

超並列シミュレーションのためのParticle Mesh法の最適化

○金子 勇輝¹ 石山 智明¹ (1.千葉大学)

重力多体シミュレーションでは、 N 個の粒子の重力相互作用を数値的に解く。直接法は全ての粒子間の力を総当たりで計算するため計算量が $O(N^2)$ となり、大規模なシミュレーションには非現実的である。この問題を克服するためにツリー法やParticle Mesh(PM)法がある。PM法は高速フーリエ変換(FFT)を用いて一様格子上で重力ポテンシャルを近似的に計算する手法であり、宇宙論的大規模計算ではツリー法と組み合わせて広く用いられている。

PM法の計算を高速化するには、FFTの並列度を高めることが効果的であると考えられる。しかし使用するFFTライブラリによっては、スラブ、ペンシルといった特定の並列データ構造が必要になる。一方、重力の性質上ツリー法の最適な負荷分散は高度に非一様な領域分割によって達成されるが、これはFFTに必要とされるデータ構造とは大きく異なる。このずれを解消するにはデータ構造の組み替えとそれに伴う通信のコストがかかり、超大規模計算ではボトルネックになりうる。そのため、FFTの並列度を高めることだけが全体の性能向上につながるとは限らず、このコストを踏まえた性能評価が必要である。

そこで本研究では、並列手法の異なる複数のFFTライブラリ(FFTW, FFTE等)を用いてPM法を実装し、スーパーコンピュータ「富岳」の最大1万ノード程度を用いて全体性能を測定した。その結果、一辺あたりの格子数を N_g 、並列プロセス数を P とすると、 $P < N_g$ では FFTE の1次元分割、 $P = N_g$ では FFTW、 $P > N_g$ では FFTE の2次元分割が全体的に最も高速であることがわかった。