



# 群馬工業高等専門学校 様

## 分子動力学研究に衝撃をもたらしたGPUコンピューティング

群馬県前橋市に位置する国立高等専門学校機構・群馬工業高等専門学校。昭和37年(1962年)、日本で最初に設置された高等専門学校(12校)のうちの1校で、2012年にめでたく創立50周年を迎えた伝統校である。

同校で機械工学科の助教を務める矢口久雄氏は、学生時代から一貫して「分子動力学」の研究に取り組んでいる。分子動力学とは分子レベルにおける現象を解明する、いわば我々の目には見えない「ミクロの世界」を突き詰めていく学問。矢口氏は「流体研究室」を運営し、日々の教鞭をとる傍ら、さまざまな流体現象について数値解析を中心とした基礎研究を行なう。

矢口氏が大きな研究テーマとして掲げるのが「分子動力学シミュレーションによるナノスケール熱流体解析」。具体的には、半径わずか1~10nmとするナノ液滴の分子シミュレーションを実行するもので、そこには膨大な計算能力が必要とされる。

「計算をより速く、より効率的に」。矢口氏は北海道大学に在学中の7~8年前から積極的にシミュレーション高速化の手法を探ってきた。手始めに通常のCPUベースでPCクラスタを構築して高速化を進め、PCのスペックを強化しながら現在に至っている。

一方で、2008年にあるシンポジウムで聞いたGPUコンピューティングによる高速化に衝撃を受け、ここ数年は分子動力学計算へのGPU適用を模索。GPU機器を調達し、プログラミング言語CUDAの学習に取り組むなど独自にトライを重ねてきたものの、なかなか「次の一歩」が踏み出せなかったという。そこでG-DEPが提供する、インハウスプログラムをCUDA化する「ポータビリティサービス」を利用。これにより、慣れ親しんだプログラムのGPUでの高速化に成功し、結果的に6コアCPUによる

並列計算と比較して数倍の高速化が実現されることとなった。

この結果から、GPUコンピューティングの手応えを確実なものとした矢口氏。さっそくNVIDIA Tesla GPUを3枚導入して自らの研究に役立てている。今回の事例では、ポータビリティとTesla導入に尽力したG-DEPソリューション技術部部長の津川元弘氏、チーフエンジニアの河井博紀氏を交えながら話を伺った。

### 当初、計算用途にGPUは関係ないものと考えていました

——先生はどのような研究をされているんですか。

矢口氏：気体と液体が共存する、専門用語で「気液二相系」と呼ばれる状況を対象としていて、そこで起きるさまざまな物理現象を調べています。これらの現象は本質的に、分子レベルまでさかのぼった視点からの研究を必要とするものなんです。例えば、分子レベルでは、気体側に飛んでいる分子が液体に凝縮する、あるいは液体側の分子が気体に蒸発するという状況が同時に発生します。つまり、気体と液体の境目で蒸発する量や凝縮する量は分子の運動で決まります。分子動力学シミュレーションを用いれば、そうした問題を正確に扱うことができ、その現象の本質にも迫ることが出来ます。私は学生時代からずっと、分子動力学シミュレーションを研究ツールとして、蒸発や凝縮などに代表される気体と液体の問題に取り組んできました。

——もともとシミュレーションにはPCクラスタを利用されていたそうですね。

矢口氏：学生時代から、高速な計算環境が欲しいと思っていたんです。その中で並列計算の手法にたどり着いて、PCを自作してクラスタ化しました。最初は2台の市販PCをギガビット通信で接続して、自分で環境も設定したんですよ。MPIを使用した並列計算でおおよそ1.5倍程度の速さを達成し、満足感もありました。しかし人間は欲深いもので、もっと速くならないかと模索するようになるんですね。結局その後、現在に至るまで、PCクラスタを活用した並列計算をいろいろと試しています。つねに最新のCPUを導入してきて、今は6コアCPUを搭載したPCクラスタで計算をしています。

——では、先生にとってGPUとはどのような認識だったのでしょうか。

矢口氏：以前はGPUで計算するという考えそのものがありませんでした。当時はグラフィック用途の1パーツという認識でしたし、CPUにはお金をかけても、GPUなどはなるべく安いパーツを導入していましたが、さすがにその認識がある学会で一変したんです。

