TSUBAME 共同利用　平成 26 年度　学術利用　成果報告書

利用課題名　仮想 GPU を用いた分子動力学シミュレーションコードの開発と評価
英文：Development of Molecular Dynamics Simulation Program using Virtualized GPU

利用課題責任者　泰岡 顕治
Kenji Yasuoka

所属　慶應義塾大学理工学部機械工学科
Department of Mechanical Engineering, Keio University
URL　http://www.yasuoka.mech.keio.ac.jp

邦文抄録（300 字程度）

前年度から継続して GPU を使用した分子動力学シミュレーションコードの大規模並列化に取り組んだ．大規模並列計算を行う系として相転移現象に関して検討した．相転移現象のシミュレーションは大量の計算が必要であることが知られている．そこで，我々は，相転移現象をシミュレーションするために新たなシミュレーション手法を開発し，その有用性を検証した．今年度における予定に含まれていた GPU 用の分子動力学シミュレーションコードを用いての相転移現象の分子動力学シミュレーションは実施することができたが，FMM を使った大規模な並列計算はできなかった．

英文抄録（100 words 程度）

We continued the development of largely parallelized program of molecular dynamics (MD) simulation using multiple GPU devices. We performed the molecular dynamics simulation of liquid-solid phase transition simulation by using GPU devices. In addition, we propose the new simulation method for phase transition simulation. We analyzed the performance of new simulation method, then we found that the phase transition frequencies increases by using our method.

We have performed the MD simulation for the phase transition. However the large-scale MD simulation with FMM which we planned has not been performed.

Keywords: virtualization, Graphics Processing Unit, phase transition, molecular dynamics simulation

背景と目的

近年の高性能計算機には，複数のプロセッサコアを同一パッケージあるいは独立したハードウェアアクセラレータとして搭載した計算ノードを高速なネットワークで相互に接続したものが多く見られる．　多数の計算ノードから構成される計算機クラスタ向けのアプリケーションを効率よく開発し，性能を引き出すことは困難さを伴うことが多い．GPU（Graphics Processing Unit)は，名前の示すとおり画像データ処理専用に開発されたプロセッサであるが，その並列演算処理性能が注目され，高性能計算機の分野に特化したGPGPU（General Purpose GPU)向けの製品が開発され，現在では数値演算用ハードウェアアクセラレータとして広く利用されるようになった．　GPUを扱うプログラムを開発するためにはCUDA（Compute Unified Device Architecture)と呼ばれるC/C++またはFortranの拡張言語，あるいはOpenACCやOpenCLとよばれるフレームワーク等を利用することが多い．　またネットワークで相互に接続されている複数の計算ノード上で並列計算を行うためにMPI（Message Passing Interface）を使用することが現在主流となっている．

GPUを含む計算機クラスタ上のアプリケーションを効率よく開発・利用するためにはこれらの開発環境に通じ，クラスタ全体の計算速度性能を引き出す手法も要求されることから，計算機それ自体を専門とはしない利用者にとって開発の敷居が低いとは言えない．

本プロジェクトでは，GPU仮想化ミドルウェアを開発し，それらの機能をミドルウェア上の機能として実装しユーザから隠蔽することにより上記で述べたアプリケーション開発上の困難さを低減することを目指している．

本年度は，相転移現象シミュレーションに焦点をあてる．相転移現象のシミュレーションでは温度が少しずつ

違うシミュレーションを大量に実行する必要があり，大規模な計算が要求される．我々は，GPU用分子動力学シミュレーションコードを利用し，一次相転移現象シミュレーションのために新しい計算手法を開発し，GPU仮想化ミドルウェアDS-CUDAを用いてシミュレーションを行った．

概要

開発したGPU用分子動力学シミュレーションコードに，開発した計算手法を実装し，従来手法との計算速度の比較を行った．より効率的にシミュレーションを行うために，新しい計算手法を提案しシミュレーションコードに実装した．これにより，相転移現象のシミュレーションを高速に行うことが可能になったことを意味し，より効率的に計算を行うことができるようになったことを意味する．

