

# 粒子系シミュレーション プラットフォームの構想

牧野淳一郎

計算科学研究機構

粒子系シミュレータ研究チーム

(東工大 理学研究流動機構)

# 話の概要

粒子系シミュレーションプラットフォーム  
としてこういうものを作りますという話

# 話の概要

粒子系シミュレーションプラットフォーム  
としてこういうものを作りますという話

ではなくて

## 話の概要

粒子系シミュレーションプラットフォーム  
としてこういうものを作りますという話

ではなくて

粒子系シミュレーションプラットフォーム  
はどのようなものであって欲しいかの意  
見交換の頭出し

というくらいが今日はいいかなあと

というわけで

# 私のお話の構成

1. 「粒子系シミュレータ研究チーム」の紹介
2. 粒子系シミュレーションでどんなことをしているのか
3. ちょっと抽象的な話
4. もうちょっと具体的な話
  - 並列化方法
  - 相互作用計算方法
  - 時間積分方法
  - その他いろいろ
5. まとめ？

# 粒子法シミュレータの研究開発

## 粒子系シミュレータ研究チーム（牧野淳一郎）

新規



1. システムを、それを構成する個々の粒子の運動を追跡することによってシミュレートする粒子シミュレーションは、宇宙物理、流体力学、コンピュータグラフィックス、ゲーム物理等の分野で発展してきた。生命科学分野や防災分野への応用も期待されている。粒子法は、格子法と比べ、複雑な形状を取り扱うことが容易であるので扱うことが出来る対象や現象が大きく広がる一方で、自由度当りの計算量が大きく大規模計算が必要である。そのため、医療分野など複雑な現象に適用するためには、「京」を用いた大規模シミュレーションとそのための粒子法シミュレータ開発が望まれる。

・粒子法は、宇宙物理での構造形成・進化シミュレーション、工学での応用が進んでいる渦糸法、SPH法、MPS法等異なる分野で独立に発展してきているが、粒子間相互作用を扱うという方法論としては共通・統一的である。異なる物質やモデル手法によるシミュレーションを統合するマルチスケール・マルチフィジクス手法としてもプラットフォームやアルゴリズムの開発と展開が望まれている。

2. 京を使いこなし、さらに効果的に使えるようにするためには、以下のような課題・制約の克服・解消が必要

京における粒子法アルゴリズムとシミュレータ・ソフトウェア開発の課題、制約

- 1) 格子法と比べて、大規模並列に対応した汎用的なソフトウェアが少ない。「京」の威力を発揮するためには、超並列システム「京」に最適な粒子法並列化アルゴリズムを確立し、「京」の威力を発揮できる粒子法シミュレータを開発することが必須である。
- 2) 上記問題について、多岐に渡る研究領域において解決の強い要望がでている。

3. このために以下のような研究を行い、新たな、従来にない先進的な粒子法アルゴリズムとそのシミュレータ・ソフトウェアを開発し、ユーザに提供することで幅広い分野のユーザの利用の進展につなげる

(研究開発目標)

1. 超並列システム「京」に最適な粒子法並列化アルゴリズムの確立
2. 「京」の威力を発揮する粒子法シミュレータ・ソフトウェアの開発
3. 2014年度には、開発したシミュレータの第一版を「京」で公開

4. 並列化アルゴリズムの研究・シミュレータソフトウェアの開発は、粒子法の大規模並列シミュレーションが行われている宇宙物理分野の研究をベースとして行うことが効率的である

5. 戦略機関との整理

現状では、粒子法に適した個別の物理モデルが様々な分野で構築されており、また並列化やチューニングも各分野で独立に行われている。

本チームでは異なる研究分野に対する共通基盤となる粒子法シミュレータを機構チームが先導で開発し、各分野で個々に提案される新規モデルに適用することのできる基盤アルゴリズムとそのシミュレータを構築する。異なる戦略分野間で横断的に連携・協力できる体制を構築するための中核的立場を本チームが担う。

# やると書いてあること

- 「京」に最適な粒子法並列化アルゴリズムの確立
- 「京」の威力を発揮する粒子法シミュレータソフトウェアの開発
- 2014年度には第一版を公開

# 予算規模とか人員規模

- 予算: 国会仕分け次第というような気がする
- 人員: 一応研究員最大4名程度を想定するが本当に来年度予算あるのかどうかまだ不明(現在公募準備中)
- チーム存続期間: 当初は私の任期(多分今年度いれて5年)、延長あるかどうか?