——その学会とは何だったんですか。

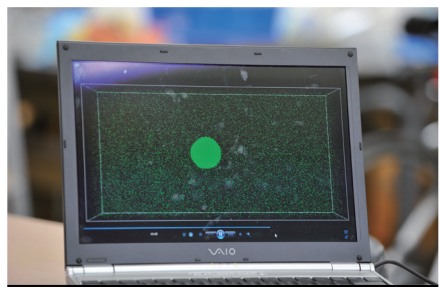
矢口氏：2008年に会津大学で開催された「混相流学会年会2008」で併催されていた「第27回混相流シンポジウム」です。そこで講演を聞いていたら「GPUを使った計算」というキーワードが出てきて、GPUコンピューティングの可能性に衝撃を受けたんです。実際、そのときにGPUに関する意識が180度変わりました。

話を聞いていても、初めはうまく理解できませんでした。それまではグラフィック用ハードウェアという認識しかありませんし、GPUをCPUのミスベルかと思ったぐらいで(笑)。しかしGPGPUといった言葉が出てきて、その後、あわてて宿泊しているホテルのインターネットでいろいろと調べてみると、すでにGPUコンピューティングの世界が立ち上がっていることがわかったんです。私が取り組んでいる分子動力学でもチャレンジされている方がいました。当時はまだ単精度の計算がメインでしたが、ケースによっては「100倍高速化された」という事例もあつたりして、非常に興味を持ちましたね。

### ポータビリティサービスは自分のプログラムが“見える”ブラックボックスにならなかったのが良かったところです

——そうした経緯もあり、並行してGPUコンピューティングに着手されたかと。

矢口氏：最初はCUDAの勉強から始めました。ただし当時は書籍もほとんどありませんし、何しろ計算用のGPUがありませんでしたから。もともと研究室にあったGeForceで様子を見ながら環境を作ったりして試行錯誤を繰り返し、2010年頃ようやく当時最新の数値計算向けGPUであったNVIDIA Tesla S1070を導入したんです。しかしなかなか思うような結果をはき出せませんでした。とりあえず環境を作ってはみたけれど、「次の一歩」が踏み出せないという感じですね。そんなとき、共同研究者の力添えでG-DEPさんの事を知り、分子動力学の計算をポータビリティで高速化できるのではないかとこの話が出てきました。



CPUとの比較に用いた分子動力学の計算。合計153,835個の粒子による絶え間ない動きをシミュレートした



——そもそもベースとなるプログラムはどんなものだったんですか。

**矢口氏**：言語は Fortran で、私が北大のときに利用・開発していたプログラムです。

——ポータビリティサービスを利用されてみての感想は？

**矢口氏**：非常に助かりました。基本的にポータビリティはベースになるプログラムを渡して再構築してもらう形式ですので、結果として「ブラックボックス」にならなかったのが最も良かったところ。あくまでも研究で使うものから、プログラムの細かいところまで自分で知っておかなくてはいけないものなんですよ。当初は繊細な部分を外部に委託して大丈夫だろうかという不安もありましたが、必要な箇所だけ、必要な形に、しかも可読性が高く読みやすい形で直されていましたので、とても満足しています。ポータビリティ後のコードは単に速いというだけでなく、そのメモリアクセスの方法等が CUDA のコーディングのお手本として大変参考になりました。

——実際のやり取りはどのように進んだのですか。

**津川氏**：メールベースで細かくオーダーを伺いながら、進めていきました。我々にはこれまでのポータビリティ事例の蓄積がありますので、なるべく多様なケースに対処できるようにしています。今回のようなケースは、先生が今おっしゃったようにプログラムの「可読性」が重要だと考えています。企業などのケースでは、フルチューニングしてとにかく高速性を求められる場合もあるんですが、研究用途の場合は後々まで使うことが求められますから。研究用途や実業用途など、さまざまな対象に対してフラットであることが、我々が柔軟に対応できる利点でしょうね。

**河井氏**：また、先生はポータビリティを利用された段階で既にハイエンドな GeForce を導入されていたんですが、倍精度計算である事と分子動力学のアルゴリズムの特徴から、Tesla のほうが速いと判断し、Tesla を搭載した評価機をご用意しました。

——ポータビリティされたプログラムを用いてのシミュレーション結果はいかがでしたか。

**矢口氏**：もう圧倒的に速い。何日もかかっていた計算が翌日には終わっている感覚でした。分子動力学のシミュレーションに適用したところ、6 コア CPU の計算と比較して、GeForce は約 3.9 倍、Tesla は約 5.6 倍になったんです。もちろん、分子動力学は分子の数によってまったく負荷が変わってくるので一概には言えませんが、体感として非常に高速化されました。現在は Tesla を 3 台導入して研究に役立てようと考えています。

