

# 1st GPU Symposium

平成 22 年 10 月 19 日

東京工業大学 蔵前会館 ロイヤルブルーホール

主催 東京工業大学 学術国際情報センター  
GPU コンピューティング研究会

協賛 CREST「次世代テクノロジーのモデル化・最適化による低消費電力  
ハイパフォーマンスコンピューティング」(ULP-HPC)  
GCOE 計算世界観の深化と展開」(Comp View)

## ご挨拶

東京工業大学・学術国際情報センターでは、平成 22 年 11 月に総合演算性能 2.4PFLOPS のスパコン TSUBAME 2.0 が稼働を開始します。その性能の 9 割は GPU が担っています。低コスト・低消費電力の GPU は学術的研究のみならず、様々な産業分野でも利用が進んでいます。GPU コンピューティング研究会では GPU コンピューティングの普及・発展を目指し、毎月 CUDA 講習会を開くなど様々な活動を行っています。今回は GPU 計算に関する成果を広く発表して頂く場として、また議論や情報交換の場として第 1 回 GPU シンポジウムを開催することに致しました。

## プログラム

9:20 -9:30 主催者挨拶

9:30 -10:30 【基調講演】

### GPU Computing will Fundamentally Change Science

David Kirk (NVIDIA)

In the past, graphics processors were special purpose hardwired application accelerators, suitable only for conventional rasterization-style graphics applications. Modern GPUs are now fully programmable, massively parallel floating point processors. This talk will describe how NVIDIA's massively multithreaded computing architecture and CUDA software for GPU computing have changed both graphics and computing. It's no longer news that GPUs can accelerate many applications and compute kernels 100x or more. The true importance of this change lies in what new science and applications will be enabled.

10:30-10:55

### GPGPU による量子化学計算の高速化

古賀良太\*, 古川祐貴\*, 安田耕二\*\* ((株)クロスアビリティ\*, 名大\*\*)

汎用 CPU より 1 桁価格性能比に優れる Graphics Processing Unit (GPU)を使って、量子化学 計算を高速化した。名大・安田(2008)の成果をもとに、各種量子化学計算ソフトに結合可能な GPU 計算エンジンである XA-CUDA-QM を開発した。この汎用モジュールを Gaussian03 B.01, GAMESS-US 2010 R3 に組み込み、通常の ab-initio 計算やフラグメント 分子軌道法計算を高速化した。

10:55-11:20

### GPU による 3D-RISM プログラムの高速化

丸山豊、平田文男 (分子科学研)

3D-RISM 理論は分子性溶媒を取り扱う統計力学理論で、蛋白質などの生体分子の周りの溶媒和構造を正しく取り扱う事ができる。この理論は単体でも強力であるが、分子動力学法や電子状態理論と組み合わせる事でさらに応用範囲が広がる。このような複合的な手法では 3D-RISM の計算を繰り返し行う必要があり、さらなる高速化が望まれている。我々は NVIDIA Tesla C1060 上で動作する 3D-RISM プログラムを実装し、約 19 倍の高速化を達成した。3D-RISM プログラムの構造や GPU 上での実装における問題点とその解決方法、計算例などについて発表する。

11:20-11:45

### 3次元画像計測分野での GPU を用いた高速化事例

関口 尚大 (東杜シーテック(株))

近年注目を浴びている画像を用いた 3D 計測への GPU の適用事例として、多視点 3D 復元と 3D 顔復元のリアルタイム化について紹介する。多視点 3D 復元では、ワシントン大学の建造物 3D 復元プロジェクトで使用されている復元アルゴリズムを題材とし、ハンドコーディングによる CPU、GPU コードおよび GPU コード自動生成ツール「HMPP」が生成するコードについて処理速度と開発工数の比較を行う。また 3D 顔復元では、東北大学 青木孝文教授が取り組まれている位相限定相関法による 3D 画像計測を GPU を活用してリアルタイムに行う試みについて紹介する。

11:45-12:10 **GPGPU for Microsoft Excel ～金融・デリバティブ計算 への適用事例**  
松尾拓真, 鳥居秀行 (ニューメリカルテクノロジーズ)

GPGPU は HPC の分野では広く使われ始めているが、まだ一般ユーザーが手軽に使えるという状況ではない。本発表では、誰もが使える Microsoft Excel から GPGPU を使用可能にするツールと、それを使用した簡単な金融・デリバティブの計算事例を紹介する。

12:10-13:30 **(昼休み)**

13:30-13:55 **ステンシル計算を対象とした大規模 GPU クラスタ向け自動並列化フレームワーク**  
野村達雄, 丸山直也, 松岡聡 (東工大)

近年 GPU を組み込んだクラスタが増えている。GPU はメモリが高スループットであり、演算のピーク性能が極めて高い。アプリケーションによっては GPU を活用する事によって大幅な性能向上が可能である。その一方で、GPU の性能を活かすためには GPU に対する専門知識が不可欠である。そのため、GPU を活用できるのは一部のひととどまっている。本研究ではステンシル計算に着目し、C 言語によるアーキテクチャからは独立した記述方法を開発者に提供し、GPU クラスタ向けに自動で並列化するフレームワークを提案する。これによって開発者は特別な知識を持たずに GPU クラスタの性能を享受できるようになることを目指す。

13:55-14:20 **Expression Template を使ったベクトル演算の CUDA による実装と評価**  
二田 晴彦 (みずほ情報総研)

