



# 日本ゼオン株式会社 様

www.zeon.co.jp

## GPUとオープンソースのソフトウェアが導く日本の「ものづくり」

日本ゼオンは、1950年の設立から60年以上を数える化学メーカー。1952年に日本で初めて塩化ビニル樹脂の生産を開始したほか、合成ゴムの製造も1959年に日本の民間企業として初めて開始するなど、創業当時から先進的でスピーディな企業経営を展開している。これまでに、エラストマー技術やC5総合利用技術、シクロオレフィンポリマー（COP）技術をはじめとした独創的な技術を継続的に創出。現在では、携帯電話や液晶テレビなどの電化製品から香水をはじめとする生活雑貨に至るまで、多彩な分野に同社の製品が利用されている。例えば「ZEONEX」と名付けられた光学用樹脂はカメラレンズの材料として多くの携帯電話やスマートフォンが採用。もっともガラスに近い樹脂材料として高いシェアを獲得しており、同社を代表する独自素材のひとつとなっている。

今回お話を伺ったのは、上記のような新素材や新技術の研究・開発のベース部分を担っている総合開発センター 基盤技術研究所 理学博士の本田隆氏。本田氏は、通商産業省（現在の経済産業省）の提案による産学連携プロジェクトで開発された統合的なシミュレーター「OCTA（Open Computational Tool for Advanced material technology）」を用いて、さまざまなソフトマテリアルを解析。ミクロな分子特性とマクロな材料特性を仮想実験技術で結びつけている。OCTAは「COGNAC」「PASTA」「SUSHI」「MUFFIN」と名付けられた4つのシミュレーションエンジンと、「GOURMET」というシミュレーションプラットフォームで構成。オープンソースかつマルチプラットフォームであることから、汎用性や拡張性の高さが特徴となる。4つのエンジンは解析するソフトマテリアルのスケールなどによって使い分け、GOURMETは共通で利用される。

今回は、そのエンジンのひとつ「SUSHI」をフォーカス。SUSHIは「Simulation Utilities for Soft and Hard Interfaces」の略称で、平均場理論に基づいて直鎖高分子やブロック高分子のブレンドが作る自己組織構造を計算で予測。並列化が有効であることからGPUコンピューティングとの相性がよく効果も高い。化学の分野でGPUコンピューティングがどのようにいかされているのか。OCTAやSUSHIのソフト開発やGPUの導入に携わった本田氏に、GPUコンピューティングの恩恵や今後の展望などについて語ってもらった。

### GPUコンピューティングで相分離シミュレーションが約19倍も高速化

—シミュレーションソフトの開発やGPUコンピューティングを手がけるようになったきっかけは？

**本田氏**：OCTAの開発に私が携わるようになったのは1998年。名古屋大学で行われた通商産業省（現在の経済産業省）主導の「国家産業技術研究開発制度（ナショプロ）」によるOCTA開発の企画に参加したのがきっかけです。このプロジェクトは2002年まで続けられましたが、開発したコードは計算方法が多いうえに1コアのCPUで計算していたため、解析処理にかなりの時間がかかりました。プロジェクト終了後も「誰か並列化して高速化してくれないか」とずっと考えていましたが、10年経っても誰もやってくれない。結局、最後は自分でGPUによる高速化を試みたという経緯があります。

GPUを使い始めたのは3年前ほど前の2010年。「GPUを使った高速化がある」という話を聞き、CUDAやOpenCLなどの本を読んで始めました。自分でGeForceを購入して試したりもしたのですが、倍精度演算をサポートしない物で試していた事もあり、中々上手くいきませんでした。その後倍精度対応したのも購入して試しましたが、仕事というよりは個人レベルで「とりあえずやってみよう」という段階だったので、チューニングが上手くいかず思ったようなパフォーマンスは出せませんでした。

そんな中、一昨年の2011年に東京工業大学のスーパーコンピュータ「TSUBAME2.0」の産業トライアルユースの話聞き、SUSHIの改良を申請したところ、無事採択され、「TSUBAME2.0」を無償で利用できるチャンスができたので、会社でもOCTAとSUSHIの改良を申請、Tesla GPUを導入し、やっと実用レベルでの高速化がはかれるようになりました。

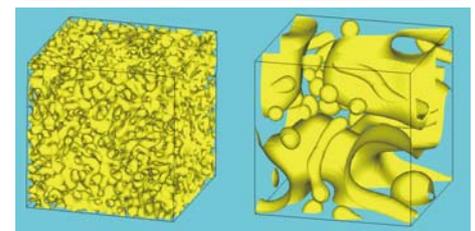
—SUSHIではどのような解析を行っているのでしょうか？

**本田氏**：SUSHIでは現在、SIS（スチレン系熱可塑性エラストマー）をはじめとする高分子のシミュレーションを行っています。高分子にはシミュレーションを行っています。高分子には前提として「異種の高分子は混ざりにくい」という特性があり、2つの異なる高分子を混合しようとしても時間が経つと分離してしまう「相分離」と呼ばれる現象が起こります。この相分離が全

体の構造や性質に変化をもたらすため、相分離の現象や構造をシミュレーションによって解析すれば、さまざまな材料設計に役立てることができるわけです。

例えば、接着剤として利用されているSISは、構造を変えることでゴム弾性を持ったフィルム状の材料にすることが可能で、これはおむつのフィルム材料として利用されました。こういった取り組みによって、最終的にはエコや地球環境に貢献することも重要かと思えます。またSUSHIを活用すれば、まだ解明されていないソフトマテリアルのソースを明らかにすることもできます。そういった意味では「未知の構造を把握する手法」ともいえるでしょう。

