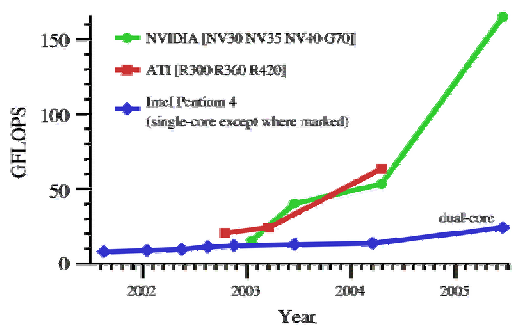


29pXG-1 GPUを用いた分子動力学法と境界要素法の加速

理研中央研 高橋徹、飯高敏晃、真瀬洋、戎崎俊一

Acceleration of Molecular Dynamics Simulation and Boundary Element Method
RIKEN T. Takahashi, T. Iitaka, H. Mase, T. Ebisuzaki

GPU(Graphic Processing Unit)はパソコン搭載の画像処理専用素子である。GPUは画面上の各画素を一斉に処理する計算をCPUよりもはるかに高速に実行できる。しかも近年性能が急速に向上している[1](図参照)。この高度な並列演算機能を科学計算に活用しようというアイデアがGPGPU(General-Purpose computation on GPUs)である[2]。GPGPUは、流体力学、線形計算などに応用され始めているが、我々は分子動力学法(MD)と境界要素法(BEM)への応用に成功した。MDとBEMを加速するハードウェアとしては従来MD-GRAPE[3,4]が知られている。MD-GRAPEとGPUを比較するとチップ当たりの計算速度および計算精度でほぼ同等であり、GPUではプログラム可能なため複雑な相互作用やグリーン関数も計算できる点、および低価格で入手可能な点が優れていることが分かった(表参照)。本講演ではその詳細を紹介する。



Data	GF7800GTX	MDGRAPE-2[3]	MDGRAPE-3[4]
# of pipeline	32	4	20
clock (MHz)	400	100	460
peak (Gflops)	150	16.4	300
peak (Gpair/sec)	6	0.4	9
sustained (Gflops)	15	3.75	NA
sustained (Gpair/sec)	0.6	0.09	NA

表：チップ当たりの性能

図：GPUとCPUの性能比較[1]

[1] David Luebke, SIGGRAPH 2005 GPGPU Course.

[2] <http://www.gpgpu.org/> <http://www.iitaka.org/>

[3] R. Susukita et al., Phys. Commun. 155, 115 (2003).

[4] M.Taiji et al., in Proceedings of SC'03, November 15-21, 2003, Phoenix Arizona, USA.