



GPU(Graphic Processing Unit)による分子動力学、積分方程式および量子計算

理研 中央研 飯高敏晃

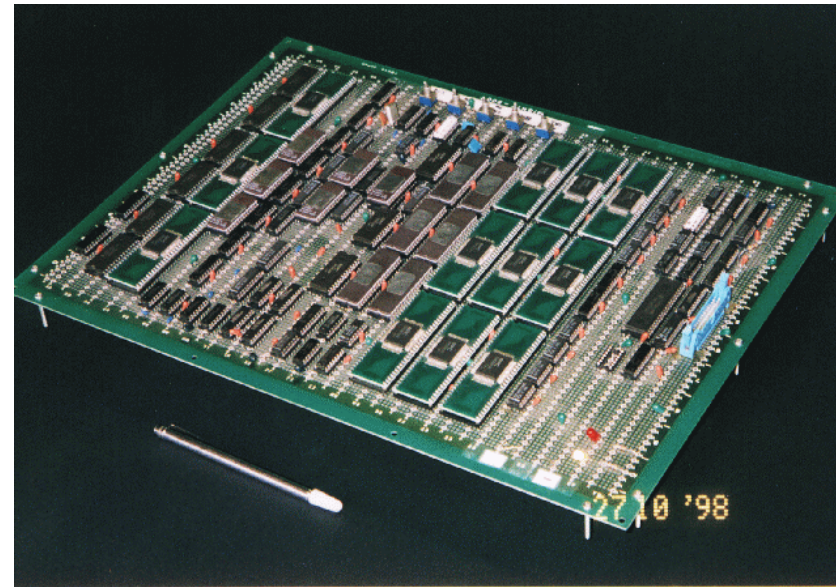
<http://www.iitaka.org/>



何について話すか

- ✧ 専用計算機
- ✧ 計算対象
- ✧ ハイゼンベルク・マシーン
(量子スピン系用計算機)

