

Q14b 星間化学シミュレーションのための疎行列演算手法の開発

本山一隆 (総合研究大学院大学), 合田憲人, 坂根栄作 (国立情報学研究所)

星間ガスの中では、生命の誕生に関わるような有機分子を含め、様々な分子が生成されていることが明らかになってきている。大規模な化学反応ネットワークを解く星間化学シミュレーションの高速化は、星間ガス中での化学進化を明らかにする研究を行ううえで重要な課題となっている。星間化学シミュレーションを高速化するため、我々は新しいアルゴリズムの研究開発を行った。

従来の星間化学シミュレーションでは、並列化が不可能なアルゴリズムが用いられてきたが、我々は疎行列演算を使ったアルゴリズムに書き直すことで並列化を可能とした。我々の開発したアルゴリズムでは、計算性能が疎行列演算の効率に大きく依存する。近年のCPUでは、一度の命令で複数の演算を実行するSIMD(Single Instruction Multiple Data)演算をどれだけ有効に利用できるかが性能向上の鍵となっている。星間化学シミュレーションにおいてSIMD演算を最も有効に活用できる演算手法を明らかにするため、Coordinates Storage(COO)形式、Compressed Column Storage(CCS)形式、Compressed Row Storage(CRS)形式の3つの疎行列演算手法について、性能比較実験を行った。比較実験の結果、CRS形式を用いた場合が最も性能が高いことを明らかにした。SIMD幅が大きいCPUではより顕著に性能の向上が見られ、従来の計算手法に比べて計算時間を半分以下にまで減らすことができた。