

jh150003-NA02

## 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

萩田 克美 (防衛大学校)

本研究では、時間方向の並列化について、体系的に整理し、応用の範囲を広げることを目指した。時間方向並列化に成功した事例を基に、議論を深めた。時間方向並列の効果としては、利用ノード数を気にせず経過時間を短縮する第 1 種と、利用ノード数が同じままで経過時間を短縮する第 2 種に分類できる。第 2 種が成立する理由は、通信の削減や計算の効率向上がある。時間方向並列化は、予測-修正の組み合わせで実現している。大規模 RMC 法のケースは、Parallel Prediction-Serial Correction (PPSC) であり、Parareal や偏微分方程式系の時間方向並列化は Serial Prediction-Parallel Correction (SPPC) であると分類できる。本研究では、これまでの多くある SPPC 型ではない PPSC 型の成功事例である大規模 RMC 解析の成果確立を目指した。

### 1. 共同研究に関する情報

#### (1) 共同研究を実施した拠点名

東京大学 情報基盤センター  
 名古屋大学 情報基盤センター  
 九州大学 情報基盤研究開発センター

#### (2) 共同研究分野

- 超大規模数値計算系応用分野
- 超大規模データ処理系応用分野
- 超大容量ネットワーク技術分野
- 超大規模情報システム関連研究分野

#### (3) 参加研究者の役割分担

参加研究者	役割分担
萩田 克美 (防衛大)	総括、時間方向並列のアルゴリズムに関する議論、実装検討、計算実施
高見 利也 (九州大/ 大分大学)	総括、時間方向並列のアルゴリズムに関する議論、実装検討、計算実施
室谷 浩平 (東京大)	MPS 法における時間方向並列化の検討
萩野 正雄 (名古屋大)	MPS 法における時間方向並列化の検討
中島 研吾 (東京大)	マルチグリッド CG 法の知見に基づくアルゴリズムの議論
須田 礼仁 (東京大)	時間方向並列のアルゴリズムに関する議論
岡本 祐幸 (名古屋大)	生体高分子 MD 法における実応用に向けた議論・検討
杉田 有治 (理研)	生体高分子 MD 法における実応用に向けた議論・検討

### 2. 研究の目的と意義

数年後の超大規模計算分野では、これまでの並列化方針に加えて、新たな並列化軸による高い並列性能の実現が求められている。1 つの方向性として、時間軸での並列化が期待されている。研究代表者および共同研究者らは、これまで、実アプリケーションの立場や基礎検討の立場で、個別に、「時間並列化」を検討しているが、体系的な理解の下で検討しているわけではない。今後の発展のため、JHPCN 拠点を核として研究者同士が連携し、ネットワーク型共同研究として議論を深め、「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を行う。

時間方向並列化を、効果的に実現した事例報告は、まだ少ない。大規模な RMC 法の事例など、時間方向並列の分野で注目される研究結果を得ている。今後、体系的なベンチマーク報告のための大規模計算を実施し、当該分野の研究報告としてまとめる必要がある。準備段階の議論の 1 つとして、生体高分子 MD 法におけるクーロン力の 3d-FFT 計算に関して、RESPA 法の改良 (補正計算の導入) による計算コスト軽減が見込まれており、実装で実証検証することで、広い普及の可能性が期待される。これらの研究は、広く、意義があるものと考えられる。

また、時間方向並列化の一般理論についても、再整理の余地がある。1964 年の parallel time

integration (予測と修正の組み合わせ) 論文を出発点として、2001 年の PARAREAL 論文で並列計算の高速化の理論的な可能性を示すまでに至ったが、実際に実測に基づく並列性能までは議論していない。この 2～3 年で、具体的な修正アルゴリズムを利用した研究成果が発表されるようになった。実際の並列計算機の特性に対峙した形での実用的理論整理には、大きな意義があると考えられる。より概念を一般的に捉えて、適用対象を整理し、一般化を図ることが求められている。本研究課題では、いくつかの時間方向並列化に成功した事例を基に、概念の一般化とその理解に基づく適用対象の探索と成功事例の創出を行う。今後、より高並列になるスーパーコンピュータの活用技術として、意義が大きいと考えられる。