# 動機的なもの

- 「京」(に限らないけど大規模分散メモリマシン)用の粒子シミュレーションコードの開発はとても大変
- 大変な理由: しないといけないことが沢山ある
  - (動的)領域分割、ロードバランス、粒子交換
  - ノード間通信の削減・最適化
  - キャッシュ利用効率を上げるためのチューニング
  - SIMD ユニット利用効率を上げるためのチューニング
  - アクセラレータがあればその辺も、、、
- 色々な分野で同じようなことを独立にやってるようにも見える
- 共通化できない？

# 粒子系シミュレーションの中身 天文(1)

- ダークマターの重力的構造形成:
  - タイムステップ比較的少ない(10万ステップ以下、粒子で共通でもなんとか)、
  - 粒子数可能な限り大きく(現在最大は $10^{12}$ )
  - 計算方法は Tree+PM が主流、領域分割で並列化
- 銀河形成  $N$  体+SPH
  - タイムスケールの幅広い:超新星爆発:100年、典型的な軌道:1億年)
  - 粒子数:現状では 1億程度
  - 計算方法は Tree+PM が主流、領域分割で並列化

# 粒子系シミュレーションの中身 天文 (2)

## ● 球状星団 $N$ 体

- タイムスケールの幅広い:典型的な軌道:100 万年、連星系:時間オーダー)
- 粒子数:現状では 100 万以下 (まあ 1000 万までいければ)
- 計算方法は direct sum が主流。独立時間刻み

## ● 惑星形成 $N$ 体

- タイムスケールの幅広い:典型的な軌道:1 年、衝突・連星:分オーダー)
- 粒子数:現状では 10 万以下
- 計算方法は現状では direct sum が主流。おそらく tree hybrid に移行独立時間刻み

# 粒子系シミュレーションの中身 天文 (3)

- 星形成 SPH

- タイムスケールの幅広い:初期ガス雲:100万年、星表面:  
分オーダー)
- 粒子数:現状では数千万
- 計算方法は tree 主流。独立時間刻み
- MHD、輻射の扱いも必要

# 粒子系シミュレーションの中身 古典MD

(以下数字等はだいたい適当)

- 蛋白MD

- 粒子数:現状では10万程度
- タイムステップ フェムト秒
- みたい時間スケール ミリ秒とかさらに上、、
- 計算方法は PME+近距離力、時間ステップは一定

- 大粒子数MD

- 粒子数: 大きいのだと  $10^{13}$ ?
- みたい時間スケール: 力学的程度?
- 計算方法は 近距離力なので、、 時間ステップは一定

- 他の応用もある?

# 粒子系シミュレーションの中身 工学応用

(あまりよく知らない)

- 津波とか (SPH, MPS)
- 流体・固体連成解析
- 粉体 (DEM)

印象:

- 基本的に力学時間スケール。そんなにタイムステップ多くない
- タイムスケールの幅もそれほど大きくない
- 境界条件等は複雑
- 現状ではそれほど大規模計算ではない？

というわけで

# 牧野の理解の現状

- 天文の話ならダークマターから星形成まで一応わかる (はいっている物理、計算法、並列化法、その他含めて)
- なので、これらの「共通プラットフォーム」は考えられる
- 古典 MD もまあ見当はつく。小粒子数・超長時間計算は特殊性が高いので対象にするべきかどうか？大粒子数は扱える？
- それ以外：良くわかっているとはいいがたい

# 良くわかっていない時のアプローチ ＝抽象化

粒子系のそこそこ抽象的な表現:

- 粒子は多分位置、速度を持って運動する
- ある粒子の加速度は他の粒子との相互作用で決まる
- 各粒子は色々内部状態量を持つ
- 内部状態量についての発展方程式がある
- 内部状態量の時間微分は内部量自体と他の粒子との相互作用の両方で決まる

# 式で書いてみると

$$\frac{dv_i}{dt} = f_1(r_i, v_i, X_i) + \sum_j f_2(r_{ij}, v_{ij}, X_i, X_j)$$

$$\frac{dX_i}{dt} = g_1(X_i) + \sum_j g_2(r_{ij}, v_{ij}, X_i, X_j)$$

ここで  $r_i, v_i, X_i$  は粒子  $i$  の位置、速度、内部状態ベクトル。  
 $f_1$  は外場とか。

- 3体以上の相互作用 (固体、ボンド、その他) は後で考える

# これだけからプラットフォーム作れるか？

$$\frac{dv_i}{dt} = f_1(r_i, v_i, X_i) + \sum_j f_2(r_{ij}, v_{ij}, X_i, X_j)$$

$$\frac{dX_i}{dt} = g_1(X_i) + \sum_j g_2(r_{ij}, v_{ij}, X_i, X_j)$$

— だいぶ無理そう。

- もちろん何か作ることにはできる
- $X$  の型を定義し、 $f_1, f_2, g_1, g_2$  のルーチンを渡せばあとは全部やるみたいなもの
- 出来れば理想的
- とはいえこのままでは計算量が  $O(N^2)$

