

# GPUによる3D-RISMプログラムの高速化

## Accelerating 3D-RISM calculation with GPU

丸山 豊<sup>1)</sup>, 平田 文男<sup>1,2)</sup>

Yutaka Maruyama and Fumio Hirata

1) 分子科学研究所 理論・計算分子科学計算領域 (〒444-8585 愛知県岡崎市明大寺町字西郷中38)

2) 総合研究大学院大学 物理科学研究科 (〒444-8585 愛知県岡崎市明大寺町字西郷中38)

**Key Words** : 3D-RISM theory, CUDA, C1060, C2070

### 1. はじめに

Three-dimensional Reference Interaction site model (3D-RISM)理論は、溶質の周りの溶媒和構造を3次元分布として計算する統計力学理論である[1]。この理論を用いることによりDNAや蛋白質などの巨大な分子の周りの溶媒構造を取り扱うことができる。また溶媒の確率分布を算出するために、一回の計算で溶媒和自由エネルギーなどの統計力学量を求めることができる。

近年この理論を創薬へ適用する方法が提案された[2]。その方法は薬理分子と標的蛋白質の多数の組み合わせを計算する必要があり、3D-RISM計算の高速化が切に望まれている。

3D-RISMプログラムはメモリアクセスが律速となる。メモリアクセスが高速なGPUは3D-RISMに適していると考え、CUDA3.2によってプログラムを実装した。

### 2. 手法と実装

3D-RISM理論は3D-RISM方程式とクロージャ方程式の2つの方程式からなる理論である。この2つの方程式を交互に評価し解を収束させていく。3D-RISM方程式は畳み込み積分の形をしているためフーリエ空間で解くが、クロージャ方程式は実空間で解く。そのため繰り返し計算の中で3D-FFTを何度も実行する必要がある。FFTは計算量が $N\log N$ であり、メモリアクセスが律速となる。

オリジナルの3D-RISMプログラムはその計算時に多大なメモリを必要とする。例えば溶媒を水とし $256^3$ の3次元グリッドで計算を行う場合、約9GBのメモリを必要とする。一方、GPUの中で最もメモリを搭載しているNVIDIA Tesla C2070でも6GBしかない。使用メモリ9GBのうち6GBは、収束を加速させるModified Direct Inversion in Iterative Subspace (MDIIS)法で使用される。そこで我々はメモリ使用量の少ないアンダーソン法を収束法として3D-RISMプログラムに適用した。

しかしオリジナルのアンダーソン法ではMDIIS法に比べて収束回数が5倍程度増加し、速度向上の妨げとなった。そこで、修正アンダーソン法として新たに調節パラメー

タを導入し、直前の結果の重みを増やすことで収束回数の改善を試みた。

### 3. 結果

CPU(Intel i7 920 2.67GHz)はシングルコア、C1060とC2070は1GPUずつで動作させ計算時間を測定した。CPU、GPUともに計算には倍精度を使用した。計算に使用した系は、水中のDNA(754原子)で、 $256^3$ のグリッドで計算を行った。この系は実際に研究に使用しているものである。

表1にCPU及びGPUで実行した繰り返し部分の計算時間を示す。CPU、GPUともにアンダーソン法から修正アンダーソン法にすることによって6倍程度の高速化を達成している。これはアンダーソン法では1375回かかっていた繰り返し計算が、213回と短縮されたことによる。またそれぞれの方法でCPUに対しC1060で14倍、C2070で30倍の速度向上が得られた。以上により修正アンダーソン法はメモリ使用量が少なく効果的に解を得ることのできる収束加速法であり、GPUと組み合わせることで3D-RISM計算を加速することを示せた。

現在は、より大きな計算セルを取り扱うためにCUDA4.0を使用してマルチGPU化を試みている。当日はマルチGPU化についても言及する予定である。

表1 繰り返し部分における計算時間(秒)

	アンダーソン	修正アンダーソン
Intel i7 920	10566.1	1797.1
C1060	857.1	132.7
C2070	391.2	60.6

### 参考文献

- [1] “Molecular Theory of Solvation”, F. Hirata ed. Kluwer, Dordrecht, 2003.
- [2] Imai, T. et al.: Ligand Mapping on Protein Surfaces by the 3D-RISM Theory: Toward Computational Fragment-Based Drug Design, *J. Am. Chem. Soc.*, Vol.131, pp. 12430–12440, 2009.