初代GRAPEは20万円

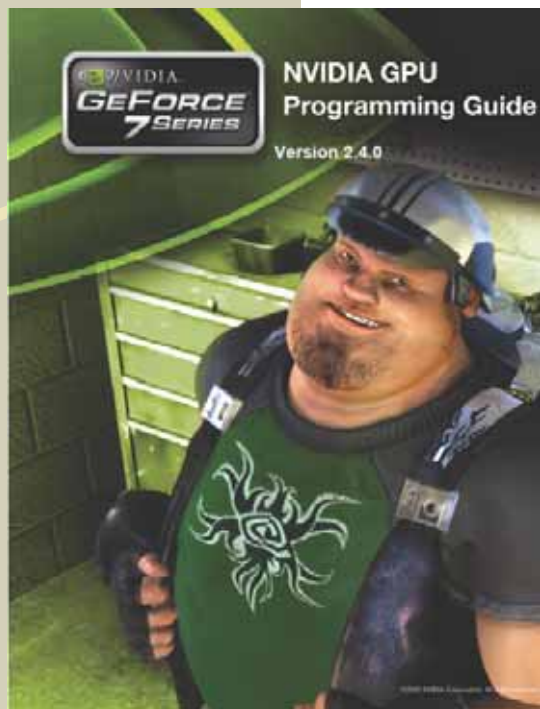


なぜ安かったか
秋葉原で市販品(量産品)の部品
を買ってきて組み立てた。

http://www.iitaka.org/bookshelf_j.html#special_computer

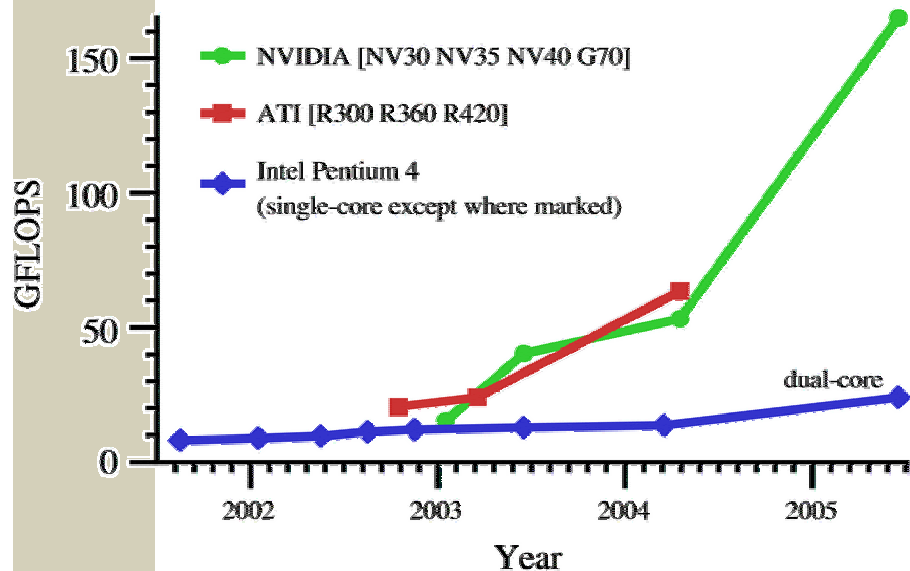
いまやるなら、GPUだ！

- ✦ GPUボード 2～7万円
- ✦ 高性能GPU付きパソコン20万円位
(大抵のパソコンに最初から付いている)
- ✦ GPUとは。
グラフィック アクセラレーターのこと。
パソコンの画面への描画を制御する素子。」



GPUとは

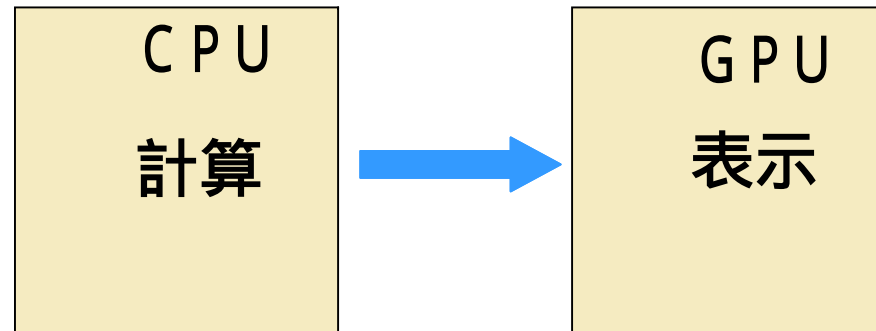
- ✦ パソコンの描画素子
- ✦ 年数千億円ของเกม市場 量産効果、開発競争による高性能低価格化
- ✦ プログラム可能
- ✦ 浮動小数点計算可能



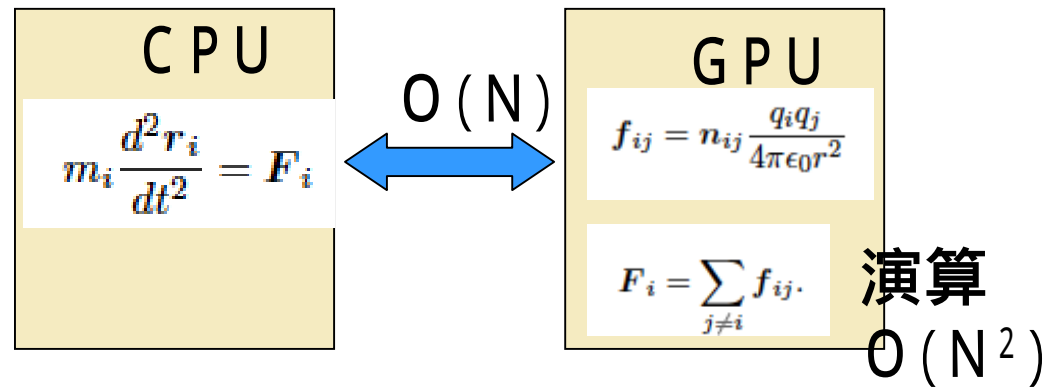
<http://www.nvidia.com/>

CPUとGPU

通常の利用



補助計算機
として



分子動力学計算

✨ 粒子集団の運動方程式を数値的に解く

$$m_i \frac{d^2 r_i}{dt^2} = F_i$$

$$F_i = \sum_{j \neq i} f_{ij}$$

$O(N^2)$

$$f_{ij} = n_{ij} \frac{q_i q_j}{4\pi\epsilon_0 r^2}$$

$$f_{ij} = n_{ij} \frac{G m_i m_j}{r^2}$$

$$f_{ij} = n_{ij} \epsilon_{ij} \left(-2 \left(\frac{C_{ij}}{r} \right)^{14} + \left(\frac{C_{ij}}{r} \right)^8 \right)$$

