

論文 / 著書情報
Article / Book Information

題目(和文)	GPUを用いた多様な計算プラットフォーム上で動作する実時間制御3次元可視化分子運動シミュレーションに関する研究
Title(English)	A Study of a GPU Based Real-time 3D Live Controlled Molecular Kinetics Simulation on Multiple Computing Platforms
著者(和文)	GUTMANN GREGORY
Author(English)	Gregory Gutmann
出典(和文)	学位:博士(工学), 学位授与機関:東京工業大学, 報告番号:甲第10379号, 授与年月日:2016年12月31日, 学位の種別:課程博士, 審査員:小長谷 明彦,寺野 隆雄,新田 克己,山村 雅幸,小野 功
Citation(English)	Degree; Conferring organization: Tokyo Institute of Technology, Report number:甲第10379号, Conferred date:2016/12/31, Degree Type:Course doctor, Examiner:,,,,
学位種別(和文)	博士論文
Category(English)	Doctoral Thesis
種別(和文)	審査の要旨
Type(English)	Exam Summary

(博士課程)

論文審査の要旨及び審査員

報告番号	甲第		号	学位申請者氏名		Gregory Spence Gutmann	
論文審査 審査員		氏 名		職 名		氏 名	職 名
	主査	小長谷 明彦		教授		小野 功	准教授
	審査員	寺野 隆雄		教授	審査員		
		新田 克己		教授			
		山村 雅幸		教授			

論文審査の要旨（2000 字程度）

本論文は「A Study of a GPU Based Real-time 3D Live Controlled Molecular Kinetics Simulation on Multiple Computing Platforms」というタイトルであり、英文 6 章から成っている。

第 1 章「Introduction」では、本研究の背景となる微小管滑走実験および汎用グラフィックプロセッサユニット（GPU）計算技術について紹介している。鎖のように粒子を繋いだオブジェクトとして微小管を表現し、GPU 上に構築した実時間可視化シミュレーションを用いて多数の微小管が織りなす運動パターンの創発現象を計算機上で再現するための研究課題とその接近法について述べている。

第 2 章「Molecular Gliding Assay Model」では、微小管滑走運動のシミュレーションモデルとして鎖自己運動モデルを提案している。鎖自己運動モデルでは数十個から数百個の粒子を鎖のように繋いだオブジェクトとして微小管を表現し、各粒子間に Lennard-Jones 力場および Flocking Algorithm による相互作用を働かせることで数千個から数万個の微小管の運動をシミュレーションしている。微小管を粒子の鎖として表現することにより、個々の微小管の相互作用から発生する微小管の並進運動や交叉運動に加えて、多数の微小管の相互作用から発生するリングや渦などの運動パターンの創発現象がシミュレーション上でも再現できると述べている。

第 3 章「Single GPU Performance」では、シミュレーションを実時間で可視化するために必要なレンダリング性能および計算性能を明確化し、それらを実現するための GPU 高速化技法を提案している。GPU 高速化技法として、空間を二次元格子状に分割し、格子単位に相互作用の対象となる粒子を検索する格子ソート法およびオブジェクトごとに並列に相互作用の有無を検査する分割並列検索法について述べている。

第 4 章「Multi-GPU Performance」では、2 基あるいは 4 基の GPU を用いた場合の並列化技法について述べている。GPU が 2 基の場合は 1 基をレンダリング用にもう 1 基を計算用に用いて両者のプロセスを非同期に実行させることでデータ転送のオーバーヘッドを最小化できると述べている。また、GPU が 4 基の場合はタスク管理を CPU 側で行うよりも、1 基の GPU をタスク管理専用として用いるほうがアイドル時間を削減でき、GPU の台数に比例した性能を達成できると述べている。

第 5 章「Distributed Real-time Simulation」では、レンダリング用ノードと計算用ノードがネットワーク上で分散している場合の分散並列化技法について述べている。分散環境ではレンダリングおよび計算はそれぞれ複数の GPU を用いて高速化できるが、計算用ノードとレンダリングノードの間の通信がボトルネックとなる。この問題を解決するために可変データストリームを導入し、広い

領域を表示する場合はフレームの更新レートを低くし、狭い領域にズームインした場合は更新レートを高めることで総データ転送量を抑制している。また、計算ノードの GPU 数に応じた画面領域分割を行い、オーバーラップ領域を最小化することで各 GPU での計算の独立性を確保している。これにより、分散処理環境においても GPU の台数に比例した実時間シミュレーションを実現することができると述べている。

第 6 章「Conclusion」では、本研究の結果がまとめられている。GPU に関する様々な高速化技法を導入することにより、単体 GPU を用いた計算機、2 基または 4 基の GPU を備えた計算機、さらにはローカルエリアネットワークで結合された複数の GPU を備えた計算機においても、GPU の台数に比例した実時間シミュレーション性能を実現し、微小管滑走運動を計算機上で再現したことについてまとめられている。

以上の通り、本論文では、微小管滑走運動を題材に、GPU を用いて実時間でシミュレーションするシステムを構築した。本システムは単体 GPU、2 基あるいは 4 基の GPU を備えた計算機および複数の計算機からなる分散環境でも動作するマルチプラットフォームアーキテクチャであり、GPU の数に比例した性能を達成した。本システムを用いることで、数万本の微小管が織りなす運動パターンを鎖自己運動モデル上で創発するためのパラメタ条件を探索することに成功した。本研究の結果により、実時間シミュレーションという今までにない高性能計算技法の有用性を実証するとともに、微小管滑走運動の研究者に有用なシミュレーションツールの開発に成功した。これらの成果は工学上貢献することが大きい。よって、博士（工学）の学位を与えるにふさわしいものと認める。

注意：「論文審査の要旨及び審査員」は、東工大リサーチリポジトリ(T2R2)にてインターネット公表されますので、公表可能な範囲の内容で作成してください。