

GPUコンピューティング・ プロセッサ搭載の ワークステーションを導入し 先端サイエンス分野の HPC環境を強化

公立大学法人 大阪府立大学 大学院理学系研究科は、GPUコンピューティング・プロセッサ「NVIDIA Tesla C1060」を搭載した「Dell Precision T5500」をはじめとした、128台のワークステーションで構成された並列研究用クラスター・システムを導入。様々な数値計算や量子化学計算（分子動力学計算、分子軌道計算）の汎用基盤としての活用を推進している。



2005年4月、大阪府立大学、大阪女子大学、大阪府立看護大学の3大学を統合すると同時に法人化されたことにより、公立大学法人 大阪府立大学は新たな歩みを開始した。最近では、研究テーマを戦略的に設定したプロジェクト型の研究スタイルにも挑戦。学科や学部を超え、社会ニーズを起点とした研究を推進し、研究資源を重点投資することで成果の創出を加速させている。そうした取り組みにおいてサイエンス分野の先頭に立っているのが大学院 理学系研究科であり、今回導入したGPUコンピューティングをベースとしたHPC環境を活用することで、新たな現象の発見とその原理の解明を目指している。



ソリューション
・HPC



カスタマー・プロフィール

会社名：公立大学法人大阪府立大学

業種：教育機関

創立：1945年（旧大阪府立大学）

Webサイト：<http://www.osakafu-u.ac.jp/>

課題

2000年にHPC環境を構築したが、年月を経るとともに世の研究レベルに見合った、さらに大規模な計算処理能力が求められるようになった。そうしたことから情報数理論理学、物理科学、分子科学、生物科学の4専攻が共通に利用できる、高度な計算処理能力を有したHPC環境の構築を決定した

ソリューション

●「NVIDIA Tesla C1060」を搭載した「Dell Precision T5500」をはじめ、合計128台のワークステーションで構成された並列研究用クラスター・システムによる、GPUコンピューティング・ソリューションを採用

導入効果

Get IT Faster —迅速なITの導入—

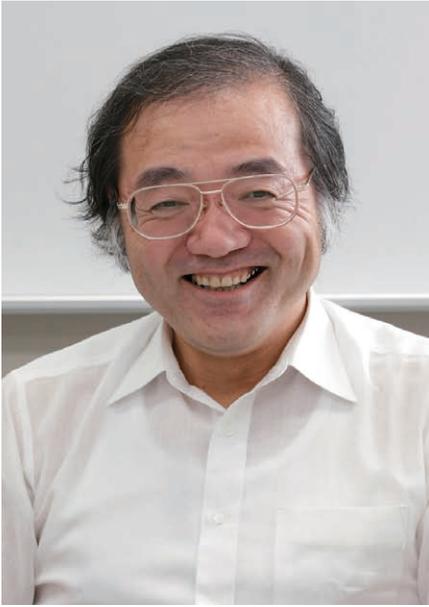
●GPUコンピューティング・プロセッサ、NVIDIA Tesla C1060をはじめ、業界標準の最新テクノロジーを採用したシステムの導入により、コストパフォーマンスに優れたHPC環境を構築

Run IT Better —IT運用・保守の簡素化—

●Dell Precision T5500をプラットフォームとして採用。従来のサーバ・システムやクラスター設定機器などと比較し、処理能力の向上はもちろん、初期導入コストや消費電力を削減
●ワークステーション本体からGPUコンピューティング・プロセッサまで、デルの一貫したサポート体制のもとでメンテナンスを実施

Grow IT Smarter —スマートなITの発展—

●並列研究用クラスター・システムを構成するファイバー・サーバ、ゲートウェイ、ネットワーク・スイッチ、無停電電源装置に至るまでワンストップで提供



専攻の垣根を越えた 汎用的なHPC環境を待望

公立大学法人 大阪府立大学 (以下、大阪府立大学) の大学院理学系研究科は、情報数理学、物理学、分子科学、生物科学の4専攻(博士前期課程・博士後期課程)を設置し、理学部における基礎教育を基盤として、自然科学の基礎から最先端までを一貫して学習できる教育・研究体制を整備。新しい現象の発見とその原理の解明を目指し、サイエンスのフロンティアを切り拓く様々な研究に取り組んでいる。