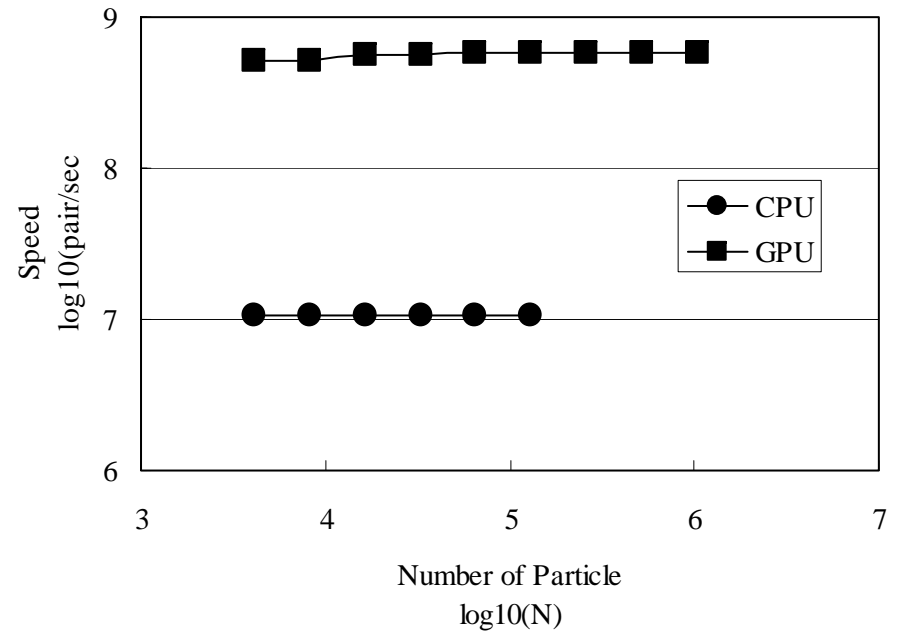
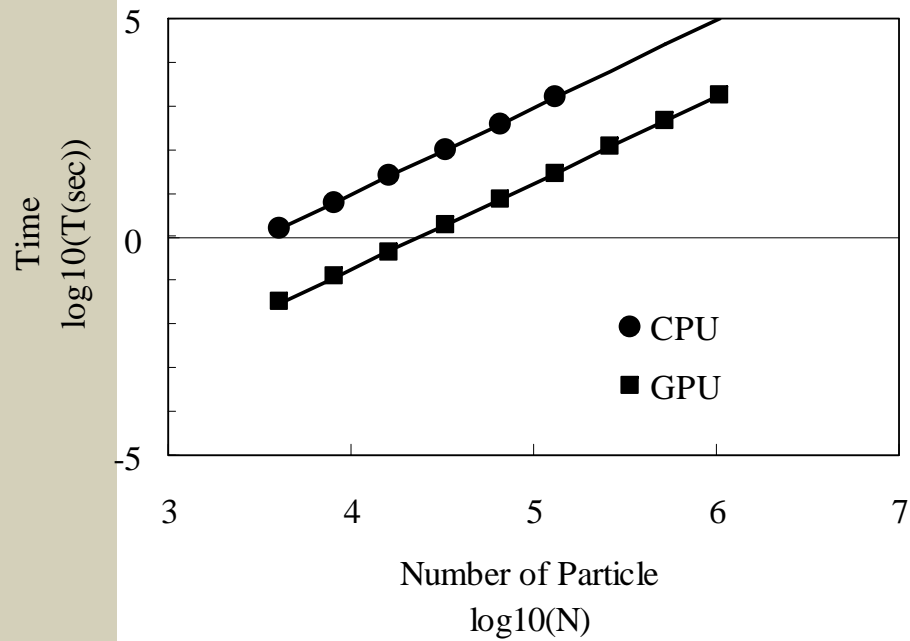
MD-GRAPeとの比較

Data	GF7800GTX	MDGRAPE-2[3]	MDGRAPE-3[4]
# of pipeline	32	4	20 20
clock (MHz)	400	100	460 250
peak (Gflops)	150	16.4	300 165
peak (Gpair/sec)	6	0.4	9 5
sustained (Gflops)	15	3.75	NA (165)
sustained (Gpair/sec)	0.6	0.09	NA (5)

- ✪ [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.

http://mdgrape.gsc.riken.jp/?easiestml_lang=xlang:ja

GPUの計算速度(分子動力学)