# 実際に使いものになるために 必要そうなこと

- 遠距離力に対する高速計算法 (FMMかツリーかその両方、PME, TreePM)
- 近距離力 (PME とかで発生する遠距離力の近距離成分も含む) の高速計算 (キャッシュ、SIMD ユニット)
- 並列化、領域分割、ロードバランス
- 独立時間刻み？

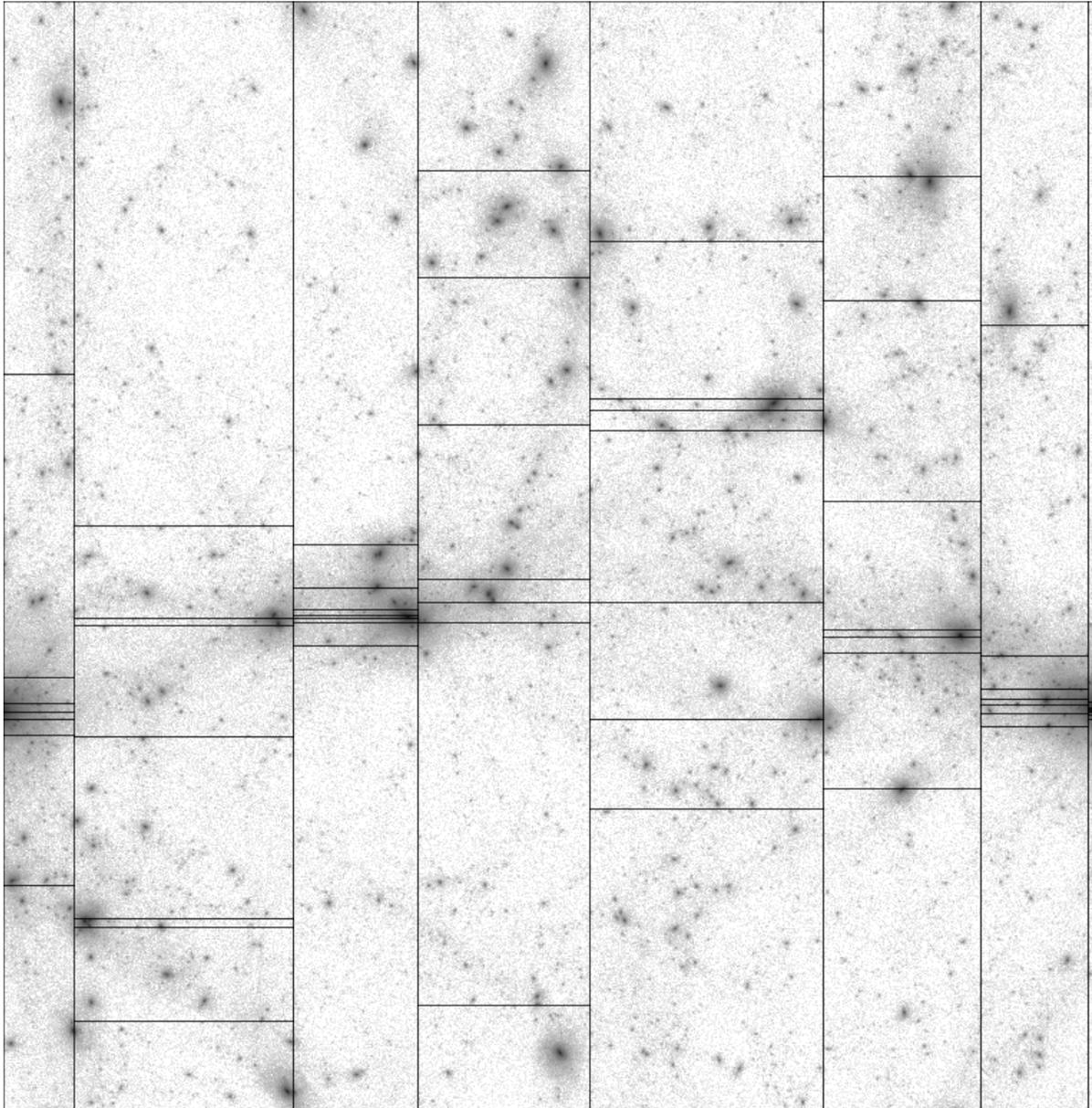
# 遠距離力に対する高速計算法

- 自由境界なら普通にツリーかFMM
- 周期境界は？現状は
  - 一様系に近いなら PME
  - 非一様性が高いなら TreePM
- 周期境界の場合の問題
  - FFT は効率低い
  - TreePM は高精度にすると計算コスト急速に上昇
- 検討項目
  - FMM ではどうか？
  - 重力(引力だけの場合)はFMMで周期境界できるか？  
(原理的には、一様な負の質量があるとすればいい)

# 近距離力

- いくつかの方法を実装する？
  - ネイバーリスト
  - カットオフ固定なら Neutral Territory Method?
- キャッシュ等の有効利用
  - キャッシュなら粒子の並べ換え等
  - アドレス可能な高速メモリがあるならそれ用のなにか
- SIMDユニットの有効利用
  - アーキテクチャ毎に工夫必要
  - アドレス可能な高速メモリがあるならそれ用のなにか

# 領域分割、ロードバランス



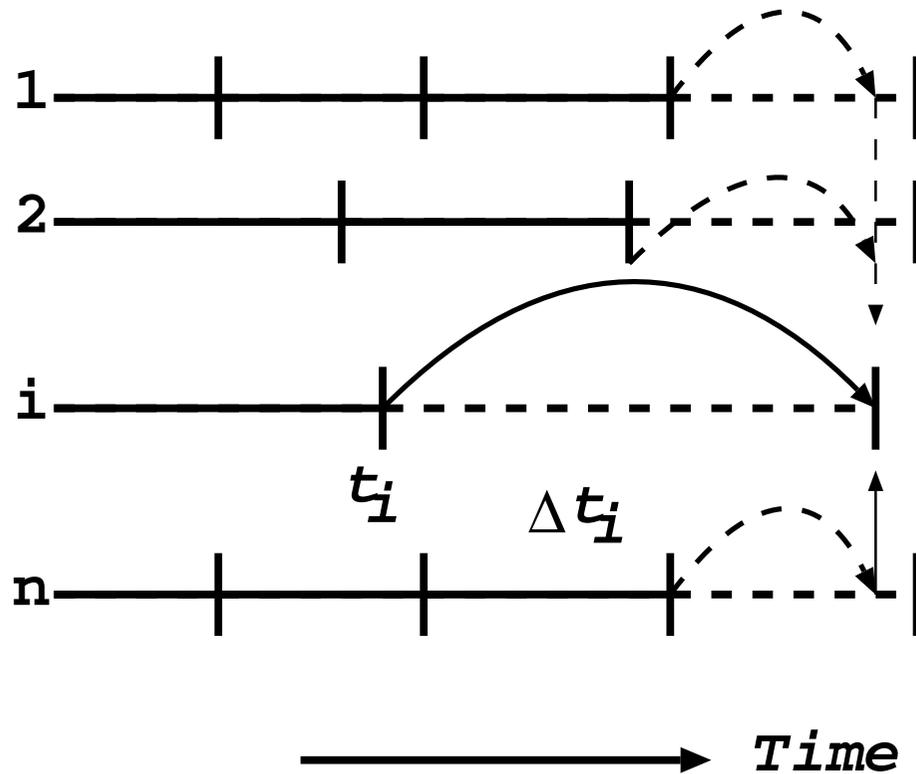
空間分割

Recursive Multi-section (JM 2004)

計算時間が均等になるよう領域サイズ調整 (石山他 2009)

現在はサンプリングして1ノードで分割を生成。階層化の必要はあり

# 独立時間刻み



(Aarseth 1963)