### 3. 当拠点公募型共同研究として実施した意義

本研究は、大規模並列計算機での時間方向並列化アルゴリズムについて、萌芽的に検討するものである。さらに、JHPCN 活動を通じて広く共同研究者を募り、多くのシミュレーション分野での横断的な検討で、理論的汎用化や応用対象の拡大を目指しており、JHPCN のネットワーク型拠点を活用することが、効果的であると考えている。

本研究を効果的に実施するための共同研究者として最適な人材が、JHPCN 拠点教員であることも、必要性の 1 つである。例えば、九州大学 高見先生 (副代表者) は、時間方向並列化の基礎論をすでに検討している。東京大学 中島先生は、マルチグリッド CG 法など、時間方向並列化アルゴリズムと密接な手法を検討している。名古屋大学 荻野先生は、MPS 法を用いた大規模計算を検討するなど、アプリケーション応用面で貢献が期待される。

また、本研究では、一定の規模の大型計算機を利用した実証検討も行うためにも計算機リソースが必要であり、JHPCN 公募型共同研究として実施したいと考えている。

### 4. 前年度までに得られた研究成果の概要

研究代表者および副代表者は、時間方向並列化アルゴリズムを検討し、実装し高速化の効果があることを確かめている。その成果については、国際会議等で発表している。

大規模な RMC 法 (SC14 のポスターなど発表) では、逐次的なモンテカルロ探索法の評価関数計算を、時間並列可能部分とそれ以外に分離し、時間並列化の副次効果として通信回数を削減することで、同じ MPI プロセス数でも、高速化できることを示している。(ただし、より多数の MPI プロセス数に対する並列化効果としての経過時間削減のベンチマーク測定などは、未実施である。本研究課題で実施したいと考えている。)

分子動力学に対する適用可能性の研究では、通常用いられる近似時間発展計算を恒等変換として簡略化した場合でも実用的に適用可能であることを示し、非同期通信を利用した高速化法など、大規模並列計算時の効率的な実装についての成果を EuroMPI, ParCo などの国際会議で発表している。

### 5. 今年度の研究成果の詳細

平成 27 年度前半は、議論や試験的検討を中心に行い、後半は、PPSC 型の成功事例とその意義を広く周知させるため、大規模 RMC 解析の論文化などに係る作業を実施した。

#### (1) 時間方向並列化の効用に関する分類整理の (理論的) 議論

本研究課題では、「一般に、因果律から時間方向並列化は困難である」と考えられている中で、どのような形態で、事実上の時間方向並列化により、多数ノードの並列環境下で、Elapsed time を削減できるかについて整理することを試みた。代表者および副代表者 (高見先生) が、主に、東大 須田先生、中島先生、Juelich Supercomputing Centre Dr. Robert Sperk、理研 AICS 小野チーム 飯塚先生らとディスカッションし、概念整理をした。

時間並列化の効果は、次の 2 つに分類できる。

- ・第 1 種：利用ノード数の増加で経過時間を削減。(利用ノード数を固定せず)
  - 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。

時間方向並列化の実装としては、Prediction(予測)と Correction(修正)の組み合わせたアプローチが主である。PDE/ODE 系の Parallel in Time (PIT) integration による時間方向並列化は、Serial 計算で予測を素早く行い、その修正計算を Parallel に実施する Serial Prediction-Parallel Correction (SPPC) 型であった。一方で、代表者が実現した大規模 RMC 法での時間方向並列化は、予測計算を Parallel に行い、修正計算を素早く Serial 計算で行うものである。これは、Parallel Prediction-Serial Correction (PPSC) 型と分類できる。従って、概念レベルの分類は以下の通り。

