

審査の結果の要旨

学位申請者氏名 青木 尚登

18世紀末に始まった産業革命以来の現代科学技術文明の発展は、長い間、動力機関の性能向上により支えられていた。平均すると単体の動力機関の出力は13年間で2倍の成長を270年間程度続けてきた。この成長は1970年代には止まり、出力の点では足踏みが続いている。そして今日の発展は動力機関に代わり、計算機の性能向上により支えられている。計算機の性能向上は、前世紀までは1年半で2倍というムーアの法則に従っていたが、今世紀に入って通信技術の発達と相俟って加速している。2002年に計算機の新時代を開拓し、"computonic shock" とまで評せられた地球シミュレータは40TFLOPSであったが、京ほか現在のスーパーコンピュータは10PFLOPSを越えている。そして現在、2020年代初頭に1EFLOPS程度の性能を持つ、いわゆるエキサスケールコンピュータの実現を目指して研究・開発がすすめられている。エキサスケールコンピュータでは1つのシリコンダイの上に数十から数百の計算コアを持つメニーコアチップを、計算加速機構としてアーキテクチャの中核とすることが想定されている。この計算加速機構は、今日のGPGPUあるいはMICの延長上にあるものである。

本論文では、こうしたメニーコアチップによる統計物理学研究について、ひとつの側面からまとめたものである。それはどういった問題がメニーコアチップによる研究に向いているかという面からである。

統計物理学には数多の模型があり、多様な現象を解析する道具となっている。その中でも古典力学的な分子模型による物性の解析が最も基本的である。本論文では、まず短距離レナード・ジョーンズ系(LJ系)をGPGPU、Tesla K20 および C2050 でシミュレートするプログラムを開発し、通常のCPU、Xeon E5-1620 v2 によるものと比較検討した。その結果、チップ当たりの実行性能はGPGPUがCPUを53%(K40)、22%(C2050)上回ったが、設計最高性能比および消費電力比ではCPUの方が有利という結果を得た。この結果を踏まえ、GPGPUが最も効果をあげる問題として、平均場回転子系(HMF系)のシミュレーションを調べたところ、GPGPU、MICがCPUに比べて圧倒的な性能を示した。これはLJ系では計算に際してデータのアクセスパターンが不規則でまた1自由度当たりの演算量が比較的軽い(四則演算20回程度)であるのに対して、HMF系では完全に定型のアクセスパターンで、また1自由度当たり三角関数の評価が2回入るため演算量がLJ系より大きいことによる差である。

HMF系は2次元回転子のそれぞれが系内の他の回転子すべてと強磁性相互作用をしつつ運動する系である。この系は熱力学極限では熱平衡状態には緩和せず非平衡定常状態を示すことが知られている。こうしたふるまいは中・長距離相互作用である系重力多体系や非中性プラズマにもみられ、系の簡潔さゆえ非平衡構造を調べる格好の例となっている。しかしこの簡潔な系ですら、非平衡定常状態の全容は未だ明らかとなっていない。

本研究では上述のGPGPUによるシミュレーションを使ってこれまでに行われたシミュレーションの10倍程度の回転子の系に対して、幅広いパラメータ領域で解析した。その結果、有限系の

場合の非平衡定常状態の寿命が回転子の数の 1.75 乗に比例して長くなることを確認し、またエネルギーに対して指数関数的に長くなることを発見した。さらに初期条件を、water bag initial condition (WBIC、位相空間上の矩形領域に一様に分布させた状態) と名付けられた一定のクラスに限ることによりエネルギーのモーメントにより非平衡定常状態を特徴づけることができることを示唆する結果を得た。この結果は中・遠距離系の統計物理学研究に対する有用な寄与と認められる。

以上、本論文では、現在および次世代のスーパーコンピュータによる統計物理学研究の新しい方向性を実証し、また将来のコンピュータアーキテクチャへの示唆を与える研究である。

よって本論文は博士（工学）の学位請求論文として合格と認められる。