- 各粒子にそれぞれ時刻と時間刻みを与える
- 「イベント駆動」時間積分 —  $t_i + \Delta t_i$  がもっとも小さい粒子が積分される

これでは並列化できないので実際にはステップサイズを量子化

# 独立時間刻み？

- 天文以外でこんな必要？
- ツリー、FMM と相性悪い
- シンプレクティックにならない

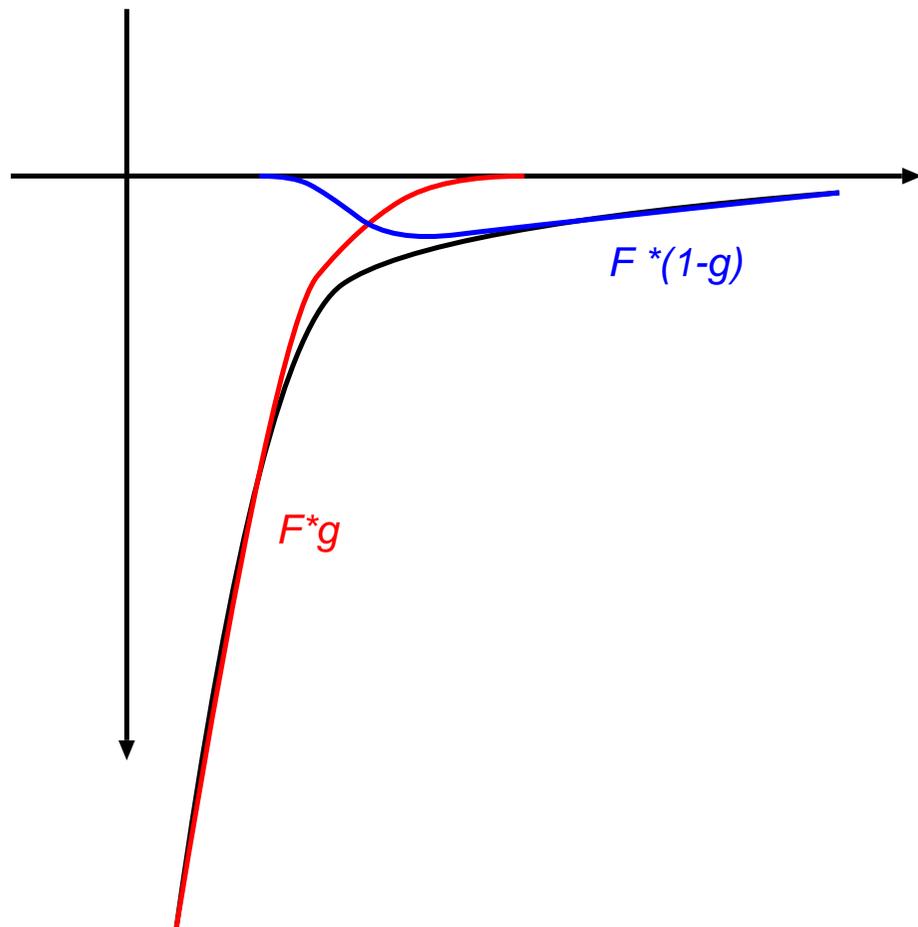
# 時間積分公式に対する要請

- 高次の予測子が必要 (他の粒子の位置が必要)
- 可変時間刻みが必要
- 積分区間の途中で加速度を計算するような方法は使えない。
  - 線形多段階法は使える
  - ルンゲ・クッタは使えない
  - シンプレクティック法は単純には使えない

