

Title	スプライン基底関数系を用いた固体系の量子モンテカルロシミュレーションに対するGPGPUによる高速化の研究
Author(s)	上嶋, 裕
Citation	
Issue Date	2012-03
Type	Thesis or Dissertation
Text version	author
URL	http://hdl.handle.net/10119/10434
Rights	
Description	Supervisor:前園 涼 准教授, 情報科学研究科, 修士

スプライン基底関数系を用いた固体系の 量子モンテカルロシミュレーションに対する GPGPUによる高速化の研究?

上嶋 裕 (1010007)

北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科

2012年2月

キーワード: GPGPU, Quantum Monte Carlo, HPC, Hybrid MPI.

現在, ナノ材料開発の基礎研究として, 物質特性をシミュレーションする電子状態計算の一つに量子モンテカルロ法 (Quantum Monte Carlo; QMC) がある. 量子モンテカルロ法は従来手法の密度汎関数法と比べ, 電子の振る舞いをより厳密に取り入れた計算ができる. そのため従来手法では正確に描くことができなかった, 生体分子や磁性の問題を量子モンテカルロ法は扱えるという特徴を有する. 統計手法故に, 量子モンテカルロ計算コードの並列化性能は99%以上 (80,000 並列時) と非常に高く, 近年のスーパーコンピュータが超並列化されていることに伴って, その活躍が期待されている. 量子モンテカルロ法は基礎方程式を解くのに恣意的な近似を用いず, 方程式を実直に取り扱っているため, 計算の信頼性が高い一方で, 電子状態計算の主たる対象となっている固体や大規模分子の計算では, 膨大な計算時間を要することが課題となっている.

この解決策として, 並列計算を行なっている各コアで律速となっている箇所を何らかの方法で高速化できれば, 計算全体の高速化を図ることができる. これを実現する手法の一つがハイブリッド並列化である. ハイブリッド並列は, MPI (Message Passing Interface) 並列が行われている各計算ノード上, または各CPUコア上で, さらに並列計算を行う手法である. MPI 並列と共存して並列計算ができる手法に OpenMP がある. OpenMP はCPU内のコアで処理されているプロセスを多数のスレッドに分け並列計算を行い, 律速箇所を容易に並列化することができる. 近年のスーパーコンピュータにおける科学計算は, MPI+OpenMP のハイブリッド並列計算が一般的になりつつある. しかし OpenMP はCPU内のコアを用いて並列計算を行うため, 顕著な高速化が見込めないことはよく知られている.

OpenMP を超えるハイブリッド並列手法の一つとして、グラフィックカード内の演算ユニット (Graphics Processing Unit;GPU) を利用した GPGPU (General-purpose computing on GPU) による高速化が注目されている。GPU は CPU と比べ多数の演算ユニットを有し、浮動小数点演算能力が非常に高い。構造が単純で高性能化が容易なこともあり、近年、アクセラレータ手法として様々な分野で目覚ましい発展を遂げている。また、CPU よりも低い消費電力で高い演算性能を発揮できることから、多くのスーパーコンピュータや大規模クラスタに搭載されつつある。

本研究では、スプライン基底関数系を用いた固体系の量子モンテカルロ計算の律速箇所について GPGPU を用いた高速化を行い、計算ノード単体における計算速度面での性能向上を図ることを目的とした。実装の結果、 TiO_2 固体の 1536 電子の量子モンテカルロシミュレーションにおいて、単精度で 30.67 倍の律速箇所の高速化を実現した。論文では GPU のアーキテクチャに合わせた律速箇所の換装手法や、最適化手法について述べる。実装後の結果から、単精度化による計算値への影響や、達成された演算性能について議論する。