

16 分子動力学専用計算機 MDM

Special Purpose Computer for Molecular Dynamics Simulation MDM

- | | |
|---------------------|---------------------------------|
| ○ 泰岡顕治 (慶大理工) | 薄田竜太郎 (理研) |
| 戒崎俊一 (理研) | 加藤健矢 (インフォメーション・テクノロジー・ソリューション) |
| 小林芳直 (日本 IBM) | 成見哲 (理研) |
| 古沢秀明 (理研) | B. G. Elmegreen (IBM) |
| G. D. McNiven (IBM) | 大口晃司 (京大院) |

Kenji YASUOKA, Keio University, Hiyoshi 3-14-1, Kohoku-ku, Yokohama

Ryutaro SUSUKITA, RIKEN

Toshikazu EBISUZAKI, RIKEN

Kenya KATO, Information Technology Solution

Yoshinao KOBAYASHI, IBM Japan

Tetsu NARUMI, RIKEN

Hideaki FURUSAWA, RIKEN

B. G. Elmegreen, IBM

G. D. McNiven, IBM

Koji OHGUCHI, Kyoto University

Key Words: Molecular Dynamics, Special Purpose Computer, MDGRAPE-2, WINE-2

1. はじめに

古典系の分子動力学計算においては各粒子間に働く力の計算がシミュレーションの大部分を占める。特に粒子数が多い系では力の計算量が多くなり、スーパーコンピューターを用いても、長い時間ステップにわたって系のシミュレーションを行うことは困難である。しかし粒子間に働く力の計算は同じ種類の演算を多数回繰り返すものであるため、我々はこの演算だけを行う数値演算 LSI を製作し、並列動作させるシステム Molecular Dynamics Machine (MDM) の開発を行っている。このような LSI は単機能であるため小さい開発コストでシミュレーションにかかる時間を大幅に短縮することができる。

2. MDM の構成

MDM は 2500 個の MDGRAPE-2 チップ・3000 個の WINE-2 チップ・ホスト計算機から構成される。[1] MDGRAPE-2 チップと WINE-2 チップは我々が開発した数値演算 LSI である。MDGRAPE-2 チップは 2 粒子の位置から 2 粒子間に働く力を計算する。MDGRAPE-2 チップはクーロン力、ファン・デル・ワールス力の計算や、系が周期境界条件でエwald法を用いるときに実空間部分の計算を担当する。WINE-2 チップは離散フーリエ変換と逆離散フーリエ変換を行い、エwald法を用いるときに波数空間部分の計算を担当する。ホスト計算機は複数のワークステーションなどからなり、結合力の計算や粒子に働く力から粒子位置・速度の更新を担当する。ホスト計算機と MDGRAPE-2・WINE-2 はそれぞれ高速のバスで結ばれる。ホスト計算機は粒子位置を MDGRAPE-2 と WINE-2 に送り、チップが計算して、結果をホスト計算機に返す。

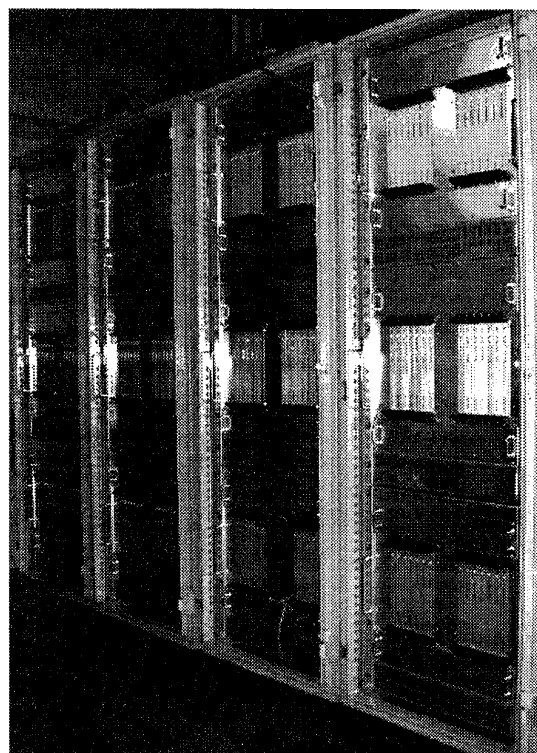


Figure 1: WINE-2

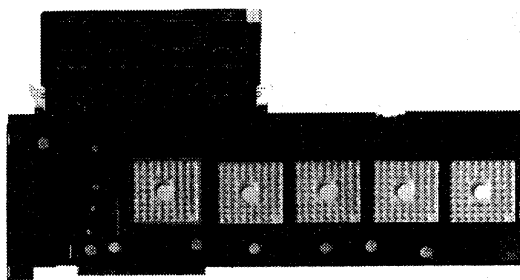


Figure 2: MDGRAPE-2 board

現在、MDMのうちWINE-2の部分はほぼ完成し、ホスト計算機に接続して稼働している(図1)。MDGRAPE-2はチップを搭載した試作ボード(図2)8枚ができ上がり、残りの製作を進めている。