# 最近実験している方法

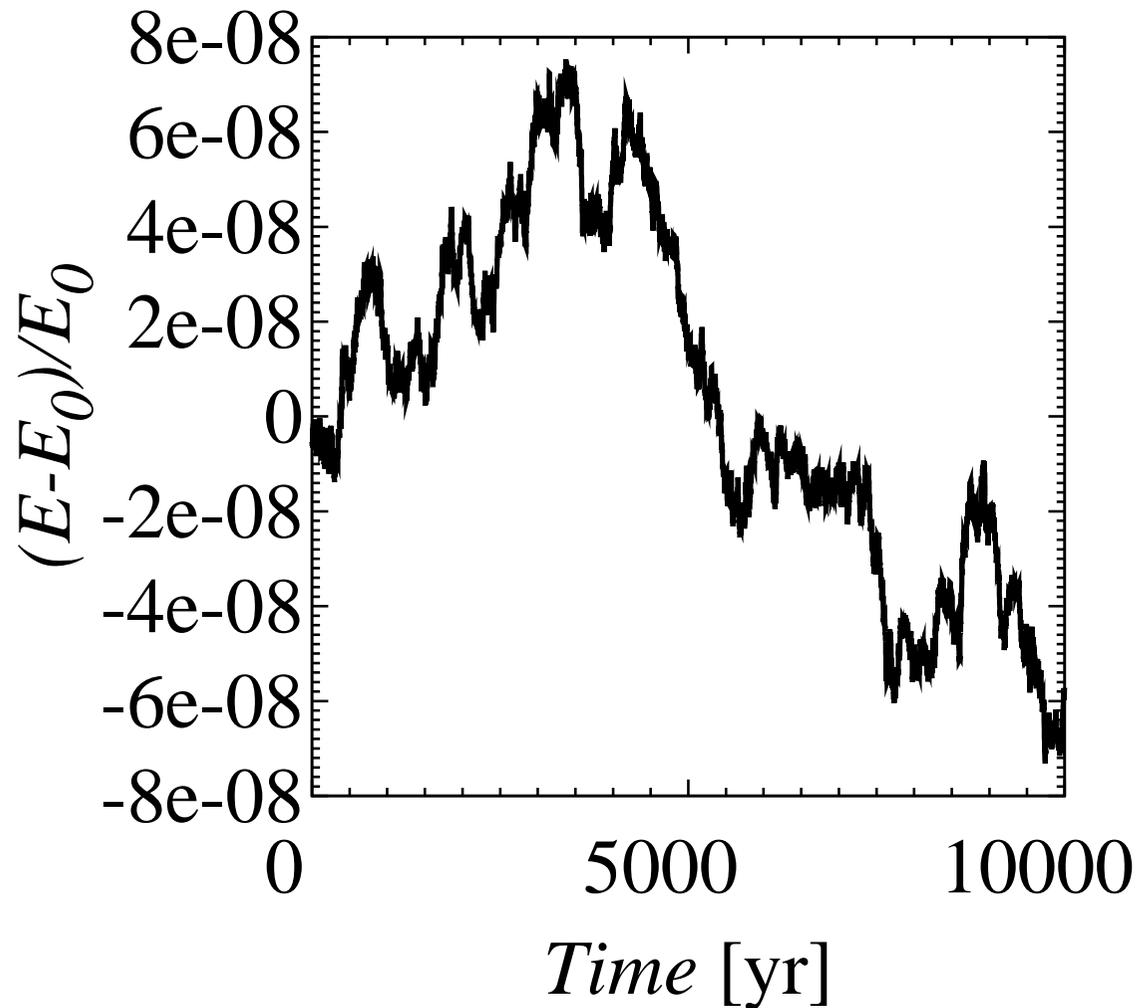
2粒子間の重力を形式的に2つのタームに分ける。

$$F_{ij} = -Gm_i m_j \frac{r_{ij}}{|r_{ij}|^3} = F_{ij}(1 - g(|r_{ij}|)) + F_{ij}g(|r_{ij}|)$$



