

分子動力学シミュレーター-LAMMPS の GPU による高速化

大塚 順

住友電気工業株式会社 解析技術研究センター

1. はじめに

分子動力学シミュレーションによる非晶質材料の構造解析技術の構築に取り組んでおり、微量元素の拡散定数を定量的に予測することが目標。

シミュレーション上の課題は、計算の高速化と大規模化である。現状は、6000 原子（微量元素は 6 原子）を 300ps（時間ステップは 0.001ps）計算するのに市販ソフトを使用して 24 時間も要する上に、微量元素の拡散係数（平均二乗変位の傾き）を検討するには計算規模が小さく統計精度が低いことが問題。

本発表では、高い演算性能を安価に得られる新たな並列ハードウェアとして近年注目を集めている GPGPU(General-Purpose computing on Graphics Processing Units)を適用し、計算の高速化と計算規模の拡大による統計性改善について検討した結果を報告する。

2. GPU 計算

シミュレーターはオープンソースの LAMMPS を使用した。ポテンシャル関数は Born-Mayer 型を採用し、長距離静電相互作用の計算は Particle-Particle Particle-Mesh 法を用いた。計算負荷全体に対して長距離相互作用計算の占める割合が大きいが、GPU 計算で高速化できるので、計算時間の短縮化が可能となる。GPU は NVIDIA 社の Tesla M2090 を使用した。

3. 結果と考察

図 1 に 300ps のシミュレーションに要した計算時間を比較する。GPU 計算により当初の計算

と比べて約 22 倍高速化した。ハードウェアの理論性能は CPU (8 並列計算) が 54GFLOPS、GPU が 665GFLOPS であり、性能差は GPU が 12.3 倍。GPU によるスピードアップは $17/1.1=15.5$ 倍なので、ベンチマーク結果は妥当と言える。

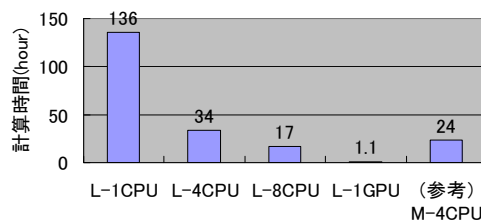


図 1 計算時間の比較 (M は市販ソフト, L は LAMMPS)

計算規模を大きく (当初の 10 倍に) したときの微量元素の平均二乗変位の変化を図 2 に示す。計算規模が大きいとカーブのバラツキが小さくなり、統計精度が向上していることがわかる。

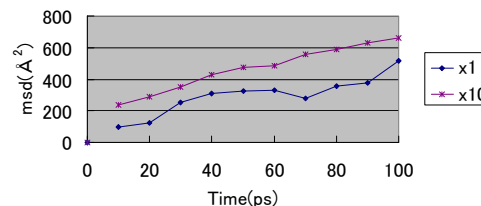


図 2 微量元素の平均二乗変位

4. おわりに

LAMMPS で GPU 計算を行い、当初の約 22 倍の高速化を達成した。計算規模を大きくすることで、微量元素の平均二乗変位のバラツキが小さくなり、統計精度が向上することを示した。今後、倍精度浮動小数点演算性能が M2090 の約 2 倍の K20X についても検討する。