

アクセラレータを用いた生命科学計算 Computer simulation of biological science using accelerator

開催趣旨:

これまで、スパコンをはじめとする計算機の演算性能の向上は、複数のプロセッサを相互に繋げ、その数を増やすことによって実現されてきた。しかし今後、さらに 10 倍、100 倍の性能向上を考えると、消費電力やスペースの面から、単純に汎用 CPU の数を増やすだけでは限界に達することが予想される。そこで注目されるのが、アクセラレータである。本セッションでは、アクセラレータを利用して生命科学に関連する研究を進めている二人の先生方に、最近の研究に関してご講演していただき、現状の問題点や将来展望に関して議論する。

モデレーター: 石川 岳志 Takeshi Ishikawa
長崎大学 Nagasaki University

1. GPGPU 化 OpenFMO プログラムの開発

梅田 宏明 Hiroaki Umeda
筑波大学 University of Tsukuba

大規模分子軌道計算向けアルゴリズムである FMO 法について、その実装の一つである OpenFMO プログラムを GPGPU 化して、性能を評価した。GPGPU 化は Fock 行列計算部分と 4 中心フラグメント間クーロン相互作用計算部分について実装され、2,000 原子程度の分子の FMO 計算では、CPU 単体での性能の 3.8 倍の性能が得られている。発表では Fock 行列計算の GPGPU 化手法を中心に、大規模 FMO 計算の性能評価例等も報告する。

2. タンパク質全原子モデルのミリ秒シミュレーションにむけて

森本 元太郎 Gentaro Morimoto
理化学研究所 RIKEN

単体タンパク質の全原子モデルは、周辺の水分子を考慮すると 10 万粒子程度になる。この規模の系の古典分子動力学計算は、GPU のようなアクセラレータ、あるいは汎用スパコンによる超並列計算でも、一日あたり 200 ナノ秒ほどのシミュレーションが限界である。それは演算器を増やしても通信の遅延は一定であり、通信時間のほうが支配的になってくるからである。現在開発中の分子動力学専用計算機 MDGRAPE-4 では、粒子間相互作用の計算を加速するためのパイプライン、汎用プロセッサコア、ネットワークインターフェースを統合した SoC (System on Chip) を 512 個、三次元的に接続して通信遅延を小さくすることで、一日あたり 10 マイクロ秒のシミュレーションを可能にすることを目指している。