第12章 CPUとGPUで100万桁を弾(はじ)く

CUDA Cプログラミング入門③ 円周率計算のサンプル・プログラム作成

本章では，Jetson NanoでGPUをフル稼働させて円周率を計算してCPUとの性能比較や考察について述べます．〈編集部〉

12-1　サンプル④…GPUPI：GPUによる円周率の多桁計算に挑む

● 円周率を計算するための公式

ここではGPUで円周率の多桁計算に挑戦してみます．円周率を計算する公式はいくつか知られています．有名なものとしては以下のようなものがあります．

▶マチン(Machin)の式

$$\frac{\pi}{4}=\arctan\left(\frac{1}{2}\right)+\arctan\left(\frac{1}{3}\right)\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots(1)$$

▶ラマヌジャン(Ramanujan)の式

$$\frac{1}{\pi}=\frac{2\sqrt{2}}{99^2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(4n)!(1103+26390n)}{(4^n 99^n n!)^4}\cdots\cdots\cdots(2)$$

▶チェドゥノフスキー(Chudnovsky)の式

$$\frac{1}{\pi}=\frac{12}{\sqrt{640320^3}}\sum_{k=0}^{n}(-1)^k\frac{(6k)!}{(3k)!(k!)^3}\times\frac{13591409+545140134k}{640320^{3k}}\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots(3)$$

式(1)はarctan関数を級数で求めていきますが，マイコンの整数命令だけでも計算できてしまう方法で，この式自体の証明も比較的簡単です．

式(2)と式(3)は，超天才的かつ超芸術的で鑑賞するだけで「はぁ～」となってしまうものです．もはや証明する気になりません．級数の収束も早くて，1回の積算で収束桁が式(2)は約8桁ずつ増え，式(3)は約15桁ずつ増えていくという優れものです．

ただし，式(1)～式(3)のような級数方式の場合，計算したい桁数の分だけメモリを用意し，多倍長の加減算・乗算・除算を実行していく必要があります．

● GPUによる多倍長計算

多倍長計算のGPUによる並列処理について考察してみます．

多倍長の加減算は下位桁から上位桁に向けてキャリーを送りながら計算します．シリアルな計算なので並列処理には向きません．

多倍長の乗算は高速フーリエ変換(FFT：Fast Fourier Transform)を組み合わせる方法が知られています．FFTはバタフライ演算をうまくスケジューリングすることで並列化できます．

多倍長の除算は，定数による除算の場合は逆数の乗算で実行でき，変数による除算の場合はニュートン・ラプソン(Newton - Raphson)法により加減算と乗算を組み合わせて実行することができます．

式(1)～式(3)をGPUで効率的に処理しようとすると，スレッドの切り分け方法や大容量メモリのスレッド間での効率的な共有など工夫しないといけないポイントが非常に多くあります．本稿では時間的な制約から上記の方法は諦めました．

● 並列処理向けのBBP公式

あまり計算効率はよくないのですが，並列処理に向いた円周率計算の公式があります．

今回はこちらを採用しました．BBP(David Bailey, Peter Borwein, Simon Plouffe)公式とよばれる次のような式です．

$$\pi=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{16^n}\cdot\left(\frac{4}{8n+1}-\frac{2}{8n+4}-\frac{1}{8n+5}-\frac{1}{8n+6}\right)$$
$$=4\sum_{n=0}^{\infty}\frac{16^{-n}}{8n+1}-2\sum_{n=0}^{\infty}\frac{16^{-n}}{8n+4}$$
$$-\sum_{n=0}^{\infty}\frac{16^{-n}}{8n+5}-\sum_{n=0}^{\infty}\frac{16^{-n}}{8n+6}\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots(4)$$

ここで，

$$S(j,\ d)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{16^{d-n}}{8n+j}\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots(5)$$

とおくと，

$$16^d\pi=4\sum_{n=0}^{\infty}\frac{16^{d-n}}{8n+1}-2\sum_{n=0}^{\infty}\frac{16^{d-n}}{8n+4}$$
$$-\sum_{n=0}^{\infty}\frac{16^{d-n}}{8n+5}-\sum_{n=0}^{\infty}\frac{16d-n}{8n+6}$$
$$=4S(1,\ d)-2S(4,\ d)-S(5,\ d)-S(6,\ d)\cdots\cdots(6)$$

となります．

● BBP公式は，任意桁からの16進円周率を計算してくれる

ここで，xの小数部を$\{x\}$で表現すると定義します．すると$16^d\pi$は，πを16進数表記した場合，その小数点以下$d+1$桁目以降を表現していることに気づきます．そこで，式(6)の小数部のみを取り出すことを考えます．すると，

$$\{16^d\pi\}=\{\{4S(1,d)\}-\{2S(4,d)\}-\{S(5,d)\}$$
$$-\{S(6,d)\}+4\}\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots(7)$$