- ・PPSC: Parallel Prediction-Serial Correction
  - ・SPPC: Serial Prediction-Parallel Correction
- 実装を考えると、Serial の意味は、非並列ではなく、時間依存があるという意味である。ここでの Serial 計算は、OpenMP 並列化や、局所化した MPI Communicator での部分並列化の方が、実情に近いと考えられる。このような整理や議論を通じて、実際に、次節の大規模 RMC 法計算の更なる高速化では、階層的な時間方向並列化や Serial 計算部の高並列化対応を検討するに至った。

時間方向並列化の一種として、「過去の情報で代用する『非同期化』」が考えられる。予測—修正の予測計算も、この非同期化の一種とも見なせる。例えば、分子動力学法などハミルトニアン系の時間発展で記述される系での RESPA 法などは、変化の遅い力は長周期で計算し、変化の激しい力を短周期(毎回)計算するなどの手法が用いられている。これは、一種の非同期化とみなせる。分子動力学

法に焦点を当てると、隣接粒子間の力の計算の高速化のために、Neighboring list を作成するが、このリストは一定の寿命で利用される。この場合、過去の情報を用いて、未来に利用する内容を、別に独立に作成すること(演算のオーバーラップに近いこと)が可能なり、時間方向並列化が実現できることになる。GENESIS 開発チームとの議論で、この「非同期化」による高速化は、GPU を利用した高速化においても、活用できる概念であることが示唆された。

現在、時間方向並列化が導入可能となる箇所に関する仮説(見通し)として、「元の物理に近い部分よりも、物理から離れた人為的な(高精度)近似手法の部分に時間方向並列化が適用しやすい」、特に、「演算そのものではなく、演算高速化のユーティリティ部分」が対象になりやすいのではないかと考えて、議論・整理を進めている。

## (2) 大規模 RMC 法解析の更なる高速化

逆モンテカルロ法(RMC法)は、Spring-8などの極小角散乱データから3次元構造を推定(モンテカルロ探索)する手法である(図1)。概要から逐次的なモンテカルロ探索であることがわかる。我々は、Parallel Prediction-Serial Correction型の時間方向並列化を施した。この時間方向並列化は、第2種の効果を示す事例である。図2には、S(q)の差分計算に必要なヒストグラムの差分の大部分の計算を時間方向で並列化した概念図を示している。結果に、Global 通信の回数が削減されたことにより、高速化が実現している。

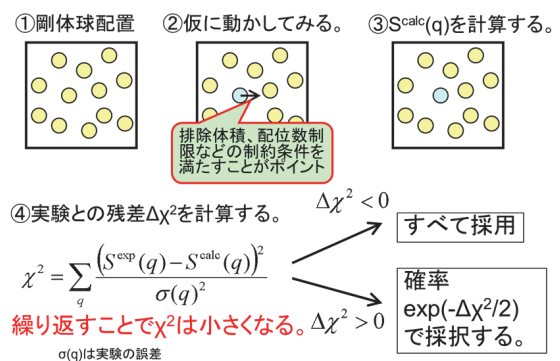


図1 RMC法の概要図

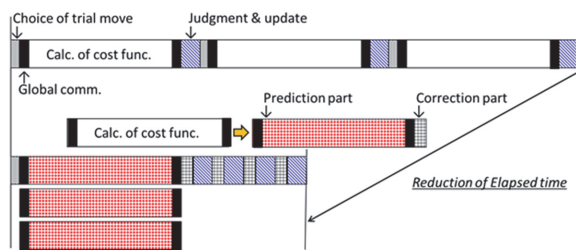


図 2 時間方向並列化による経過時間短縮

2014 年度「京」産業利用トライアルユース等で高速化した SimpleRMC コードについて、時間方向並列化法の並列計算特性評価の観点から、多数の計算ノードを利用した高速化効果（経過時間削減効果）の評価した。「京」産業利用トライアルユースでは、規定のノード時間積内での解析実施を優先し、経過時間削減の観点でのベンチマーク評価は行っていない。本研究課題では、並列性能評価の観点でのベンチマーク計算や更なる高速化（時間軸並列度の増大と、Serial Correction 部の局所並列化等）を、東大 FX10 で行った。

