

## 大規模N体シミュレーションに向けたツリー法の高速化

児玉哲史 (千葉大学)

利用カテゴリ XC-B

重力多体系とは、粒子同士が相互にニュートンの万有引力を及ぼしあう系である。重力多体系の  $N$  体シミュレーションでは、各粒子の運動方程式を数値的に解くことで、その時間発展を追う。 $N$  体シミュレーションは、球状星団や銀河、銀河団などの天体や、宇宙の大規模構造を理解するのに有用な手段である。ある1個の粒子が受ける重力を計算する際に、他の  $(N-1)$  個からの重力を直接計算する直接計算法では、全粒子が受ける重力を求める際の計算量が  $\mathcal{O}(N^2)$  となり、粒子数を増やした時のシミュレーションは非現実的なものとなる。ツリー法は、直接計算法よりも圧倒的に少ない計算量  $\mathcal{O}(N \log N)$  で重力を近似計算するアルゴリズムであり、広く用いられている。ツリー法では、近傍の粒子からの重力は直接計算して、遠方の粒子群からの重力は多重極展開による近似計算で求める。本研究の目的は、高度にチューニングされたツリー法のコードを開発することで、より粒子数が多く、高分解能なシミュレーションを可能にすることである。

重力計算はCPUの各コアに備わっているSIMD (Single Instruction Multiple Data: 1命令で複数データの演算を並列に行う) 演算器を利用することで高速化される。これまで報告されている高性能なツリー法のコードでは、CPUのSIMD命令を最大限利用し、単極子項の重力計算を劇的に高速化するPhantom-GRAPE<sup>1</sup> という高度にチューニングされたライブラリが用いられることが多かった。

我々はPhantom-GRAPEを拡張し、四重極項を含めた重力相互作用の計算をx86アーキテクチャで利用可能なSIMD命令セットAdvanced Vector eXtensions 2 (AVX2)を用いてSIMD並列化するライブラリを開発した。要求される計算精度が同程度で、かつ宇宙の大規模構造等の密度が一様な系においては単極子項のみを用いるよりも、四重極項まで用いた上でより近くの粒子群からの重力相互作用を近似計算させた方が、シミュレーションが最大で約2.2倍高速化されるという結果が得られた。要求される計算精度が同程度かつ密度が局所的に増加する系の場合では、単極子のみで計算した方が高速に計算できるが、AVX2の2倍の並列数であるAVX-512を利用する実装では、最大で約1.08倍高速化可能と見込まれる。また、擬似粒子を配置することで多重極展開を表現してPhantom-GRAPEを拡張することなく四重極項の計算を可能にする擬似粒子法と、我々の実装を比較したところ、我々の実装の方が約1.1倍高速に計算できるという結果が得られた。これは擬似粒子法で必要だった四重極テンソルの対角化等が、我々の実装を用いた場合には不要になるためである。現在、我々が開発したコードの公開と論文投稿を間近に行う予定である。また、今後は我々が開発したライブラリのAVX-512での実装、および開発中のツリー法コードのMPIによるノード間並列への対応を行う予定である。

---

<sup>1</sup><https://bitbucket.org/kohji/phantom-grape>