論文内容の要旨

論文題目：New approaches to high-performance N-body simulations — high-order integrator, new parallel algorithm, and efficient use of SIMD hardware

（高性能 N 体シミュレーションへの新しいアプローチ−高次積分法、新しい並列アルゴリズム、SIMD ハードウェアの有効活用）

氏名　似鳥　啓吾

本論文では、衝突系 N 体計算のためのいくつかの高速化手法について述べる。

衝突系の計算では、粒子の散乱や二体緩和の効果が系の進化に重要な影響を与える。衝突系の例としては、惑星系形成、球状星団、銀河中心などがあげられる。衝突系の計算では幅広いタイムスケールに対応すること、近接遭遇を正しく取り扱うこと、粒子の軌道を正確に積分することが要求され、このため、近似を用いない直接計算法と粒子ごとに独立の時間刻みを与える「独立時間刻み法(Aarseth 1963)」の組み合わせが主に用いられる。本論文ではこの独立時間刻み法の高速化、高精度化について述べる。

まずはじめに、6 次精度及び 8 次精度の Hermite 積分法について述べる。これまで衝突系の計算でよく用いられてきたのは、加速度の 1 階微分(jerk)までを解析的に計算して用いる 4 次の Hermite 積分法(Makino and Aarseth, 1992)である。我々は、2 階微分(snap)もしくは 3 階微分(crackle)程度までの計算であれば現実的な計算コストで実現できることに着目し、6 次／8 次精度の積分法を構築した。加速度のみの場合から 3 階微分までを計算する場合の相互作用あたりの浮動小数点演算数を列挙してみると、３８、６０、９７、１４４となる。6 次の積分法は、典型的な要求精度（エネルギーの相対誤差が 10^{-8} 程度）であれば、4 次のものの 3 倍程度の刻み幅をとることができる。演算数と照らし合わせて、2 倍程度の高速化が実現できたことになる。エネルギーの相対誤差で 10^{-10} 以上の高い精度が要求される場合、8 次の積分法が有効である。

次に、独立時間刻み法の新しい並列化手法について述べる。独立時間刻み法の並列化は、これまで十分に研究し尽くされてきたとはいい難い。効率のよい並列化の手法が確立されてこなかったため、近年急速に普及が進む超並列計算機の衝突系計算への応用も進んでいなかった。独立時間刻み法の並列化が難しい理由は、１、そもそも一度に積分される粒子が全体のごく一部であるため、計算の粒度が小さく低レイテンシなネットワークが要求されること、２、ある粒子への力を計算するためには他の全粒子の情報が必要となるため、アルゴリズム上の工夫がない限りネットワークのバンド幅への要求も高いものとなること、である。我々は新しい２次元並列アルゴリズムを開発し、少なくとも後者のバンド幅の問題は解決した。

これまでに試みられてきた独立時間刻み法の並列実装は、いずれも１次元並列のものである。N体計算そのものには、力を受ける粒子についての並列度であるi並列と、力そのものについての並列度であるj並列とがある。１次元並列のアルゴリズムでは、このいずれかを用いる。１次元並列アルゴリズムでは、プロセッサ数をpとしたときプロセッサあたりの計算量$O(N^2/p)$に対して通信量は$O(N)$となり、結局のところネットワークのバンド幅が与えられた問題規模に対して用いることのできるプロセッサ数を制限してしまう。２次元並列アルゴリズムでは両方の並列度を同時に用いることで、通信量を$O(N/\sqrt{p})$にまで軽減できる。

２次元並列アルゴリズムそのものは、Makino 2002 で提案されている。しかしここで提案された手法には、１、平方数のプロセッサ数しか使えない、２、独立時間刻み法との組み合わせで負荷分散が不均等になる、といった問題点があった。我々はこの問題を同時に解決した、新しい２次元並列アルゴリズムを開発した。このことにより、問題規模が比較的小さいところから、良好なスケーラビリティを得た。１次元並列アルゴリズムでも、問題規模を際限なく大きくすれば一見良好なスケーラビリティは得られる。しかしながら衝突系の計算では長時間積分を要求するものが多く、小さな問題規模で高い性能を得ることが重要になってくる。

800CPU コアの Cray XD1 を用いたシミュレーションでは、64k の粒子数に対し 2.03Tflops、ピーク性能の 57.7%を実現している。

最後に、GPU (Graphics Processing Unit)を用いた衝突系N体計算について述べる。GPU は低価格ながら高い浮動小数点演算性能を持ち、近年科学技術計算への注目を集めている。例えば、今回使用した GPU、GeForce 9800 GTX+は２万２千円程度から入手できるが約 500 Gflops の単精度浮動小数点演算性能を持つ。GPU を用いた数値計算は GPGPU (General Purpose GPU)とも呼ばれ、GPU の数値計算への応用が広まった背景としては近年 GPU がグラフィックス専用のハードウェアから徐々に汎用性を高めてきたことがあげられる。

最近になって、GPU を用いたN体計算でも数百 Gflops という高い実行性能を持つ研究結果が複数発表されている(Hamada and Iitaka, 2007; Belleman et al., 2008; Nyaland et al., 2007, Schive et al., 2008)。しかしながら、これらの結果は全て単精度で計算されたもので、そのまま衝突系の計算へと応用できるものではない。高い精度での軌道の積分を要求する衝突系の計算では、少なくとも「座標の差分」と「力の積算」を倍精度で計算する必要がある。前者が倍精度を要求するのは、近接遭遇時の桁落ちを防ぐためで、後者が倍精度を要求するのはたくさんの小さな力を足し合わせて全体の力とするためである。

我々はこの二カ所を、２語の単精度浮動小数点語と複数の単精度浮動小数点演算の組み

合わせで置き換える「疑似倍精度法」を開発し、GPU で衝突系の計算に耐えうる精度をもつ実装を実現した。実装には４次精度の Hermite 積分法のものと 6 次精度のものとがあるが、両者とも Gflops 値で GRAPE-6A （Fukushige et al. 2005)の２倍程度の性能を実現している。また、6 次精度の実装では N<64k において 1 Tflops の GRAPE-6 (Makino et al. 2003)よりも高速な計算を実現している。SSE と OpenMP を用いてクアッドコアの CPU 用に最適化した実装に比べても、８～９倍高速である。

我々の研究成果をもういちどまとめてみる。

1. 従来用いられてきたの４次精度の Hermite 積分法に対して、演算数あたりの精度／速度に優れる 6 次／8 次の Hermite 積分法を開発した。
2. 新しい並列化アルゴリズムを開発し、超並列計算機が衝突系の N 体計算に有用であることを世界で初めて示した。
3. 疑似倍精度法を用い、単精度のみをサポートした GPU を衝突系の N 体計算に応用することに成功した。低価格な GPU を用いて高速かつ高精度の計算を実現した。