

HPC と物理学——GPU コンピューティングが拓く新しい世界



古家真之介

エヌビディア合同会社
sfuruya@nvidia.com

自然科学の分野の一つである計算科学は、科学技術計算により支配方程式の解を求めて現象を理解していく。この科学技術計算は非常に時間がかかる計算を実行することが多く、ハイパフォーマンスコンピューティング (High Performance Computing, HPC) の技術が不可欠となっている。例えば計算を高速化するためにアクセラレーターを利用する方法があり、その一つが GPU (Graphics Processing Unit) である。初期の GPU は 3D レンダリングのように決まった処理を実行するのみであったが、プログラマブルシェーダーの登場により処理内容を動的に変更できるようになった。さらに CUDA の開発により、グラフィックス以外のアプリケーションでも比較的容易に GPU を利用できるようになった。

アプリケーションを GPU で高速化するには、大きく分けて3つの方法がある。GPU で高速化されたライブラリを用いる方法、既存の C/C++ や Fortran のプログラムで OpenACC を利用する方法、そして専用の言語である CUDA を用いたプログラムを書く方法である。GPU コンピューティングの黎明期は選択肢が少なく CUDA を用いることが多かったが、最近ではコンパイラが成熟してきたこともあり OpenACC の利用が増えている。

科学技術計算では、対象となる数値計算の規模が大きくなると、スーパーコンピューターを用いるのが一般的である。そのランキング TOP 500 では 2010 年代に入るとアクセラレーターを搭載したものが増えており、GPU が多数を占める。初期の GPU 搭載機として有名なのは、長崎大学の DEGIMA と東京工業大学の TSUBAME で

ある。つまり、最近のスーパーコンピューターのトレンドである GPU の搭載は、日本から始まったのである。

実際のアプリケーションでは、メモリアクセスが速いことを活かして流体解析に用いられることが多かった。分子動力学のシミュレーションも GPU 黎明期からその利用に積極的で、第一原理計算など様々な分野でも使われるようになってきた。最近では機械学習を利用するものもある。第一原理計算の精度で分子動力学のシミュレーションを実行するには、現在では多くても数千原子程度の規模である。しかし機械学習ポテンシャルを用いることにより、第一原理の精度を保ったまま 1 億原子のシミュレーションを実施した例が出てきた。また機械学習だけで物理量を得る方法も開発が進んでおり、例えば Physics-Informed Neural Network (PINN) は、非線形微分方程式で記述される物理法則に従うモデルを構築することができ、流体解析において流速と圧力が通常の流体解析と定性的によく一致するなどの結果を得ている。

これらとは全く異なる新しい流れとして、量子コンピューターも最近話題となっている。そのシミュレーターでは、GPU を用いることにより量子回路シミュレーションに必要な状態ベクトルの演算やテンソルネットワークのシミュレーション速度が飛躍的に向上するのである。

機械学習が GPU で高速化されたことにより、科学技術計算でも機械学習を利用する例が増えている。このように GPU コンピューティングはこれからも新しい世界を切り拓き、様々な分野への適用が広がっていくであろう。

用語解説

3D レンダリング:

物体の三次元形状や表面の質感などのデータから、画像や映像を生成すること。

プログラマブルシェーダー:

モデルを画面に描画するための処理であるシェーディングを、プログラミングすることにより処理内容を動的に変更できるようにしたもの。

CUDA:

NVIDIA により開発された GPU 向けの並列コンピューティングプラットフォームおよびプログラミングモデル。C/C++ や Fortran などの開発言語や、GPU で高速化されたライブラリなどを提供する。

OpenACC:

異種プロセッサで構成されるヘテロジニアスなシステム向けの並列プログラミング言語。C/C++ や Fortran のプログラムに、ディレクティブを挿入することによって高速化などを指示する。

ディレクティブ:

プログラム中で、コンパイラに指示を与えるための文。

DEGIMA:

長崎大学工学部先端計算研究センターで開発された、GPU を搭載したスーパーコンピューター。

TSUBAME:

東京工業大学学術国際情報センターで開発された、GPU を搭載したスーパーコンピューター。