

### 分子動力学プログラムを CUDAで60倍高速化

高速化、それこそがコンピューターの存在意義。しかし処理データ量の巨大化に伴い、「CPUは速くなったのに、処理時間はどんどん遅くなっていく…」という悩みを抱えるケースも多いと思います。今回は高速化をテーマとし、CPU並列、GPU化を中心に高速化の事例をご紹介します。



### FORTRAN77で書かれていたプログラムをCUDA Cで書き換えて60倍の高速化を達成!

このプログラムは超臨界状態におけるN<sub>2</sub>/H<sub>2</sub>O混合物の分子動力学 (Molecular Dynamics) を計算するためGPUを活用しています。一般的に、C,H,N,Oを含む爆薬は爆発生成物として高温(1000-5000K) 高圧(1-50GPa)状態のN<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, CO<sub>2</sub>を生成します。そのような極限状態では、N<sub>2</sub>/H<sub>2</sub>O 混合物は、爆轟波背後で相分離- phase separation<sup>[1]</sup>を起こすことが予測されています。我々は、この現象を解析するために開発されたFORTRAN77プログラムをまずCに書き換え、次いで“CUDA化<sup>[2]</sup>”しました。その結果、すべての処理をFORTRAN77で実行した場合と比べて**37~60倍の速度**で計算することが可能となりました。

[1]相分離 - phase separation 同じ種類の分子が集合してクラスターを構成すること。

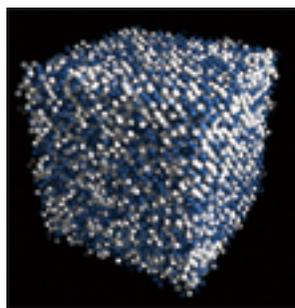
[2] CUDA化 C、C++、FORTRANなどのソースコードをCUDA (NVIDIA が提供するGPU向けの統合開発環境)で再構築すること。

#### 分子動力学計算のGPU化で最大60倍の高速化

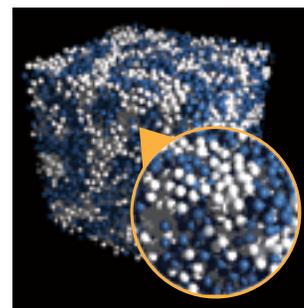
下図は、爆発生成ガス中でN<sub>2</sub>,H<sub>2</sub>O が分離する様子をGPU 計算し、レンダリング用ソフトウェアPixie RenderMan にてレンダリングした画像です。CPU はIntel Core i7 930 2.80GHz, GPU はGeForce GTX480 を使用し、総計算時間は12分でした。

#### N<sub>2</sub>とH<sub>2</sub>Oが分離してクラスターを構成する様子

● 青: H<sub>2</sub>O ○ 白: N<sub>2</sub>



二分子混合体のほぼ最初の状態 (step 10 t=10 フェムト秒)



二相が分離した状態 (step 10400, t=10.4 ピコ秒)

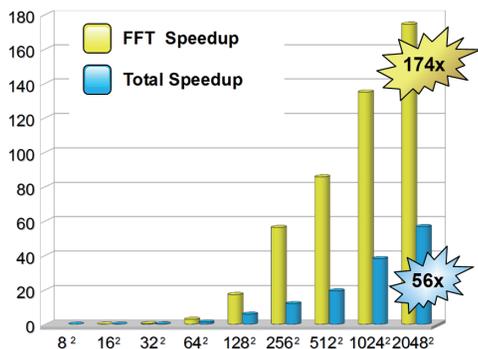
### ポアソン方程式の解法で56倍の高速化

爆発研究所のCUDAインストールサービスは  
初心者も安心のクイックスタートガイド付き!