GPU の手法に関しては群馬高専内の先生からも反応が良く、機械系だけではなく情報系の先生なども常に情報交換しています。また、本校は「産学連携」を積極的に推し進めていて、関係のある地場の企業の方々と手を組んで講演会を開いているんですが、先日そこで分子動力学の話に絡めて GPU コンピューティングについても触れたんです。そしたら予想以上に反応が良くて(笑)。「どれくらい速くなるんですか?」「計算時間はどれくらいですか?」などと聞かれました。

### 今までできなかった、より多くの分子を用いた計算が可能になる——そこからどんな結果が出てくるのかにもわくわくしますね

——今後、GPU コンピューティングの裾野はどのように広がっていくとお考えですか。

**矢口氏**：高速化は効率化にも直結します。やはり、コストが安いほうが利用する人の裾野が広がりますよね。一部の大きな予算を持っている人しか使えなかったスーパーコンピュータのような高性能な計算環境が、ある程度 GPU で賄えるようになる環境は良いと思っています。なぜなら、多くの研究者や企業の開発者は、限られた予算と時間の中で計画的にやっていたいからなんです。手元にならなくても利用できる強力な計算機がある魅力は計り知れないものです。とくに研究の場合、アイデアを思いついて、とりあえず試してみたいという場面がたくさんありますから。

**河井氏**：GPU アーキテクチャの進化に伴い、CUDA は確実にユーザーに優しいプログラミング言語になっています。GPU コンピューティングの敷居が下がっているの

は間違いありません。ポータビリティサービスもその一環で、「コードを書き換えたい、だけど時間がない」というユーザーの皆様に最適だと考えています。ポータビリティ後のコードを参考にいただき、次は別のコードを自分で CUDA で高速化する、というステップアップも現実的です。最近ではセミナー等でも意識的にポータビリティを紹介していて、非常に好評を博しています。

**津川氏**：数値上の「何倍、何十倍」といった速さだけではなく、先ほど先生がおっしゃったような体感速度、つまり一週間が 2 日になったというような捉え方をされると、より効果を感じられるのではないかと思います。

**矢口氏**：計算が速くできるのも魅力の 1 つですが、逆に今までと同じ時間を費やせば、より多くの分子を用いた大きな計算もできることになる。研究者としては、実はその事実も嬉しいことなんです。「今まで取り組むのが難しかった計算から、一体どんな結果が得られるんだろう?」——そこにもちょっとわくわくしますね。

## MAS-XE5-Silent

MAS-XE5-Silent は、GPU 専門メーカー G-DEP が GPU のヘビーユーザーであるアプリケーション ISV 様と共同開発したフラッグシップモデルです。Intel SandyBridge Xeon 最大 2 基まで、NVIDIA Tesla は最大 4 枚まで搭載可能なこのモンスターマシンは、CPU 冷却を水冷化し、静音とエアフローのバランスを考えた静音アルミシャーシを採用することで、パフォーマンスだけでなく抜群の安定性と静粛性を実現しました。開発者の隣で使える、まさに究極のデスクサイド GPU ワークステーションと呼べる 1 台です。

### 主な特徴

- 水冷冷却ユニット (CPU) と静音アルミシャーシで抜群の静粛性。居室 (デスクサイド) での使用を可能にする低ノイズを実現。
- NVIDIA Tesla を最大 4 枚まで装着可能。国内唯一 4 枚のマルチ GPU 環境を実現できる水冷モデル ※ 2012年4月現在



詳しい製品情報やカタログはこちら  
<http://www.gdep.jp/>



群馬工業高等専門学校  
機械工学科  
助教 博士(工学)  
**矢口 久雄 氏**



G-DEP  
ソリューション技術部  
部長  
**津川 元弘 氏**



G-DEP  
チーフエンジニア  
**河井 博紀 氏**

NVIDIA認定 Tesla販売パートナー NVIDIA Tesla Preferred Partner

## 日本GPUコンピューティングパートナーシップ

<http://www.gdep.jp>

東京/〒113-0033 東京都文京区本郷7-3-1 東京大学アントレプレナープラザ3階  
仙台/〒981-3133 仙台市泉区泉中央3-26-1 泉セレクトビル4階 TEL 022-375-4050 sales@gdep.jp

- NVIDIA、NVIDIA/TESLAは、NVIDIA Corporationの登録商標です
- ELSA (エルサ) は、テクノロジーズ株式会社登録商標です
- G-DEP (ジーデップ) は日本GPUコンピューティングパートナーシップの登録商標です
- その他の商品名は各社の商標または登録商標です
- 仕様などは改良のため予告なしに変更されます
- 本カタログの掲載内容は2012年12月現在の情報です



2012.12