そうした中で同研究科は2008年10月より、4専攻の共通資産として数値計算や量子化学計算(分子動力学計算、分子軌道計算)などを担うHPC(High Performance Computing)環境の強化に向け、新たなITインフラ導入の検討を進めてきた。大阪府立大学大学院理学系研究科の小関史朗教授は、こう語る。

「既存のHPC環境は2000年に導入されたものであり、世の中の研究レベルに見合った計算能力を提供

できていませんでした。例えば、私が主な研究テーマとしている有機ELなどの材料設計においても、1つのシミュレーション結果を得るまで数カ月を要することがあるなど、より高速なコンピューティング基盤を待望していました。また学内においても、専門分野の垣根を越えて汎用的に活用可能なHPC環境を導入しようという機運が高まっていたのです」

GPUコンピューティングにより 数値計算のスピードアップを狙う

従来、HPCと言えば、スーパーコンピュータや大規模なグリッド・コンピューティングなどのシステムが注目されてきた。しかし、それらはコスト面でハードルが高く、導入できるのも一部の研究機関に限られていた。また、研究者は自身の本来の分野に加え、コンピュータに関する専門知識を習得する必要があるなど、運用面においても決して容易とは言えないのが実情であった。

「NVIDIA Tesla C1060を搭載したDell Precision T5500は、高度な計算処理能力を持ちながら、低消費電力や省スペースといったファシリティ面でも高い配慮がなされています。また、デルによる万一のトラブル時のメンテナンス体制も完備されており、私たちにとって非常に扱いやすいマシンであったからこそ、迅速な導入が可能であったと言えます」

公立大学法人 大阪府立大学 大学院理学系研究科 小関史朗教授

そうした中で同研究科が着目したのが、PCクラスタによる並列コンピューティング、そして「GPUコンピューティング」のアプローチである。GPUコンピューティングとは、画像処理専用プロセッサである「GPU(Graphics Processing Unit)」を汎用的な計算処理に利用するという手法。CPUとは異なる独自の進化を遂げた結果、格段に高い処理能力を持つに至ったGPUのメリットを、画像処理以外の数値計算にも積極的に活かしていくという取り組みだ。

大阪府立大学 大学院理学系研究科(情報数理学専攻)において、計算クラスタ技術研究所のリーダーを務める藤本典幸教授は、次のように話す。

「私はコンピュータ・サイエンスを専門分野として並列コンピューティングのアーキテクチャを研究してきた経緯から、GPUコンピューティングにも早くから興味を持っていました。しかし、数値計算を3次元レンダリングに沿った形式に落とし込まなければならないなど、そこで要求される複雑なプログラム開発の手間を考えると、率直なところ、使いこなすのはかなり難しいとも考えていました」

その概念を覆したのが、NVIDIAがGPU向けに発表した並列プログラミングの統合開発環境「CUDA(Compute Unified Device Architecture)」だったという。

「このアーキテクチャの最も優れている点は、スレッド切り替えのオーバーヘッドがゼロであることです。従来のアーキテクチャでは、並列処理の多重度を上げれば上げるほどオーバーヘッドが大きくなり、効率が低下してしまうという問題がありました。これに対してCUDAを活用すれば、並列処理の多重度に応じてパフォーマンスをリニアに向上できる可能性があります。加えて、C言語を使ってプログラミングできるメリットも大きく、様々な数値計算に応用できるに違いないと確信しました」(藤本教授)