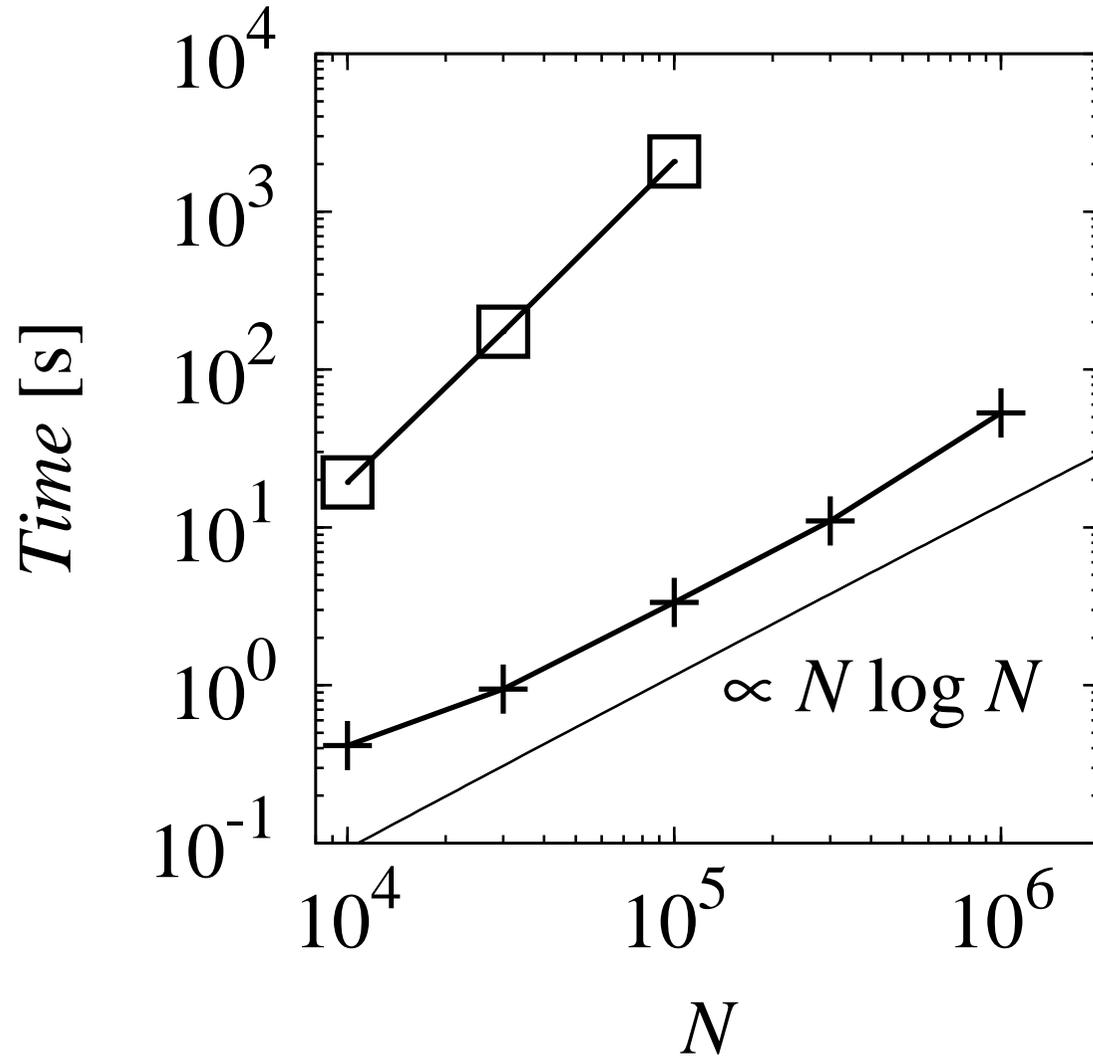
- $F * g +$  運動エネルギー を独立時間刻みで高精度に積分
- $F * (1 - g)$  はツリー+リープフロッグで積分 (こっちはシンプレクティック)
- $g$  はコンパクトサポートで、積分公式に必要な回数だけ微分できる必要あり (スプラインを使う)