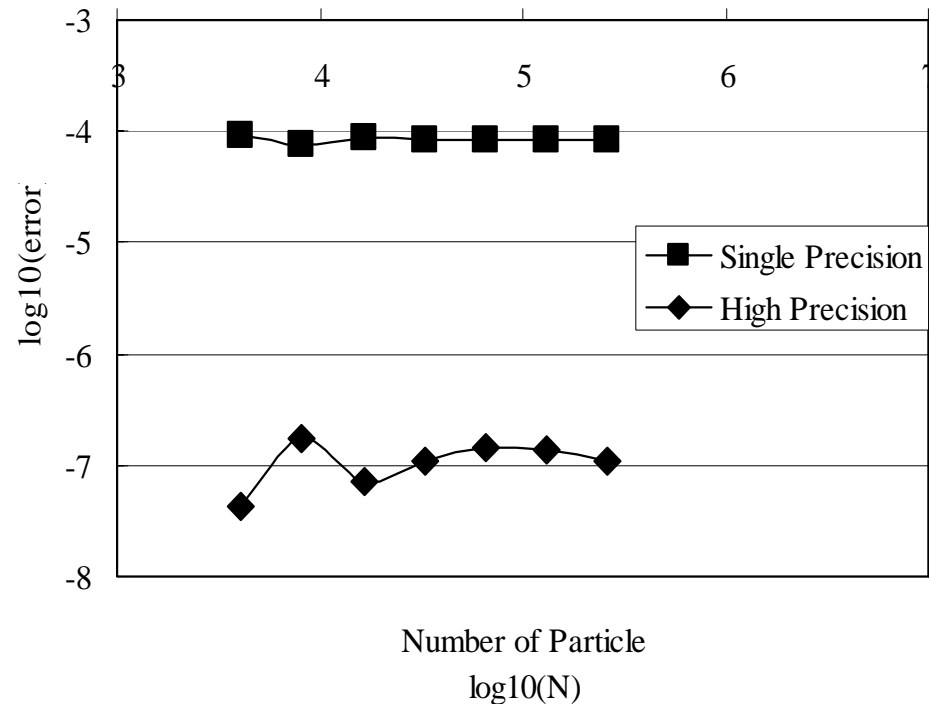


計算精度

Symbol	Data	GF7800GTX	MDGRAPE-2[3]	MDGRAPE-3[4]
r_i	position	32 bit float	40 bit fixed	40 bit fixed
f_{ij}	force	32 bit float	32 bit float	32 bit float
F_i	total force	32 bit float	64 bit float	80 bit fixed
	others	32 bit float	32 bit float	32 bit float

Table 4. comparison of data format

GPUでの計算精度



Single Precision: GPU内蔵の単精度浮動小数点計算

High Precision : 計算の一部を多倍長ライブラリを用いて高精度化

GPUでの数値表現

✦ 各色が単精度浮動小数点(32bit)に対応

✦ 画素の構成



✦ 例: 128 x 128 粒子の座標



Cg言語 (GPU用C言語)

クーロン力の和の計算

$$f_{ij} = n_{ij} \frac{q_i q_j}{4\pi\epsilon_0 r^2}$$

```
struct Output {  
    float4 color : COLOR;  
};
```

```
Output main(  
    float2 i : TEXCOORD0,  
    uniform int mx,  
    uniform int my,  
    uniform samplerRECT texture):COLOR
```

```
{  
    Output OUT;  
    float r,rr,k,l;  
    float2 j;  
    float3 ri,rj,rij,force;  
    const float eps2=1e-6;  
    force=0;  
    ri = texRECT(texture,i);  
    for(l=0.5; l <my; ++l){  
        for(k=0.5; k <mx; ++k){  
            j=float2(k,l);  
            rj = texRECT(texture,j);  
            rij= rj-ri;  
            rr = eps2+dot(rij,rij);  
            r = sqrt(rr);  
            force += rij/(r*rr) ;  
        };  
    };  
    OUT.color.xyz=force;  
    return OUT;  
}
```

```
{  
    Output OUT;  
    float r,rr,k,l;  
    float2 j;  
    float3 ri,rj,rij,force;  
    const float eps2=1e-6;  
    force=0;  
    ri = texRECT(texture,i);  
    for(l=0.5; l <my; ++l){  
        for(k=0.5; k <mx; ++k){  
            j=float2(k,l);  
            rj = texRECT(texture,j);  
            rij= rj-ri;  
            rr = eps2+dot(rij,rij);  
            r = sqrt(rr);  
            force += rij/(r*rr) ;  
        };  
    };  
    OUT.color.xyz=force;  
    return OUT;  
}
```

