

MDGRAPE-2 を使った宇宙論 N 体シミュレーションコード

薄田竜太郎 (理研)

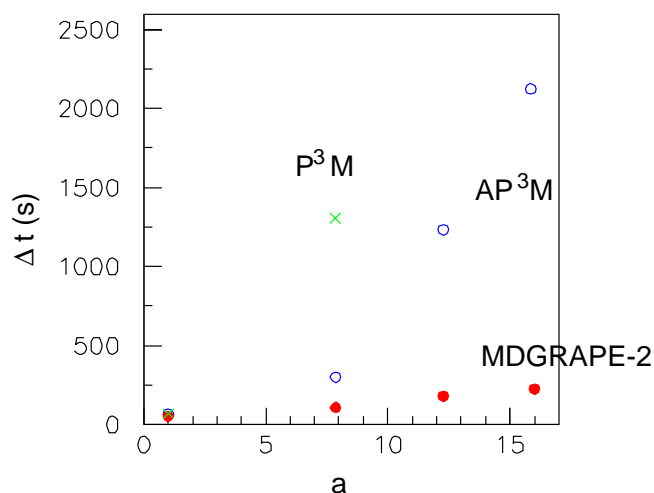
N 体シミュレーションは重力が働く N 個の粒子からなる系の時間変化のシミュレーションである。宇宙論では N が数 100 万以上にもなる。各粒子に働く重力を計算する必要があるが、粒子間の重力を直接計算すると計算量が $O(N^2)$ になり、計算時間がかかり過ぎるので、高速化アルゴリズムが用いて計算量を減らすことが行われる。Particle-Particle Particle-Mesh (P^3M) 法は宇宙論の N 体シミュレーションで周期境界条件の場合に用いられる高速化アルゴリズムの 1 つである。 P^3M 法では各粒子に働く重力を、近くの粒子からの力 (Particle-Particle 力、PP 力) と遠くの粒子からの力に分けて計算する。後者は Fast Fourier Transform (FFT) を使って、フーリエ空間で計算する (Particle-Mesh 力、PM 力)。分け方で力の計算精度を調節できる。シミュレーションが進むにつれ、重力によって粒子が集まった部分が生じ、その部分では各粒子に近い粒子が次第に多くなって PP 力の計算量が増え、シミュレーションの計算時間の大部分を占めるようになる。PP 力の計算量を抑えるために粒子が集まった部分では PP 力を再帰的に P^3M 法を使って計算するよう改良した Adaptive P^3M (AP^3M) 法も使われる。一方、PP 力のような粒子間の力の計算を CPU よりも高速に行う専用プロセッサを使えば、 P^3M 法を大幅に速くすることが可能である。本研究ではそのようなプロセッサの 1 つである MDGRAPE-2 を使った P^3M 法を実装した。

MDGRAPE-2 は PC やワークステーションの拡張ボードとして動作する。MDGRAPE-2 は任意の中心力を 7 桁程度の精度で計算できるので、 P^3M 法における PP 力を正確かつ高速に計算できる。PM 力は通常の P^3M 法と同様に CPU で計算する。MDGRAPE-2 は、別の高速化アルゴリズムであるツリー法での通常の重力、分子シミュレーションに必要な分子間力、磁気流体力学で粒子間力がある場合なども高速に計算できるので、それらのシミュレーションと同じ MDGRAPE-2 上で P^3M 法を実行できるメリットがある。また P^3M 法や類次のアルゴリズムは分子シミュレーションでクーロン力を高速に計算するために使われているので、 P^3M 法コードを分子シミュレーションに使うこともできる。

MDGRAPE-2 を使った P^3M 法の精度を確認するため、20 万粒子の P^3M シミュレーションを、初期状態、FFT の格子数、時間刻みなど、条件を同じにして、MDGRAPE-2 を使った場合と使わない通常の場合で結果を比較した。N 体系の統計量である 2 体相関関数や平均相対速度分布はシミュレーションの位置分解能より大きいところでは 1% 以下の差の、十分な精度で一致した。

次に MDGRAPE-2 を使った場合と使わない場合の計算時間を図に示す。システムは Pentium 4 (2 GHz) PC+MDGRAPE-2 ボード 1 枚 (プロセッサ 4 個搭載、実効速度 16 Gflops) である。MDGRAPE-2 を使わない通常の P^3M 法と AP^3M 法のシミュレーションには AP3M 2.6 (<http://coho.mcmaster.ca/hydra/>) を用いた。粒子数は 2,097,152 で、力の最大誤差は 3%、FFT の格子数はこの粒子数で AP3M が最大可能な 128^3 に設定した。この格子数は AP3M の計算時間を最短にする。この設定では、AP3M は PP 力を系の大きさの $1/44$ より近い粒子について計算する。MDGRAPE-2 を使った P^3M 法も同じ FFT の格子数と PP 力の範囲で計算した。いずれの場合も計算時間は、系のエネルギー変化をモニターするためのエネルギーの計算時間を含んでいる。

MDGRAPE-2 を使った場合は粒子が集まった部分が生じて力も計算時間の増加が緩やかで、膨張係数 16 付近で AP^3M 法に比べて約 10 倍、通常の P^3M 法に比べて 20 倍以上高速化されている。



2,097,152 粒子の宇宙論 N 体シミュレーションの時間刻みあたりの計算時間。横軸は宇宙の膨張係数で表した時刻。全時間刻み中、 P^3M は 2 点、 AP^3M と MDGRAPE-2 は 4 点表示。