# 誤差の時間進化 (惑星形成計算)



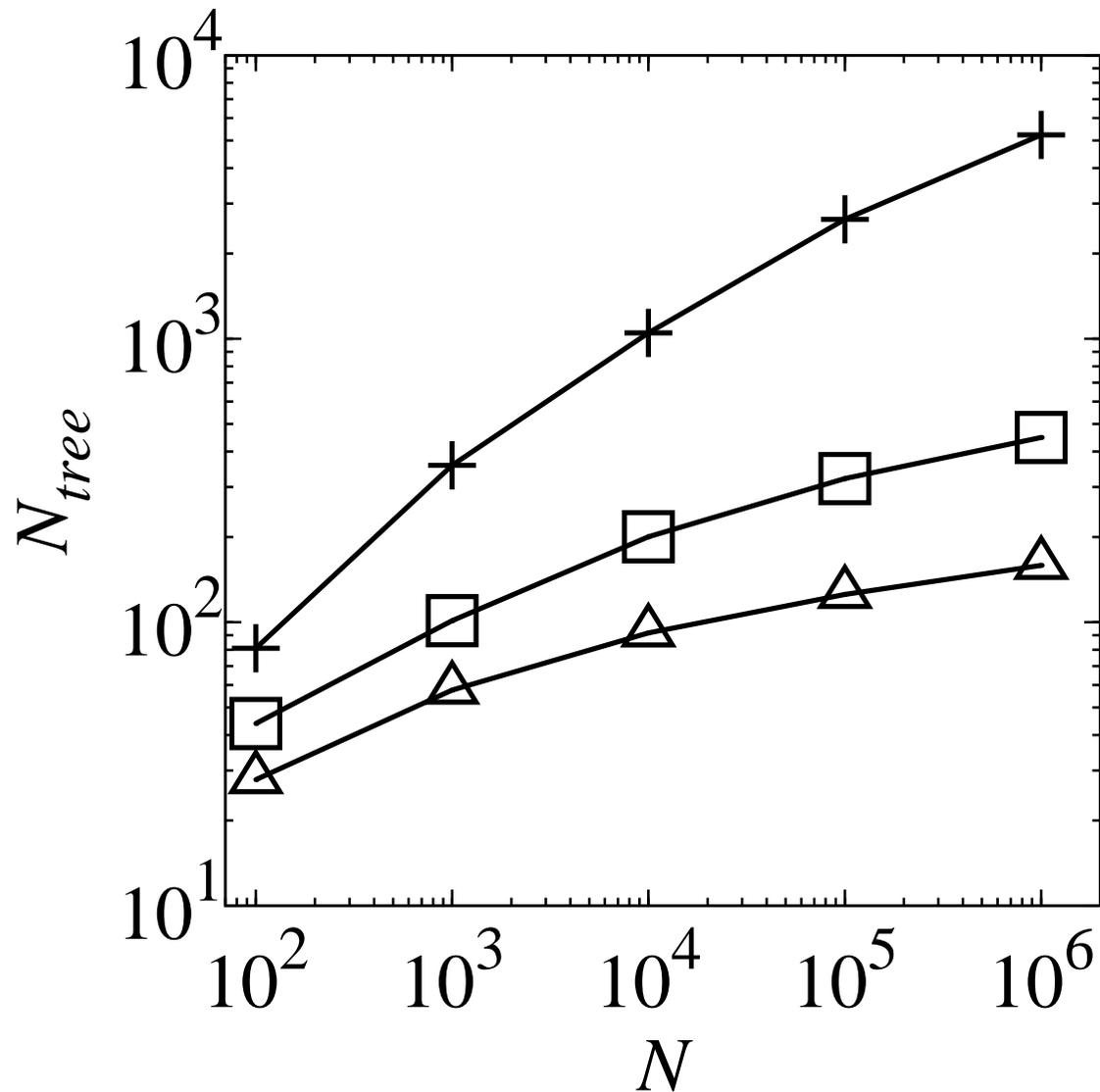
- Kokubo and Ida 1995 と同様な地球領域の計算。1万粒子
- 衝突、合体とか入っている。時間進化自体 KI95 と同様
- エネルギー保存の精度は「非常に高い」