相分離のイメージ

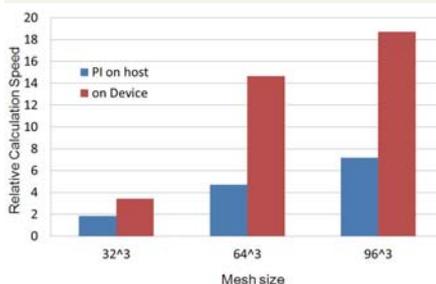


相分離初期

相分離後期



GPU 上でのSUSHI の速度比較:



鎖長N = 20、ブロック比f = 0.35、システムサイズ17:23 (323 メッシュ時)

—GPUコンピューティングでどの程度の高速化がはかれましたか？

**本田氏**：SUSHIでは平均場理論に基づいた高分子の「SCF法」を利用しており、「有限差分法」を用いて電子系と同じような繰り返し計算を行っています。さらに、動力学を使った無秩序状態からの相分離シミュレーションを3次元で行う場合には、流体力学の概念も利用しないと正確なデータが得られません。先に挙げた繰り返し計算は流体力学の解析でも行われるため、結果的に2回の繰り返し計算を行います。つまり、非常に負荷の高いシミュレーションになるわけです。しかし、有限差分法は並列化に向いている手法であることから、GPUコンピューティングを利用することで大規模計算が可能になりました。これまで3次元でのシミュレーションは負荷が高く2次元で計算するなどの解決策を取っていましたが、Teslaを使えば3次元でも問題なく計算できるという感覚です。

実際、先ほどお話ししたTSUBAME2.0を使いSUSHIとTesla 1枚を組み合わせて計算した場合は、1コアのCPUのみと比較して無秩序状態からの相分離シミュレーションを約19倍も高速化できました。スケールの言えば、一辺の長さをそれぞれ3倍にした27倍の3Dモデルを計算できるイメージです。今後さらにマルチGPU

による並列化なども利用できれば、より大規模な計算も可能になるでしょう。

### SUSHIのソースコードは公開されている！

—GPUを導入したことで、高速化以外のメリットもありましたか？

**本田氏**：シミュレーションを始めた当時は、CPUを複数使ったpthreadでの並列化を試みたことがあります。しかし、全体の2/3しか並列化できなかったこともあり3倍以上の高速化は望めませんでした。一方で、GPUはTeslaを1枚載せるだけで約19倍も高速化できたわけで、同程度のスピードアップをするために必要なCPUの金額を考えたら非常に有益です。

また、CPUで計算を行うと、それだけでコアが占有されてしまいます。現在使っているPCのCPUはハイパースレッドを含めて24コアになりますが、GPUを使った場合には1コアしか使いません。1コア+1GPUで動いているので、残りのコアは普通に作業に利用できるため、計算にPCを占有されて「他の作業ができない」ということがないわけです。これなら、例えば1か月間計算を回しっぱなしにすることも可能で、計算専用のPCを確保する必要もありません。また24コアのPCクラスターでは電気代もかかりやすく、ハードウェアが故障した際の修理代なども安くはありません。そういった点を踏まえれば、コストパフォーマンスにも優れているといえるでしょう。

—OCTAやSUSHIはオープンソースですが、その意義とは？

**本田氏**：SUSHIはOCTAのエンジンとして以前から公開されていますが、GPU対応した最新バージョンもTSUBAME2.0で作られた成果として2013年の初夏に公開されます。実際、自社で抱えていてもテストまで手が回らないという背景もあるので、公開して多くのユーザーに使って

き不具合情報を寄せてもらう方がテストの費用を省けコストダウンにもつながるといった側面があります。

また、OCTAコミュニティとしてはソースコードを公開する事でデメリットが生まれるとも考えていません。公開しないで数人しか使っていないソースコードは開発のモチベーションを保つのが大変です。逆にオープンソースで共有して多くの人に使ってもらえば、ユーザー数が増えてコミュニティも生まれモチベーションも維持できます。また、多数の人に利用してもらえるようにOCTAではユーザーインターフェースの作成に多くの時間を割き、マニュアルも充実しています。つまり、利用されることを前提として設計されているのです。産業界では「ものづくり」という言葉がよく使われますが、日本の「ものづくり」の基盤を支え競争力を高めるためにも、今後もOCTAのソースコードの公開は続けます。



日本ゼオン  
総合開発センター 基盤技術研究所  
博士(理学)

本田 隆氏

## MAS-XE5-Silent

MAS-XE5-Silentは、GPU専業メーカー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ニターマシンは、CPU冷却を水冷化し、遮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
- 16コア/24スレッドを実現するXeon SandyBridge-EP (Romleyチップセット)を搭載。  
CPUでもGPUでも納得のパフォーマンスを実現最大搭載メモリ512GB、最大HDD/SSD搭載台数6基、  
infinibandオプションなど抜群の拡張性オンサイトサポート(出張修理)オプションも選べるG-DEPの安心サポート体制



詳しい製品情報やカタログはこちら

<http://www.gdep.jp/>

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

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 Mail : sales@gdep.jp

- NVIDIA, NVIDIA/TESLAは、NVIDIA Corporationの登録商標です。
- ELSA (エルザ) は、テクノロジージョイント株式会社の登録商標です
- 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2013年4月現在の情報です。