アセンブラ

```
⚡ TEMP R0;TEMP R1;TEMP R2;TEMP RC;TEMP  
HC;OUTPUT oCol = result.color;TEX R0.xyz,  
fragment.texcoord[0], texture[0], RECT;MOVR R2.xyz,  
c[0].x;MOVR R0.w, c[0].x;LOOP c[0].yxzw;MOVR  
R1.w, R0;MOVR R1.x, c[1];ADDR R1.xy, R1.wxzw,  
c[0].w;TEX R1.xyz, R1, texture[0], RECT;ADDR  
R1.xyz, R1, -R0;MULR R0.w, R1.y, R1.y;MADR R0.w,  
R1.x, R1.x, R0;MADR R0.w, R1.z, R1.z, R0;ADDR  
R0.w, R0, c[2].x;RSQR R2.w, R0.w;RCPR R2.w,  
R2.w;MULR R0.w, R2, R0;RCPR R0.w, R0.w;MADR  
R2.xyz, R1, R0.w, R2;ADDR R0.w, R1,  
c[0].z;ENDLOOP;TEX R0.xyz, fragment.texcoord[0],  
texture[1] RECT;ADDR oCol xyz R2 R0;END
```

Lippman-Shwinger方程式

ナノ構造体の電気伝導などに応用

第2種 Fredholm積分方程式

$$g(t) = \lambda \int^b K(t, s)g(s)ds + h(t)$$

$$g(t_i) = \lambda \sum_{j=1}^N w_j K(t_i, s_j)g(s_j) + h(t_i)$$

リップマンシュウィンガー方程式

$$\phi(\mathbf{r}) = \phi_0(\mathbf{r}) + \int d\mathbf{r}' G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}')V(\mathbf{r}')\phi(\mathbf{r}')$$

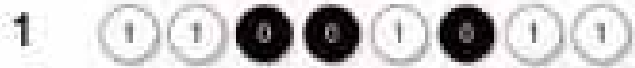
スピン系用計算機

- ✧ 古典スピン系用計算機「イジング・マシーン」
(伊藤伸泰、泰地真弘人、鈴木増雄、1988)
- ✧ 本研究では、量子スピン系用計算機「ハイゼンベルク・マシーン」に挑戦。

ハイゼンベルク・マシーン

✨ 量子スピン系のハイゼンベルク模型の有限温度における動的性質を計算

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{D}_{ij} \cdot (\vec{S}_i \times \vec{S}_j) - g\mu_B \vec{H} \sum_i \vec{S}_i.$$



<http://www.iitaka.org/gpgpu.html>



量子スピン鎖

VOLUME 90, NUMBER 4

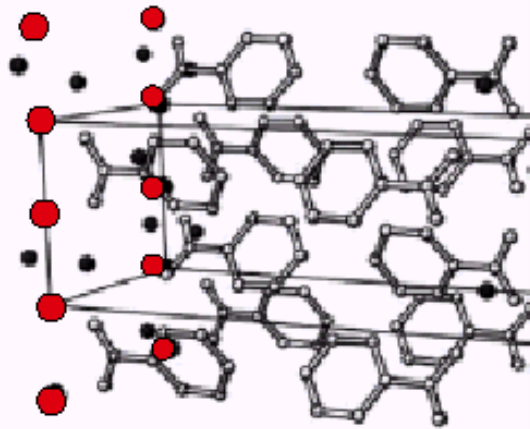
PHYSICAL REVIEW LETTERS

week ending
31 JANUARY 2003

Algorithm for Linear Response Functions at Finite Temperatures: Application to ESR Spectrum of $s = \frac{1}{2}$ Antiferromagnet Cu Benzoate

