

Title	量子モンテカルロ計算の高速化に関する研究
Author(s)	寺島, 義晴
Citation	
Issue Date	2010-03
Type	Thesis or Dissertation
Text version	author
URL	http://hdl.handle.net/10119/8922
Rights	
Description	Supervisor:前園 涼, 情報科学研究科, 修士

量子モンテカルロ計算の高速化に関する研究

寺島 義晴 (0810040)

北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科

2010年2月9日

キーワード: QMC, FMO, GPGPU, CUDA.

本研究は、計算シミュレーション分野にて分子や原子を対象とした電子状態計算の一手法である量子モンテカルロ (QMC) 計算の計算コードについての高速化に関する研究を扱う。量子モンテカルロ法は他手法に比べて電子の多体効果について、より実直に取扱う手法であり、電子の多体効果が重要となる生体分子系などのエネルギー計算において、有用な手法とされる。生体分子の中でも、タンパク質やDNAといった生体高分子と呼ばれる大規模分子系では、規模が大きすぎるために計算困難という問題がある。この大規模分子系を分割し、小規模の系 (フラグメント) に分割することで計算可能にする手法として、フラグメント分子軌道法がある。これを量子モンテカルロ計算に適用した計算コードにより、大規模分子系は計算可能となるが、フラグメント化に呼応する余分の処理が原因となって、通常の量子モンテカルロ計算に比べて50倍程度遅くなるという問題が起きている。本論文では、上記の問題に対して、画像処理演算装置 (GPU) を用いた高速化による改善を試み、実装を行なった結果と考察について述べる。実験には、FMO法を扱う上でのベンチマーク的な系であるグリシン三量体の最小フラグメントを対象系として据え、FMO-QMC計算を行ない、その計算精度と計算時間について比較を行なった。

実験の結果、精度上ではCPUとGPUの間には $\pm 1.0 \times 10^{-12}$ 程度の誤差しか現れず、単一プロセス上で計算を行なった場合では7.2倍、CPU内4並列の場合との比較では1.8倍GPUの計算速度が速くなることがわかった。

今回実験に用いたCPU (Intel Core i7 920) とGPU (GeForce GTX275) の倍精度実数演算に関する理論性能はそれぞれ、44.8 GFLOPS、84.24 GFLOPSとなっており、この比は上記で達成された比にほぼ一致する。この結果より、FMO-QMC計算の計算時間が倍精度演算に対する処理能力にスケールされると予測されるので、倍精度演算の性能が高いGPUを用いることで、更なる高速化を図ることが期待される。GPUの開発メーカーの一つであるNVIDIA社は、倍精度演算において624 GFLOPSの理論性能を持つとされる次世代GPUアーキテクチャ「Fermi(フェルミ)」に基づくGPUを発表しており、GPGPUによる高速化の展望は明るいと思われる。

現状、1つのノードに対して1台のGPUを割り当てているので、1つの計算ノード上ではFMO-QMC計算プロセスは現在1つしか実行出来ない。そのため、CPU上の利用していないプロセッサコアが空き状態となっている。このプロセッサコア上にて、GPU上の計算とは独立である計算をOpenMPなどの並列化プログラミングを用いて同時並行に行なえるようにすることで、1ノード辺りの計算時間は更に削減可能だと考えられる。また、現行のGPUは、単精度演算器が倍精度演算器の8倍搭載されているので単精度実数演算能力が非常に高い。よって、単精度実数による演算に精度を落としても結果の精度に影響を及ぼさない箇所については単精度実数にて演算させることで、高速化を図ることも可能と考える。