDA-QM”を開発し、著名な量子化学ソフトウェアである GAMESS, Gaussian に結合し、TSUBAME 上での評価を試みた。具体的には、GAMESS + XA-CUDA-QM による FMO、および独自開発済の GPGPU FMO/RI-MP2 ソフトウェアを Gaussian + XA-CUDA-QM に結合、および評価を試みた。

#### 英文抄録

The purpose of this project is the evaluation of GPGPU original high-performance QM software developed using CUDA on TSUBAME. The original software “XA-CUDA-QM” is developed for add-on to all sorts of QM softwares, and accelerate ERI etc. We tried to connect the software to famous QM softwares for the purpose of FMO Acceleration, and evaluate both of GAMESS + XA-CUDA-QM and original GPGPU FMO/RI-MP2 + Gaussian + XA-CUDA-QM.

*Keywords:* GPGPU, QM, CUDA, ERI, FMO

#### 背景と目的

計算機性能の目覚ましい向上と、タンパク質をはじめとする巨大分子も扱える分子軌道計算法の開発により、生体分子にも第一原理分子軌道計算が適用できるようになってきた。近年 Graphics Processing Unit (GPU) を搭載したグラフィックカードを汎用目的 (General Purpose) の計算に利用する GPGPU 計算が普及し始めて来ている。特に NVIDIA 社による CUDA 開発環境を用いて様々な計算機シミュレーションが高速化されつつある。

主に製薬業界において、FULL-QM スクリーニングを指向した量子化学計算によるバーチャルスクリーニングが待望されているが、主に速度面で実用段階に達しておらず、研究開発工程に量子化学計算が入り込めていない。しかし近年のハードウェアの低価格化・高速化、およびアッセイの手間を減らす自動リキッドハンドリングシステムの導入に伴い、計算化学的手法によるバーチャルスクリーニングによる事前選定の期待が以前にも増

して高まっている。

世界最高レベルのスーパーコンピュータ TSUBAME を用いて、高電力効率、かつ原子・分子レベルの現象に基づく薬品開発に関する計算を行うことは、マルチ GPGPU による FULL-QM スクリーニングを実施するための礎となり産業界からバーチャルスクリーニング実用化の期待に応えるものである。

以下、TSUBAME 利用にあたり遭遇した問題点について述べる。

実装に関しては、弊社が独自に所有している GPGPU サーバで開発しており、問題は起きていない。GPGPU による HF 交換項のインターフェース開発以外は、ほぼ計画通りに進行したといえる。ただ、TSUBAME で同プログラムをインタラクティブノードで並列実行するに当たり、関連ソフトウェアなどの設定に問題が頻発し、TSUBAME 上で開発プログラムを適切に実行できなかったということが一番の問題点として挙げられ、結果として TSUBAME における評価がほとんど

## (様式第 20) 成果報告書

どできなかった。具体的には、例えば、mpicxx(PGI コンパイラ)でコンパイルしたオブジェクトファイルと、nvcc でコンパイルしたオブジェクトファイルのリンクができず、既開発済の FMO/RI-MP2 (MPI & OpenMP & CUDA)[1]ソフトウェアの並列計算を流すことができずに終了した。

本報告書では、FMO の GPGPU による高速化の根幹となる、量子化学計算の GPGPU による高速化に焦点を当てた。名大・安田が既に確立した手法[2][3]である、J Matrix Engine と FMM を用いた GPGPU モジュールに HF 交換項などの新しい機能を追加し、CPU とのハイブリッド計算を可能とした”XA-CUDA-QM”[4]を開発した。これにより、FMO の GPGPU 高速化に必要な最も困難な部分に目処がついたといえる。将来、XA-CUDA-QM を GAMESS に結合することで FMO GAMESS が高速化でき、更に弊社が過去に開発した GPGPU による FMO/RI-MP2 ソフトウェアと Gaussian を XA-CUDA-QM に結合することで FULL-QM スクリーニングに必要な要素である、FMO MP2/6-31G\*以上の量子化学計算が可能になる。

### 概要

各種量子化学計算ソフトウェアを加速する汎用 GPGPU モジュール”XA-CUDA-QM”を開発し、Gaussian03[5]に結合してパフォーマンス測定を行った。弊社所有マシンともパフォーマンス比較した。