Toshiaki Iitaka* and Toshikazu Ebisuzaki

Copper Benzoate



Cu^{2+}

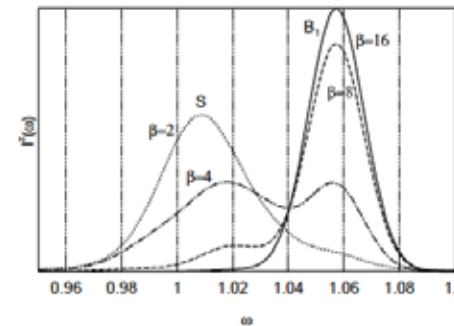
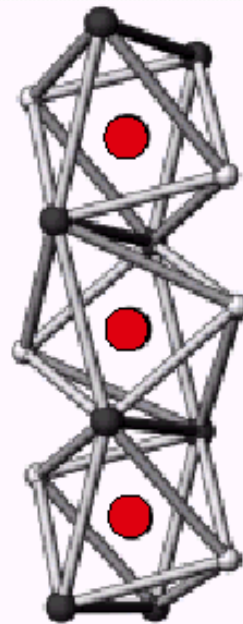
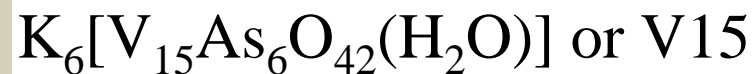
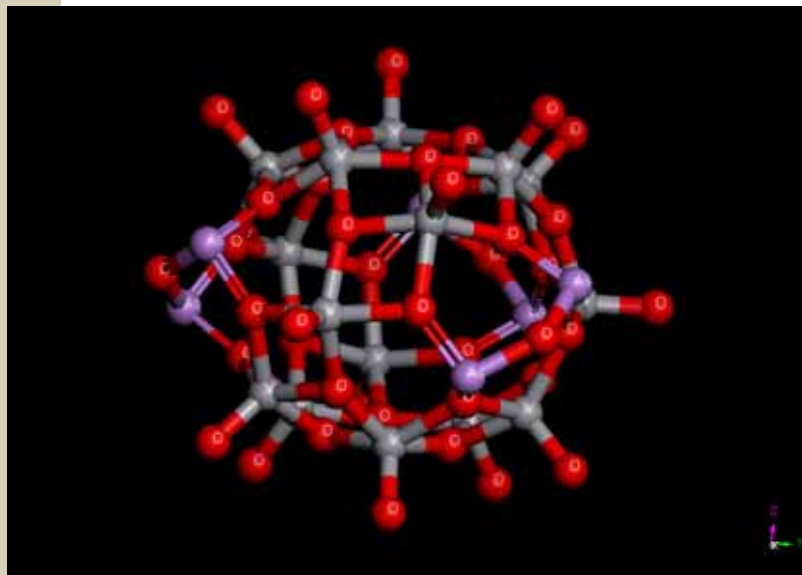


FIG. 1: ESR spectra of normal polarization, $I^z(\omega)$, calculated with $\beta = 2 \sim 16$, $H_x = 1.0$, $N_{spin} = 16$, $\eta = 0.01$ and $N_{rand} = 16$. S and B_1 stand for spinon excitation and first breather excitation, respectively.

<http://www.iitaka.org/frog2j.html>



ナノ分子磁石



- **実験**: Sakon et al. (2003), Ajiro et al. (2003).
- Line width, Line shape, Intensity and DM/DD interaction.
- **理論**: Machida et al. (**cond-mat/0501439**, J. Phys. Soc. Jpn. Suppl. 74, 107(2005).)

<http://www.iitaka.org/down.html>



相互作用のない多電子系の 線形応答関数

<http://www.iitaka.org/frog2j.html>

☀ 時間応答

$$\delta B(t) = 2 \operatorname{Im} \langle \Phi_{E_f} | e^{+iHt} B e^{-iHt} \theta(H - E_f) A | \Phi_{E_f} \rangle.$$

☀ フーリエ変換

$$\chi_{BA}(\omega + i\eta) = \left\langle \left\langle \int_0^T dt e^{+i(\omega + i\eta)t} \delta B(t) \right\rangle \right\rangle,$$

T.Iitaka et al., Phys. Rev. E56, 1222 (1997)

T.Iitaka et al., Phys. Rev. E61, R3314 (2000)



行列関数のチェビシエフ展開

行列関数:
$$f(H) \equiv \frac{1}{2}c_1T_0(H) + \sum_{k=2}^{N_k} c_k T_{k-1}(H)$$

$$c_k = \frac{2}{N_k} \sum_{l=1}^{N_k} f(x_l) T_{k-1}(x_l)$$

行列版チェビシエフ多項式:

H, 規格化ハミルトニアン 固有値の範囲 [-1,+1]

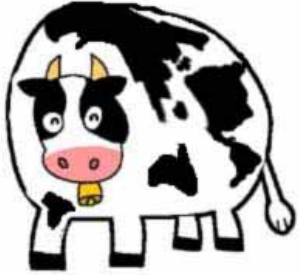
$$T_0(H) = I$$

$$T_1(H) = H$$

$$T_2(H) = 2H^2 - I$$

.....