現在、CUDAは、NVIDIAの「GeForce(8シリーズ以上)」や「NVIDIA Tesla」、「NVIDIA Quadro」といったGPU製品について専用ドライバが提供されている。例えば、「NVIDIA Tesla C1060」にCUDAを組み合わせてプログラム開発を行った場合、ボード1枚あたり240個の演算コアと4GBのメモリを搭載し、最大933GFlopsの浮動小数点演算性能を発揮する同GPUの能力を最大限に引き出すことが可能となる。

また、小関教授も「例えば、原子や分子の量子化学計算を行うプログラムにGAMESS(The General Atomic and Molecular Electronic Structure System)というものがあります。GAMESSのベンチマークを様々なマシン環境で実行し、そのデータを収集・調査してきた中で、NVIDIA TeslaとCUDAを用いて非

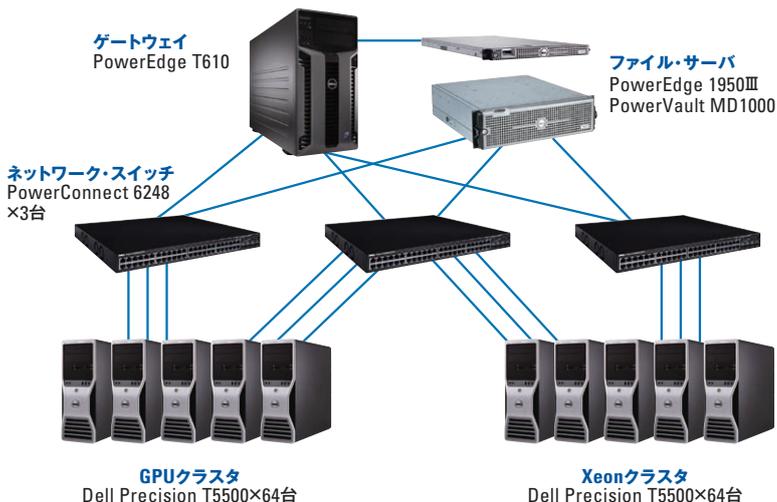
常に良好な結果を得られたという評価を耳にしており、私自身の研究でもぜひ活用してみたいと考えました」と語る。こうして同研究科は、GPUコンピューティングを前提とした新HPC環境の要求仕様を作成。2009年6月に入札を募ったのである。



「NVIDIAの開発環境であるCUDAを活用すれば、並列処理の多重度に応じてパフォーマンスをリニアに向上できる可能性があります。加えて、C言語を使ってプログラミングできるメリットも大きく、様々な数値計算に応用できるに違いないと確信しました」

公立大学法人 大阪府立大学 大学院理学系研究科 藤本典幸教授

システム構成図



今回導入されたHPCシステム

合計128台のワークステーションを 連携させた並列計算クラスタ・システム

ベンダー数社による入札が行われた結果、最終的に選択されたのが、デルのワークステーション「Dell Precision T5500」128台をギガビット・イーサネット

で結んでインフラを構成するという、HPCテクノロジーによる並列計算研究用クラスタ・システムの提案だった。具体的には合計128台のDell Precision T5500のうち、半分にあたる64台にNVIDIA Tesla C1060を搭載、HPC環境向けにGPUコンピューティング・ソリューションを提供するというものである。システムの中核となるゲートウェイにはサーバ製品のPowerEdge T610を選択。また、ファイル・サーバ環境には、信頼性の面で高い評価を有するDell PowerEdge 1950 IIIおよび、Dell PowerVault MD1000が採用されている。

このシステムは2009年8月中旬に大阪府立大学内に納入、構築が開始され、同年9月にはインテグレーションを完了した。稼働を開始した同システムを前にして、藤本教授はこう評価する。

「当初は私たちが提示した予算の範囲内で、ここまで大規模なインフラが導入できるとは考えていなかっただけに、本当にうれしい驚きです。また、NVIDIA Tesla C1060を搭載したDell Precision T5500は、高度な計算処理能力を持ちながら、基本的にクライアント・マシンとして設計された機器であるため、低消費電力や省スペースといったファシリテイ面でも高い配慮がなされています。さらには、デルによる万一のトラブル時のメンテナンス体制も完備されており、私たちにとって非常に扱いやすいマシンであったからこそ、迅速な導入が可能であったと言えます」