また，FMM を用いた大規模な並列計算に関しては，GPU 並列時の計算精度面の課題を解消できず計算実施まで至れなかった．今後も継続予定である．

結果および考察

図1に，従来手法でのシミュレーション中のエネルギーの経時変化を示す．温度の少しずつ違う 252 個のシミュレーションを同時に実行し，シミュレーション途中で温度を入れ替える手法を使用している．これはレプリカ交換法[1]という．これは，レナードジョーンズ粒子の固液相転移シミュレーションの結果である．レナードジョーンズ粒子は，エネルギーが －1500 付近では液体構造をとり，エネルギーが －1800 付近では固体構造を取る．エネルギーが －1700 付近には，白い領域がある．このエネルギーが －1700 付近の領域では，固体から液体や液体から固体への相転移現象が起こる領域である．したがって，このエネルギー －1700 付近の領域が白いことは，相転移現象が極まれにしか起こっていないことを意味する．

次に，開発した手法でのシミュレーション中のエネルギーの経時変化を示す．計算条件などは図 1 の場合と同じである．図 1 では，エネルギーが －1700 付近ではあまり計算されていなかったが，図 2 ではより高い頻度で計算されている．そこで，この 2 つのシミュレーション中に起こった相転移現象の回数を数えた結果，シミュレーション条件にもよるが，従来手法のおよそ 5 倍程度高い頻度で相転移現象が観測された．

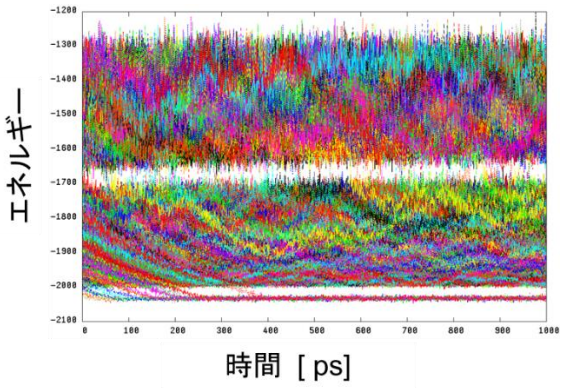

図 1 シミュレーション中の粒子のエネルギーの経時変化(従来手法)

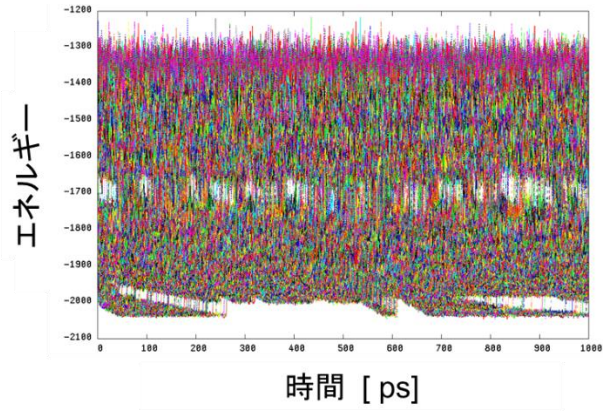

図 2 シミュレーション中の粒子のエネルギーの経時変化(提案手法)

まとめ，今後の課題

相転移現象に向けた計算手法を新しく開発し，従来手法との計算速度の比較を行った．その結果，開発した手法は従来手法と比較して計算速度が高速であることがわかった．この結果は，GPU の計算資源をより効率的に利用することができることを意味する．

FMM を用いた大規模な分子動力学シミュレーション用コードの開発は，精度の面で問題がありで開発が遅れているが，継続して開発に取り組んでいく．

[参考文献]

[1] Sugita, Y., & Okamoto, Y. (1999). Replica-exchange molecular dynamics method for protein folding. Chemical Physics Letters, 314(1-2), 141–151.