### CUDA FFTを利用することで、大規模なサイズの二次元ポアソン方程式を56倍の速度で解くことに成功しました。

ポアソン方程式  $U_{xx} + U_{yy} = r$  を解くひとつの方法は、フーリエ変換を使用する方法です。この解法をCPU上で数値的に解くとき、フーリエ変換はFFTWのような高速フーリエ変換ライブラリを使用して行われます。我々のプログラムでは、GPUを使用してポアソン方程式を解きます。FFTはCUDA FFTを使用します。CUDAカーネル上でフーリエ空間上の解を得ることができます。例えば、2048x2048のメッシュサイズの場合、FFTのみでは174倍のスピードアップとなり、CPU-GPU間のメモリー転送を含んだ合計でも**56倍のスピードアップ**となりました。下のグラフは、いろいろなメッシュサイズの場合の比較結果です。

計算環境: CPU: Intel Core i7 930 2.80GHz, GPU: GeForce GTX 470



二次元ポアソン方程式をGPUで解いた場合の対CPU倍率です。(CPU1コアで解いた場合の数値を1とした場合の倍率)。横軸はメッシュ数、縦軸は倍率です。

### CUDA高速化事例の紹介

NVIDIA CUDA ゾーンのCUDA ショーケースには、世界中のプログラマや研究者たちによって開発されたアプリケーションが紹介されています。下記は一例です。詳しくはNVIDIA CUDA ZONE をご覧ください。

#### NVIDIA CUDA ZONE ショーケースからのスピードアップ事例

粒子法によるボルツマン方程式の解法: 120倍、モンテカルロ法: 1000倍、遺伝的アルゴリズム: 2600倍、医療画像の等値面可視化レンダリング: 68倍、三次元CT画像処理: 130倍、MATLAB 演算: 50 - 100倍など。

### 爆発研究所のCUDAサービス一覧

- ◎ GPUプログラム開発
  - ◎ ソースコードのCUDA化
  - ◎ プログラミングサポートサービス
  - ◎ CUDAトレーニングコース開催 (プライベートコースも有ります)
  - ◎ CUDA関連ハードウェアの販売
- お気軽に sales@bakuhatsu.jp までお問い合わせください。

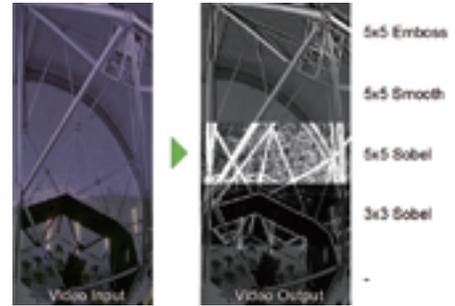
CUDA、OpenGL shaders、マルチコアCPUを使用して40倍の高速化を実現。

近年、再生医療分野の生体細胞の画像処理など、膨大なデータを扱うことが求められる分野において、処理の高速化を図ることが重要な課題となっています。そこで弊社では、GPUを利用した動画のトラッキング処理(対象追跡)とフィルタリング処理において大幅な高速化を実現しました。特に、トラッキング処理においては、毎秒100フレーム以上のHDビデオストリームにおけるトラッキング処理を実行し出力することができます。<sup>[1]</sup>  
さらにビデオストリームのデコード処理、コンボリューションフィルタの適用、再エンコード処理を実行します。これらの処理にGPUを採用することで、毎秒100フレームの処理を可能とし、結果、**CPUベースの画像処理<sup>[2]</sup>に比べて40倍以上の高速化**を実現しました。

[1]MS Office Excel/OpenOffice Calc .csv ファイルにて。

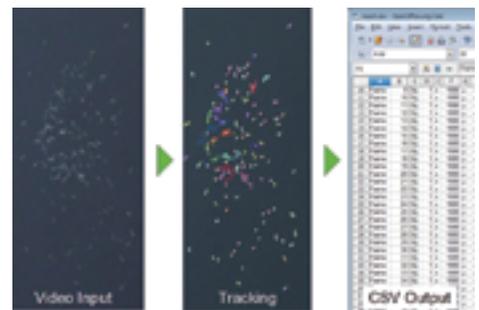
[2]TMPGEncoderによるデコード処理やMATLABによる個別のフレームに対する処理など