3. 計算速度

MDGRAPE-2チップは4本のパイプラインをもち、クロック周波数100MHzで並列動作する。1本のパイプラインは1クロック毎に平均40浮動小数点演算を行うので、MDGRAPE-2チップのピーク性能は $4 \times 100 \text{ M} \times 40 = 16 \text{ GFLOPS}$ に相当する。WINE-2チップは8本のパイプラインをもち、クロック周波数66MHzで並列動作する。1本のパイプラインは1クロック毎に平均40浮動小数点演算を行うので、WINE-2チップは $8 \times 66 \text{ M} \times 40 = 20 \text{ GFLOPS}$ のピーク性能をもつ。これらのチップの計算速度は現在のパーソナルコンピュータに使われているCPUに比べて20倍以上高速である。WINE-2全体では実効性能として現在までに約10TFLOPSが得られており、今後ホスト計算機のプログラムの改良などによってさらに向上が期待できる。MDM全体では $2500 \times 16 \text{ GFLOPS} + 3000 \times 20 \text{ GFLOPS} \sim 100 \text{ TFLOPS}$ のピーク計算性能になる予定である。これは、 10^6 粒子系のシミュレーション1nsを1週間以内で実行できる性能である。

4. MDMの性能評価

4.1 計算時間の粒子数依存性 計算時間の粒子数依存性を見るために、液体状態の水(TIP4Pモデル[2])でのシミュレーションを行った。分子数は256, 864, 2048, 4000, 6912の5通りを用いた。シミュレーションセルは立方体であり、密度が 0.997 g/cm^3 となるように一辺の長さを決め、NVE一定のシミュレーションを行った。(温度 $T \sim 350\text{K}$) 運動方程式の差分化は、leap-frog法を用いた。

MDMは、力の計算とポテンシャルエネルギーの計算を独立に行う。つまり、1ステップ毎にポテンシャルエネルギーを計算すると、力のみ計算するときの約2倍の計算時間が必要となる。従って、本研究ではポテンシャルエネルギーの計算は50ステップ毎に行い、計算時間を短縮した。

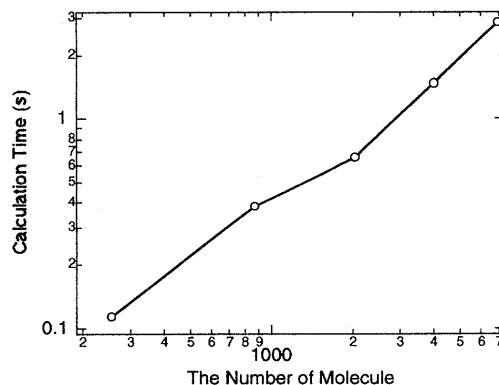


Figure 3: Calculation time.

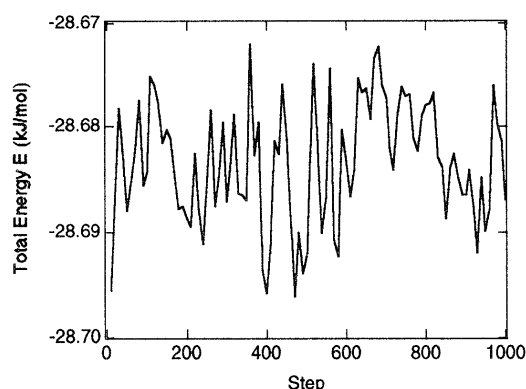


Figure 4: Total energy of the system which has 6912 water molecules.

以上の計算条件から得られた1ステップ当たりの平均計算時間を図3に示す。直線の傾きはおよそ1となり、計算時間は粒子数にほぼ比例するという結果が得られた。計算量は粒子数の2乗に比例することから、MDMは大規模な系で効率良く計算できると言える。

4.2 計算精度 分子数が6912個の場合について、系の全エネルギー E の時間変化を図4に示す。 E が単調に増加・減少せず0.1%以内で一定であるので、MDMはクーロン相互作用を含む大規模系に対して有効である。

5. まとめ

分子動力学シミュレーションにおける力の計算を高速に行うLSIを開発し、性能評価を行った。今後、 10^6 粒子系でのシミュレーションを行う予定である。

References

- [1] T. Narumi *et al.*, *Molecular Simulation*, **21**, 4015 (1999).
- [2] W. L. Jorgensen *et al.*, *J. Chem. Phys.*, **79**, 926 (1983).