約 3000 万粒子の系で、200 万回の RMC trials を実施した経過時間を計測した。昨年度のコードの経過時間（表 1）と、現在作業中のコードの結果（表 2）を示す。M は時間方向の並列度である。昨年度に比べ、修正計算で局所並列化を強化し M を増大させて、高速化することができた。

表 1 昨年度のコードの経過時間

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

表 2 現在最適化作業中コードの経過時間

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

また、実際に 3 億粒子の系での高速化検討も実施した。M=256 や 512 が好ましい値となった。応用先の「京」産業利用課題で、「京」を利用した所、

M=256 ではメモリが不足し、M=128 とする必要があった。時間方向並列化の性能発揮には、結果、大規模なメモリ空間を必要とする点もポイントと考えられる。

予測計算パートと修正計算パートのオーバーラップによる高速化が理論的に考えられたため、改良を検討した。修正計算の規模が、M から 2M に増加し、M の最適値やメモリ要求が大幅に変わる。現在、利点が出るパラメータ領域を検討している。

さらに、上記の 1 次元散乱スペクトルに対する RMC 法に加えて、(複数の実験研究者からの要請がある) 2 次元散乱パターンに対する RMC 法について、新プログラムコードが完成したので、時間方向並列化を適用の準備検討を行った。H28 年度に、2 次元散乱パターンに対する RMC 法を検討する課題の中で、時間方向並列化を含めたチューニング作業を実施していく予定である。

### (3) 拡散方程式・非圧縮流体・分子動力学計算における時間方向並列化

拡散方程式・非圧縮流体・分子動力学計算における時間方向並列化を検討した。Parareal などに近い Serial Prediction-Parallel Correction の事例である。この節の事例は、時間発展問題での時間方向並列化の第 1 種効果を示す事例である。

拡散方程式の系では、以下の方針で、時間方向並列化することで、経過時間の短縮ができた。

- ・試行は、Coarse Grid (例えば 2 倍の grid 間隔)での計算。
- ・3次元の場合、 $1/8 (=1/2^3)$  の計算量で試行が完了。
- ・時間ステップは、 $4 (=2^2)$  倍大きく取れる。

二次元非圧縮流体(渦度・流れ関数表現)の系では、以下の方針で、時間方向並列化することで、経過時間の短縮ができた。

- ・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。(図 3)
- ・速い部分を試行、遅い部分を修正とする。

さらに、Multi-grid 表現の導入でさらに収束性向上させる検討を行っている。

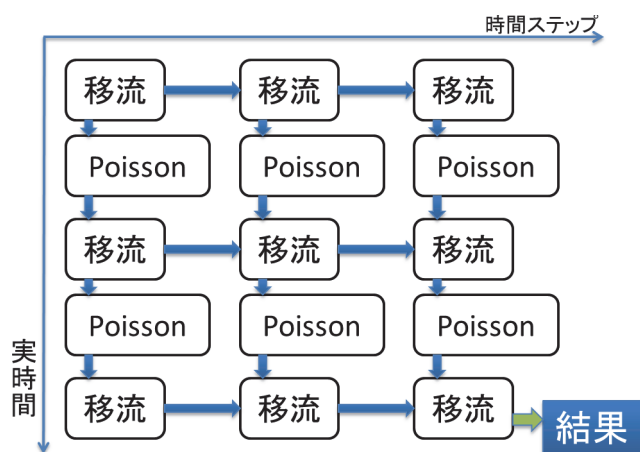


図 3 二次元非圧縮流体の時間方向並列化

分子動力学計算については、Identity Parareal の構成で、時間刻みと誤差の関係 (図 4) から、十分実用になる [T. Takami and D. Fukudome, LNCS 8384, pp. 67-75 (2014).] と考えられる。