CUDA によるプログラミングの困難さの一つにホストとデバイスのコードが分離しており、理解しにくいと言う点が考えられる。NVIDIA はこれを解決するために、ベクトル演算に関しては CUBLAS をリリースしているが、CUBLAS は複数項の式を計算する際、無駄なメモリ転送が生じる問題がある。本発表では、ホスト上でプログラミング可能でメモリ転送の効率が良い、Expression Template を用いたベクトル演算フレームワークの実装を行う。Expression Template を用いることで、式構造をテンプレートで保存し必要になった際に式を展開し計算が可能になり、効率の良いデバイスコードが作成可能になる。

14:20-14:45 **大規模有限要素解析システム ADVENTURE の GPU への移植**  
河合浩志\*, 荻野正雄\*\*, 塩谷隆二\*\*\*, 吉村忍\* (東大\*, 九大\*\*, 東洋大\*\*\*)

ADVENTURE はオープンソース CAE システムであり、PC クラスタや ES、IBM BlueGene などさまざまな HPC 環境で動作し、数億自由度規模の有限要素解析を行うことができる。大規模解析向けプレポスト処理環境を備え、熱、構造、流体、電磁場およびそれらの連成問題が扱える。近年次第に普及しつつある GPU および将来の HPC 環境の主流とみなされる GPU クラスタ上に本システムを移植すべく、その主要な並列有限要素解析アルゴリズムである領域分割法について、現在その実装面からさまざまな検討を行っている。

14:45-15:10 **CUDA+OpenGL を用いた GPU-FDTD による 3 次元音響シミュレーションと高速可視化**  
大久保寛 (首都大)

最近では GPU(Graphics Processing Unit)を用いて汎用的な計算を行おうとする GPGPU(General Purpose computation on GPUs) が、様々な分野で注目され始めている。本報告では CUDA と OpenGL を用いて、GPU を用いた音響数値解析及び時間領域における高速可視化を実装・検討している。結果として、3次元計算に対して、ほぼリアルタイムの計算可視化を実現した。

15:10-15:35 **マルチ GPU による電磁界解析の高速化**  
村山敏夫 (ソニー(株))

電子機器の設計では電磁界解析が重要な役割を担っている。中でも、FDTD 法は実装がシンプルで効率的な並列化が可能であるため、GPU を用いた並列計算に広く応用されている。今回、大規模な解析を実現するために複数の GPU を用いて 3次元 FDTD 法を実装した。その際、並列化効率を向上させるために定式化の修正や計算順序の改善を行い、性能を評価した。プログラム構造や実行結果に関してその内容を報告する。

15:35-16:00 **(休憩)**

16:00-16:25 **数値流体解析の並列効率とその GPU による高速化の試み**  
PHAM VAN PHUC (清水建設(株))

数値流体解析においては圧力方程式を解く部分が計算時間の大部分を占め、その解析時間を短縮するために性能の良い解析ソルバを選べる必要がある。本開発では、OpenFOAM 等の流体解析コードを用い、実流体問題において TSUBAME1.2 の 1000 規模 CPU コアの利用により流体解析の並列効率を調べ、計算機の規模により利用している解析ソルバの選定の重要性を明らかにする。また、GPU 化によるそれぞれの解析ソルバの性能を調べるとともに、GPU 用解析ソルバを流体解析コードに組込むことによりその計算の高速化を試みる。

16:25-16:50 **GPU へのコンパクト差分の実装と圧縮性流体計算への適用**  
出川智啓 (電通大)

コンパクト差分法は、3重または5重対角の非対称帯行列を構成し、行列式を解くことで空間差分を求める陰的スキームであり、陽的な中心差分スキームよりも高い空間解像度を持つ。コンパクト差分を用いて多次元空間の差分を計算する場合、同一の係数行列を持った行列式を多数解く必要がある。本発表では、CUDA Fortran を用いてコンパクト差分を GPU へ実装し、圧縮性流体の2次元計算へ適用した結果について報告する。また、行列式の解法を検討した結果についても発表する。

16:50-17:15 **複数 GPU による大規模 LES 乱流計算**  
小野寺直幸\*, 青木尊之\*, 小林宏充\*\*(東工大\*, 慶大\*\*)

工学で用いられるような高いレイノルズ数の流れの直接計算(DNS)は、非常に多くの計算資源と計算時間が必要となるため、乱流モデルを適用する必要がある。ラージエディ・シミュレーション(LES)は、流れの格子解像度以下の成分をモデル化する事で、DNS に比べ、より少ない計算資源で乱流現象を捉えることが可能となる。本発表では、高速演算が可能である GPU を用いて LES を行うとともに、GPU に対して有効な乱流モデルについての議論を行う。また、複数 GPU を用いることで、より大規模で高速な LES を行う。

17:15-17:40 **粒子法の Fermi への実装とその性能評価**  
藤澤智光 (プロメテック(株))

有限要素法・有限体積法・粒子法などランダムメモリアccessを多く含むアプリケーションは、従来の GPU アーキテクチャには不向きであり、十分なパフォーマンスを達成することが困難であった。しかし、Fermi では L1/L2 キャッシュの装備など汎用計算向けの改良が行われ、応用可能なアプリケーションの範囲が広がった。本講演では化学工学の分野で利用されている粒子法による高粘性攪拌解析をターゲットとして、ホットスポットとなる反復解法ソルバの Fermi への実装と高速化性能について報告する。さらに粒子法プログラムのすべての処理を Fermi 上に実装する取り組みと今後の展望について報告する。

18:00-20:00 **(懇親会)**

GPU コンピューティング研究会事務局  
office-gpu-computing@sim.gsfc.titech.ac.jp