また、今回提案されたDell Precision T5500のパフォーマンスはもちろん、ゲートウェイやファイル・サーバ、スイッチと、HPCシステムのコアとなる機器は全てデル製品で揃えられたことで、トータルシステムとしての安定性に加え、保守の簡易性が高くなったことも評価ポイントだという。

並列化アーキテクチャの観点から 研究者を支援する方法論を確立

この新しいHPC環境が持つ高度な計算処理能力は、今後どのように活用されていくのだろうか。大学院理学系研究科の分子科学専攻において分子解析科学分野を専門とする麻田俊雄准教授は、このように語る。

「私が主に担当している材料設計のシミュレーションでは、複数の分子について各々の化学反応の経路をトレースしていく処理を行います。この時、例えば、Nudged Elastic Band法という手法を用いたとすると、個々の構造における量子学計算や力場計算を並列化し、複数のCPUコアに分散させて実行するこ



導入システム / ソリューション

GPUクラスタ

- Dell Precision T5500 × 64台
- CPU：インテル® Xeon® X5550 (2.66GHz)
- GPU：NVIDIA Tesla C1060 × 1

Xeonクラスタ

- Dell Precision T5500 × 64台
- CPU：インテル® Xeon® X5570 (2.93GHz) × 2

ゲートウェイ

- Dell PowerEdge T610 × 1台
- CPU：インテル® Xeon® X5550 (2.66GHz) × 2

ファイル・サーバ

- Dell PowerEdge 1950 III × 1台
- Dell PowerVault MD1000 × 1台 (13TB)

その他

- ネットワーク・スイッチ
Dell PowerConnect 6248 × 3台
- 保守用モニタ1708FP、G2410 × 各1台
- 無停電電源装置
APC Smart-UPS 1500 × 2台

サービス

- デル・サポート

「NVIDIA Tesla C1060が持つ240個の演算コアを搭載し、単体性能の向上したDell Precision T5500を複数台連携させることにより、さらなるスピードアップが期待できます。これまで使ってきたコンピュータに比べ、少なく見積もっても20倍、上手くすれば40倍程度のスピードアップは可能であると期待しています」

とで、処理速度を上げることができます。ただ、最新のクアドコア・プロセッサをハイパースレッドで利用したとしても、最大で8多重にしかありません。そこに、NVIDIA Tesla C1060が持つ240個の演算コアを新たに利用できるとなれば、計算効率が大幅に改善されるのは明らかです。こうして単体性能が向上したDell Precision T5500を複数台連携させることにより、さらなるスピードアップが期待できます。これまで使ってきたコンピュータに比べ、少なく見積もっても20倍、上手くすれば40倍程度のスピードアップは可能であると期待しています」

仮に40倍のスピードアップが実現すれば、これまで数カ月を要していたシミュレーションも1週間以内で完了することになり、研究効率の画期的な向上を図ることができる。

「私たちが手がけている材料設計やそれを支える分子解析といった分野の計算は、もともと効率的な並列化が難しく、加えて、最低でも倍精度の浮動小数点演算を必要とするなど、GPUコンピューティングを本格的に使いこなせるようになるまでには、様々な課題が残っていることも事実です。それでも工夫次第では、今回導入した64台のNVIDIA Tesla C1060搭載のDell Precision T5500で並列化、ならびに連携処理を行うことは十分に可能と考えられています。その意味では、シミュレーションを40倍スピードアップすることも決して無理なことではありません」と小関教授も、今後を見据えている。

こうしてますます高まっていくGPUコンピューティングへの期待に応えるべく、藤本教授は並列化アーキテクチャの専門家として、小関教授や麻田准教授をはじめとする研究者たちの取り組みをサポートしていく意向だ。