■ 画像フィルタリング



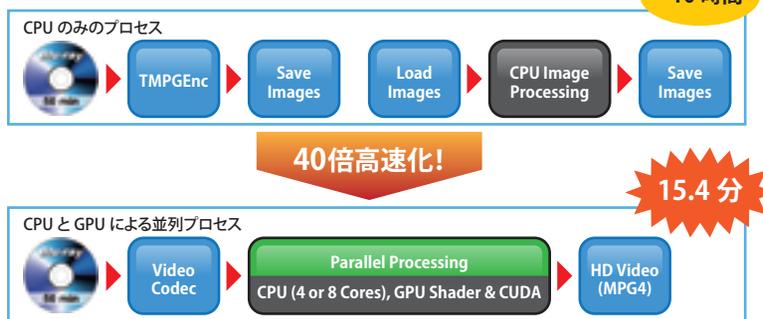
3種類、計4つのフィルタを施しています。

■ 画像からのトラッキング処理。(対象追跡)



トラッキング対象を捕捉してCSV形式でFrame数と座標値を出力します。

■ プロセス比較

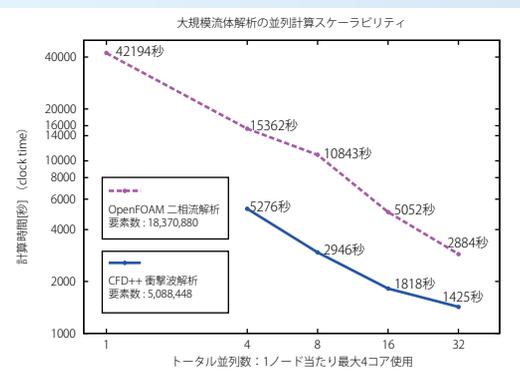


CPUのみの処理で10時間かかる処理(上)が、GPUとCPUの並列処理(下)で15分ほどに短縮されます。およそ40倍の高速化です(Intel Core i7 930 2.80GHz、GeForce GTX 470を使用)。

大規模数値計算の高速化

燃焼や爆発に関する数値解析は爆発研究所にお任せください!

爆発研究所クラスターで大規模流体計算をスピードアップ!



このグラフは、大規模流体計算での並列計算スケラビリティを示しています。計算には、弊社所有9ノードクラスターを使用しました。横軸はトータルの並列数(1コア以外は、各ノード4コア使用)、縦軸は計算所要時間です。流体解析ソルバーには汎用CFDソフトウェアのCFD++<sup>[1]</sup>とオープンソースソフトウェアのOpenFOAM 1.7.x<sup>[2]</sup>を採用しました。

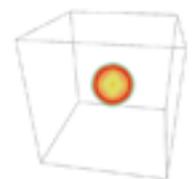
CFD++ - 衝撃波伝搬解析

要素数5,088,448、圧縮性Navier-Stokes方程式、衝撃波を伴う爆発現象の解析です。

OpenFOAM 1.7.x - 二相流解析

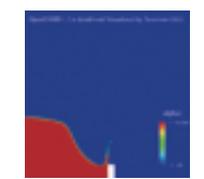
要素数18,370,880、tutorialのdamBreak(VOF法による二相流数値計算)の要素数などを変更した計算です。

■ CFD++ 衝撃波伝搬解析



爆発による衝撃波が周囲に伝搬していく様子。

■ OpenFOAM 二相流解析



二次元のダム崩壊現象の数値解析です。(赤: Water, 青: Air)

**8ノード32並列でのスピードアップ率** OpenFOAM二相流解析では、1コアで約4万2000秒を要した計算が、32並列では約2800秒で計算することができました。**約15倍のスピードアップ**を達成しています。

ハードウェアシステム構成: 以下のPC9台構成。(管理ノード1台、計算ノード8台)  
OS: CentOS 5.4, ネットワークカード: Infiniband SDR (計算ノードのみ) CPU: Intel Xeon(R) X5550 2.67GHz x2, Memory: 12-24GB

[1]CFD++(シーエフディプラス)は米国Metacomp社で開発された汎用CFDソフトウェアです。極超音速から非圧縮性流体までを単一のソルバーで解析することが可能です。

[2]OpenFOAM(オープンフォーム)はOpenCFD社が開発したオープンソースのCFDツールボックスです。ライセンスフリーであるため、大規模計算では大幅なコストダウンにつながる可能性があります。