jh150003-NA02

萩田 克美（防衛大学校）

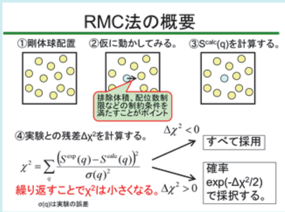
時間並列化アルゴリズムの新しい方向性と実用例の探索

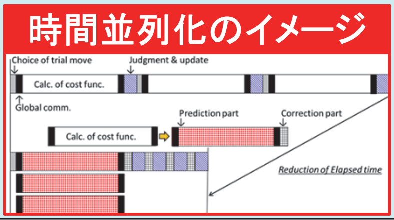
「時間方向の並列化の考え方」

・時間依存関係のある「ヘテロな計算」が連続する計算がターゲット。
・「予測計算」と「修正計算」の組み合わせで、超並列環境での経過時間高速化。
・時間方向並列化の「効果の分類」の定義：
　第１種：利用ノード数の増加で経過時間を削減。（利用ノード数を気にせず）
　　　→ 演算処理の分散並列化で高速化。
　第２種：時間方向並列度の増加で経過時間を短縮。（利用ノード数固定）
　　　→ 並列化による演算効率向上・通信回数削減などで高速化。

実例１： モンテカルロ探索での第２種効果の例（SPring-8極小角散乱データの３次元構造推定）

・試行の動きの生成は、簡単。評価関数の計算が大変。
・評価関数の計算の（時間）依存関係は、局所的。
　→ 大部分の計算は、直前の判定結果なしで実行可能。
　※上記を「予測計算」とし、依存部分を後で「修正計算」





・約3000万粒子の系で検討
　M：時間方向の並列度
　200万回のRMC trials

Nodes	M=32	64	128
64	613.7	**601.4**	626.4
128	516.4	**496.0**	513.0
256	509.5	**459.2**	466.9
512	538.9	484.1	**474.4**

より大きい系（3億粒子等）を想定し、大きなMで高速になるように、コードを改良
（H27 JHPCN課題での作業実施）

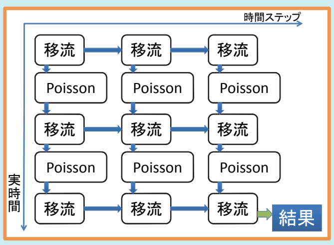
Nodes	M=128	256	512
64	**567.8**	577.3	582.0
128	447.4	441.7	**437.8**
256	389.4	**387.3**	392.3

・今後、より大規模系のベンチ作業の可能性を検討

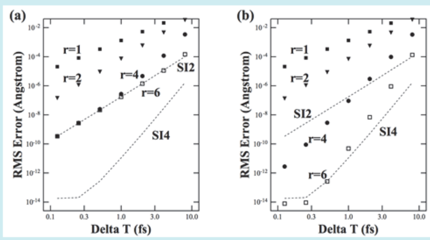
実例２： 時間発展問題での第１種効果の例（拡散方程式、非圧縮流体、分子動力学）

拡散方程式：
・試行は、Coarse Grid (例えば2倍のgrid間隔)での計算。
・3次元の場合、$1/2^3$の計算量で試行が完了。
・時間ステップは、2^2倍大きく取れる。

二次元非圧縮流体(渦度・流れ関数表現)：
・速い計算(渦度移流方程式)と遅い計算(Poisson方程式)の組み合わせ。
・速い部分を試行、遅い部分を修正とする。
・Multi-grid 表現の導入でさらに収束性向上。



分子動力学：
・Identity Pararealの構成で十分実用になる。
[T. Takami and D. Fukudome, LNCS 8384, pp.67-75 (2014).]



その他の検討状況と、今後について

・MPS法を中心とした他の粒子法への適用検討
・生体高分子MDなどを対象として、実アプリでの適用検討
⇒ 他の事例への応用。既存類似事例の把握と議論検討。

・「時間方向の並列化の考え方」の整理／検討／議論を進める。
　・過去の情報で代用する「非同期化」は、広く使えるか？
　（数値精度が確保できればOKでは？）
⇒ 議論＋数値実験を行い、新たな可能性を模索。