「各自が抱えている問題から並列性を抽出し、最適な形でアルゴリズム化していく過程で伴う苦労そのものは、昔も今後も変わらないと思います。しかし、NVIDIA TeslaやCUDAをどう使えばその能力を最大限に引き出すことができるのか、アーキテクチャの側面から示唆できることもたくさんあるはず。私自身もこの新しいGPUコンピューティングの基盤を利用しながら、様々なアイデアを実証し、多くの研究者

を支援するための方法論を確立していきたいと考えています」(藤本教授)

NVIDIA Tesla C1060を搭載したDell Precision T5500をプラットフォームとするこの新たなHPC環境の挑戦的な活用を通じて、同研究科は様々な“発見”を世の中にもたらしていくに違いない。



From Solution Partner

長期間にわたって研究活動を支える信頼性を重視し NVIDIA TeslaとDell Precision T5500を選択

HPCテクノロジーズ株式会社

www.hpc-technologies.co.jp/

HPCシステムの提案・構築を事業の中核に据え、「HPCに求められる基本的な部分を着実に固める」ことを事業理念とし、科学技術の発展に積極的に貢献することを目指す。HPCハードウェア構築とHPCシステムインテグレーションサービスを統合し、高水準のHPC環境を提供し続けてきたことにより、顧客から高い評価を獲得している。

本社：東京都千代田区飯田橋一丁目12番7号
設立：2006年7月13日
資本金：3200万円

大阪府立大学大学院理学系研究科が新HPC環境を導入するにあたり、公募入札の要件としたGPUコンピューティングのソリューションを設計する上で、HPCテクノロジーズが特に重視したのが信頼性である。同社代表取締役社長の鈴木則道氏は、次のように語る。

「コストを抑えることだけを考えたなら、廉価なワークステーションにPC向けのGPUボードであるNVIDIAの『GeForce』を装着して提案するという選択肢もありました。しかし、私たちに、まったくその気はありませんでした。コンデンサから冷却ファンの素材に至るまで、使用パーツの規格を厳密に取り決めたプロフェッショナル仕様のNVIDIA Teslaを採用すべきという考えを頑として持っていたからです。また、万が一トラブルが起こった際にもNVIDIA Teslaの搭載をメーカーとしてサポートしたDell Precision T5500であれば、ワークステーション本体からGPUボードまで、デルの一貫したサポート体制のもとでスピーディな対応が可能です。今回の私たちの提案は、お客様に安心して研究活動に専念していただくための、ベストなソリューションであると確信しています」

もう一つの大きなポイントとして挙げておきたいのが、ファシリティへの配慮である。大規模なHPC環境を構築する上では、サーバをプラットフォームとして用いるのが一般的だ。ただし、サーバを大量に設置するためには、電源や冷却設備、床の耐荷重などの強化を図る必要が出てくる。

鈴木氏は、「大学では企業のような本格的なデータセンターを持たず、教室や研究室にコンピュータ設備を設置するケースがよくあります。今回のシステムも理学系研究科が主体となって導入するものであり、ファシリティ面にあまりコストをかけることはできません。そうした意味からも、様々な制約のある設置環境にも柔軟に対応し、安定して稼働させることができるワークステーションとして、Dell Precision T5500は最適なプラットフォームでした」と語る。



HPCテクノロジーズ株式会社
代表取締役社長
鈴木則道氏

大阪府立大学のHPCシステム構築を
サポートしたデル・スタッフ



公共営業本部
アカウント・エグゼクティブ
大森章雅



SIMPLIFY YOUR TOTAL SOLUTION AT DELL.COM/Simplify

©2009 Dell inc.

●PowerEdge, PowerVault, DELLロゴは、米国Dell Inc. の商標または登録商標です。●その他の社名及び製品名は各社の商標または登録商標です。●取材 2009年
7月15日
〒512-8589 川崎市幸区堀川町580番地ソリッドスクエア東館20F
Tel. 044-542-4047 www.dell.com/jp