$$T_{n+1}(H) = 2HT_n(H) - T_{n-1}(H) \quad (n \geq 1)$$



$$\text{Exp}(-H)$$

✨ ボルツマン因子

$$e^{-\beta H} = I_0(\beta) + 2 \sum_{n=1}^{\infty} I_n(\beta) T_n(H)$$

✨ 分配関数

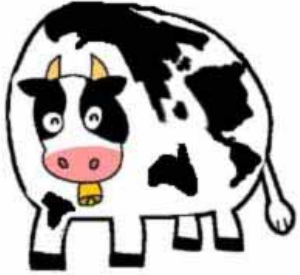
$$Z = \text{Tr} \left[e^{-\beta H} \right]$$

✨ 熱力学平均値

$$\langle A \rangle = \text{Tr} \left[A e^{-\beta H} \right] / Z$$

R.Kosloff and H.Tal-ezer, Chem.Phys.Lett. **127**,223 (1986).

R.N.Silver and H.Roeder, Internatnl. J. Mod. Phys.C **5**,735(1994)



Exp (-Ht)

☀ 時間發展演算子

$$e^{-iHt} = J_0(t) + 2 \sum_{n=1}^{\infty} (-i)^n J_n(t) T_n(H)$$

$$|\phi, t_0 + t\rangle = e^{-iHt} |\phi, t_0\rangle = J_0(t) |\phi, t_0\rangle + 2 \sum_{n=1}^{\infty} (-i)^n J_n(t) T_n(H) |\phi, t_0\rangle$$

H.Tal-ezer and R.Kosloff, J.Chem.Phys. **81**,3967 (1984).
Fortran Programs by T.Iitaka

波動関数から画素への写像例

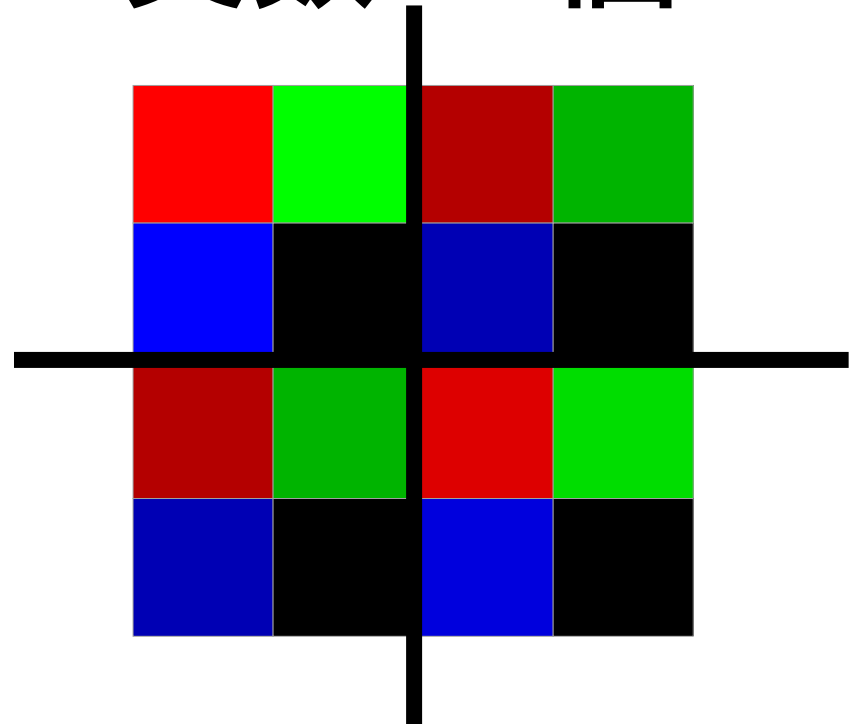
✨ 一色が32Bit実数1個に対応

$$|\phi\rangle = \begin{bmatrix} \phi_{\uparrow} \\ \phi_{\downarrow} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \phi_{\uparrow}^R + \phi_{\uparrow}^I \\ \phi_{\downarrow}^R + \phi_{\downarrow}^I \end{bmatrix} = \begin{array}{|c|c|} \hline \text{Red} & \text{Green} \\ \hline \text{Blue} & \text{Black} \\ \hline \end{array}$$