# 計算時間



- 1 ツリーステップ当りの計算時間
- は普通の直接計算 ( $N^2$ )。
- ×が今回の方法。
- 速度の絶対値自体は、まだ並列化等できてなくてそんなに速くない

# 計算量



- 1ステップ、1粒子  
当りの相互作用の数
- 上から、ツリーの精  
度パラメータ (見込  
み角) 0.1, 0.5, 1.0
- 0.1 でも、100万粒  
子だと計算量が直接  
計算の 1/200
- 惑星形成計算だと、  
粒子分布が平面的な  
のでツリーコードの  
計算量が普通より少  
ない。

# こんな方法が宇宙以外で必要か？

- 古典 MD では基本的にどの原子も同じタイムスケール
- 粒子法での流体計算では色々ありえる。燃焼・爆発を扱うなら必要かもしれない？
- 多くの流体系ではまず大規模並列化が問題 (2010年の GB 賞は FMM での赤血球のストークス流体シミュレーション。コア数くらいの赤血球で並列化、、、)
- 結局、「まるごと解析」になってくると必須のはず

# そんなことはともかく

書いてて疑問に思わなくもないこと

- 性能
- 拡張性

はそうはいっても両立しないのでは？

適当な回答:

- 粒子間相互作用カーネルさえ十分速ければ、、、(小粒子数はそれだけでは駄目だが)
- カーネルの自動チューニングくらいはできるだろう

# もっと細かい話

- I/O、データ形式をどうするか
- 可視化、データ解析用インターフェース

# 今後の方針

- もうちょっと仕様を具体的にしたい
  - － 想定するアプリケーション
  - － 想定するハードウェア、目標性能
  - － 特定の応用を記述する方法
  - － 拡張方法
  - － その他
- 人を集める
- スケジュールを、、、

# まとめ

- そこそこ汎用な粒子系シミュレーション用プラットフォーム
- 形式的には

$$\frac{dv_i}{dt} = f_1(r_i, v_i, X_i) + \sum_j f_2(r_{ij}, v_{ij}, X_i, X_j)$$

$$\frac{dX_i}{dt} = g_1(X_i) + \sum_j g_2(r_{ij}, v_{ij}, X_i, X_j)$$

- 具体的検討項目
  - 想定する系、目標性能
  - 遠距離力計算法、近距離力計算法
  - 並列化、領域分割、ロードバランス
  - 独立時間刻み

- 入出力データ形成等
- その他は？