XA-CUDA-QM に具体的に実装した機能は以下のようなものである。

- ・ 密度汎関数 (DFT) 法、ハートリー・フォック法による電子状態計算
- ・ 構造最適化 (エネルギー勾配) 計算
- ・ マルチコア、マルチ GPGPU に対応
- ・ 各種汎関数、基底関数対応
- ・ 既存の GAMESS[6]、Gaussian のインプットファイルをそのまま使用可能
- ・ 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 GPGPU で加速

### 結果および考察

Valinomycine の密度汎関数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、2 に示す。弊社保有マシン(表 1)では、Gaussian03 に対しては、2~3 倍程度の高速化、同様に GPGPU を用いたソフトウェアである TeraChem[7]に対しても優位な速度での計算を達成した。インプットファイルは Gaussian の Test397 を基にした。なお、Gaussian, GAMESS のビルドについては、Intel Fortran Compiler 11.1/CUDA 2.3/Intel Math Kernel Library 10.2 を用いている。TSUBAME(表 2)では、Gaussian のビルドは PGI Fortran / CUDA 2.2 / ATLAS で行ったため、弊社保有マシンで評価した Intel 系でビルドした場合よりもパフォーマンスよりは落ちているが、CPU に比べて同様の高速化を見せた。

表 1: パフォーマンス測定比較(弊社保有マシン)

	時間[秒]	収束エネルギー[a. u.]
Gaussian 03 rev. B.01	289.93	-3772.609959
GAMESS 2009 Jan	3819.50	-3772.609882
TeraChem beta3 (1GPGPU)	192.76	-3772.608483
Gaussian + XA-CUDA-QM (1GPGPU)	<b>124.96</b>	-3772.609078
Gaussian + XA-CUDA-QM (2GPGPU)	<b>113.80</b>	-3772.609077

密度汎関数は blyp、3-21G 基底を使用

実行環境は、CPU: Intel Xeon E5540 2.53 GHz 8 core

GPGPU: Tesla C1060 x 2

表 2: パフォーマンス測定比較(TSUBAME)

	時間[秒]	収束エネルギー[a. u.]
Gaussian 03 rev. B.01	1159.09	-3772.609959
Gaussian + XA-CUDA-QM (2GPGPU)	<b>407.52</b>	-3772.609077

密度汎関数は PBE/PBE、3-21G 基底を使用

実行環境は、CPU: AMD Opteron 2.4 GHz 4 core

GPGPU: Tesla C1060 x 2

## (様式第 20)成果報告書

### まとめ、今後の課題

各種量子化学計算を高速化する汎用 GPGPU モジュール XA-CUDA-QM を開発し、CPU で最速である Gaussian と結合しパフォーマンス測定比較することで、Valinomycine のエネルギー勾配計算が TSUBAME の GPGPU ノードで3倍程度高速化することを確認した。

今後の課題は、GAMESS FMO on GPGPUを可能にするために、GAMESS へ XA-CUDA-QM を結合したものを GPGPU クラスタで評価し、1フラグメント1残基のサイズが小さい場合においてもCPU マルチコアに比して高速化させることである。将来は、FMO から得られたエネルギー値を別途開発中のエネルギー表示法による自由エネルギー計算 (Energetic Representation : ER)モジュールに組み込み、GPGPU による FMO-MD-ER という高精度自由エネルギー計算ソフトウェアを開発し、製薬企業の研究開発工程に利用してもらうことである。

### 参考文献

- [1] 2009 日本コンピュータ化学会・春季年会 ポスター資料2P09
- [2] Yasuda, K., *J. Comput. Chem.* **2008**, *29*, 334-342.
- [3] Yasuda, K., *J. Comput. Chem.* **2008**, *4*, 1230-1236.
- [4] 2010 日本コンピュータ化学会・春季年会 ポスター資料 2P07
- [5] M.J.Frisch, et al, Gaussian,Inc., Wallingford CT, 2004.
- [6] M.W.Schmidt et al., *J. Comput. Chem.*, **14**, 1347-1363(1993)
- [7] TeraChem beta3, PetaChem,LLC, Los Altos Hills, CA, 2009