多スピン系の波動関数

✨ スピン 3 個の波動関数
複素数 8 成分 = 実数 16 個

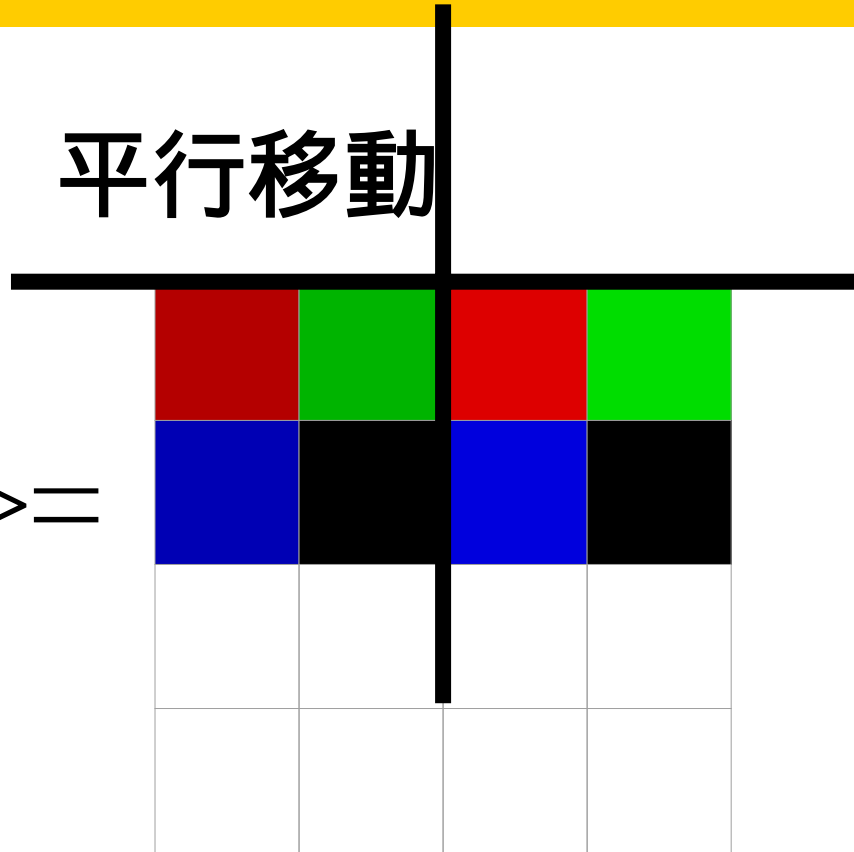
$$|\pm\pm\pm\rangle =$$



スピン演算子の作用

- 昇降演算子 平行移動

$$S_+^{(2)}|\pm\pm\pm\rangle =$$



ハイゼンベルク・マシーン



Dell Dimension 9100 + NVIDIA Gforce7800GTX

スパコンより速いパソコン！？

<http://www.iitaka.org/gpgpu.html>



理研ベンチマーク賞受賞

2006年3月23日

実測 約6GFLOPS

過去の1CPUの記録(2006年1月23日)

<http://www.iitaka.org/gpgpu.html>

順位 Rank	実測速度 Measured speed (MFLOPS)	CPU 数 CPU number	メーカー Manufacturer	機種 Model	CPU	クロック Clock	
1	4705.05	1	NEC	SX-5	10GFLOPS	312.5MH	-
2	4401.3	1	FUJITSU	VPP5000	9.6GFLOPS	300MHz	V
3	4281.6	1	NEC	SX-5	10GFLOPS	312.5MH	-
4	4281.6	1	NEC	SX-5	10GFLOPS	312.5MH	-
5	4269.56	1	HITACHI	SR8000/E1	9.6GFLOPS	-	-
6	4137.3	1	FUJITSU	VPP5000	9.6GFLOPS	300MHz	V
7	4137.3	1	FUJITSU	VPP5000	9.6GFLOPS	300MHz	V
8	3785	1	NEC	SX-5	8GFLOPS	250MHz	-
9	3701.1	1	FUJITSU	VPP800	8GFLOPS	250MHz	V
10	3701.1	1	FUJITSU	VPP800	8GFLOPS	250MHz	V
11	3565.98	1	HITACHI	SR8000	8GFLOPS	-	-
12	3395	1	NEC	SX-5	8GFLOPS	250MHz	-
13	3395	1	NEC	SX-5	8GFLOPS	250MHz	-

価格性能比

- ✦ 価格 本体 + GPU = 19万円
GPUボードのみ 7万円
- ✦ 性能 ピーク 150 GFLOPS
実効 50 GFLOPS (目標)
- ✦ スパコン (SX-7) では？
価格 ? 千万円
ピーク性能 12 GFLOPS

まとめ

- ✧ ハイゼンベルク・マシーンの構想と開発状況を報告した。
- ✧ 分子動力学、流体力学に関する予備計算では、スパコンに劣らぬ性能を示した。
- ✧ 量子スピン系ではさらなる性能向上が期待される。