

スーパーコンピューターの中で生まれる宇宙

石山智明

筑波大学計算科学研究センター

アブストラクト

宇宙におけるさまざまな天体は、地球上にはない広大な質量・空間・時間スケールのもとで相互作用しながら形成し進化するため、そのダイナミクスを理解するには大規模シミュレーションが必要不可欠である。今回は特にダークマター構造形成について、研究意義、大規模シミュレーションによる研究成果を紹介する。またそのためのコードを "京" 上で数万ノードを用いても高いスケーラビリティと、40%を超える対ピーク性能比を達成することに成功したが、その実装についても紹介する。

キーワード

宇宙, ダークマター, 銀河, 大規模シミュレーション,
ハイパフォーマンスコンピューティング

宇宙の構造形成

最新の宇宙論によると、普段我々が目にする原子や分子のようなバリオンと呼ばれる物質は宇宙の物質全体の 15%程度であり、残りはダークマターと呼ばれる重力を通してのみ相互作用する物質である。ダークマターは宇宙初期にはほとんど一様に存在したが、ごくわずかな密度の揺らぎが存在した。この密度揺らぎは長い時間をかけて重力により成長し、ハローと呼ばれるダークマター天体を形成する。このダークマターハローはバリオンを重力により集め、集まったバリオンから恒星や銀河、惑星といった多種多様な天体が誕生する。この意味で、ダークマターハローは天体形成に必要不可欠な存在である。またダークマターハローの構造形成過程や分布は、銀河や銀河団の形成進化や分布をも決定づける。

こういった宇宙の構造形成過程は、重力の非線形性が本質的に重要な役割を果たしているため、そのダイナミクスを研究するには数値シミュレーションが非常に有用である。ダークマターハローは最小のものでは地球質量程度(10^6 太陽質量)、最大のものでは銀河団質量程度(10^{15} 太陽質量)の非常に広いスケールに渡って存在すると考えられており、それぞれの中で初代星や銀河などの対応する天体が形成する。宇宙の構造形成過程は、こういったマルチスケールな天体が宇宙 140 億年という長い時間において相互作用するという極めて複雑な過程である。したがって、考慮すべき質量・空間・時間スケールが広大なため、大規模シミュレーションが必要不可欠である。

超並列重力多体問題コードの開発

ダークマターハローの進化を追う時、宇宙初期の密度揺らぎを持ったダークマターの分布を離散化して粒子として表現し、粒子間の重力相互作用を計算する重力多体 (N 体) シミュレーションが広く用いられている。我々は数万ノード以上のスーパーコンピュータ上で効率良く動作する超並列コードを独自に開発してきた。このコードは重力計算のアルゴリズムに TreePM 法を用い、並列化の際の領域分割に再帰的多段分割法、ロードバランサーとして CPU 時間の計測に基づいて自動的に行うものを用いることで、良好な実効効率とスケーラビリティを実現していた。

さらにノード数が 10 万近い京向けの最適化を進めた。まず HPC-ACE を最大限活用することで、重力相互作用計算カーネル部は 70% 程度の対ピーク性能比を達成した。そして数万ノードでは、遠距離力を計算する際に必要な他のノードの密度場の通信が遠距離通信であるためボトルネックになりがちであったが、この通信を階層的に行う新しいアルゴリズムを開発することで、ボトルネックをある程度解消することに成功した。これにより京のフルシステムを利用した 1 兆粒子のシミュレーションにおいて、42% の対ピーク性能比、4.45 Pflops の実効性能を達成することに成功した (2012 年 4 月時点の性能。整備中のシステムを用いた暫定的な数値)。この結果は、2012 年 11 月、アメリカ、ユタ州のソルトレイクシティで開催される、ACM/IEEE conference on Supercomputing (SC12) における、ACM Gordon Bell Prize finalists の論文として採択された。