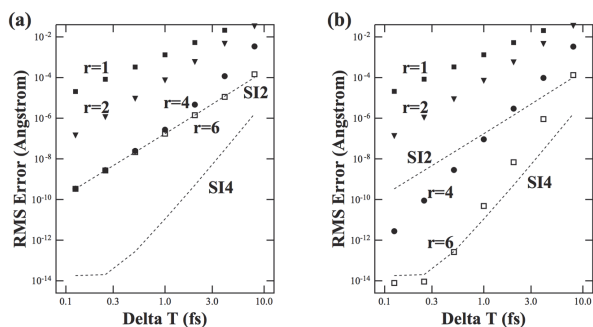


図 4 時間刻みと誤差の関係

一方で、生体高分子の MD 計算では、高い精度の MD 計算が必要とされない場合が多いため、この手法を適用した場合のメリットの検討が必要である。現在その方向の検討について、理研 AICS 杉田チームの GENESIS の公開コードをベースに検討を開始した。今後、さらに作業を行う予定である。

#### (4) 生体高分子 MD 計算や MPS 法計算への適用

生体高分子 MD 法などの古典分子動力学法では、短距離力とクーロン力の計算が行われている。広い意味での時間方向並列化の概念に基づいて、超高並列計算機環境下で経過時間を短縮するアルゴリズム案を検討した。平成 27 年度は、アルゴリズムの詳細開発、実用的な計算でのデータ特性分

析、プロトタイプの検討を行う前段階として、下記の 3 点について、現在の計算機・アーキテクチャでの実効実利の見通しの議論を行った。実際、Particle-Particle 計算と Particle-Mesh 計算の split を前提とすると、精度による計算時間の違いや補正計算との負荷バランスも入り、煩雑になる。労力の割にメリットが小さいと判断した。

- ・クーロン力の 3d-FFT で大きな計算コストを要している。実用上クーロン力の計算は、RESPA 法に基づいて、短距離相互作用の計算 4 ステップあたりに、1 回の計算で済ませている。(時間方向並列化の文脈では、過去の位置情報を 4 回使い回しているが、補正計算をしていない処方となっている。) 本研究では、電荷密度の変化などに対する補正計算を施すことにより、この 4 回をより長時刻化する実装を検討する。
- ・Neighboring リストは、上記と同じように寿命を持った人為的なものである。Neighboring リストの作成を、2 系列化するなど並列化増大で、力の計算とオーバーラップさせて高速化する方法の有効性を検討する。
- ・3d-FFT について、過去の差分とし単精度計算を用いることでの近似的高速化が可能である。

上記の他に、高見 (副代表者) らによる時間方向並列化の検討に基づき、過去の座標の時系列データからの予測・修正することで、力の計算のパイプライン並列化 (複数の MD ステップの力を、同時並列的に計算する) により、演算量は増加するが、並列性の増大で経過時間の短縮を目指した。現在、検討中である。

MPS 法の高速化においても、同様の手法の有効性を議論・検討した。引き続き検討中である。

#### (5) PPSC 型の成功事例としての大規模 RMC 法の成果とりまとめ作業

PPSC 型の時間法並列化の成功を広く周知するには、応用事例を論文として成果確立させることが重要である。平成 27 年度の後半は、大規模 RMC 法の成果とりまとめ・論文化作業を実施した。論



文化のプロダクトラン (3000 万粒子サイズ) は、京産業利用課題 (hp140239, hp150064) の枠で、JSR (株) 富永博士・曾根博士との共同研究として実施した。

本研究課題では、2つの異なるゴム材料におけるシリカナノ粒子の SPring-8 実験データ (X線極小角散乱) について、400 万粒子サイズでの予備的検討や、解析手法の準備研究を実施した。図5には、RMC 解析で得た 400 万粒子の座標を一部切り出した図 (左図) と、実験で撮影した TEM (透過型電子顕微鏡) 図とが、末端変性 SBR (赤枠) と未変性 SBR (青枠) の場合のそれぞれで類似している様子を見ることができた。なお、図6に示すように、スライスの厚さに応じ、見た目の印象が異なることから、解釈には注意が必要である。しかしながら、末端変性 SBR (赤枠) と未変性 SBR (青枠) の場合で凝集状態に違いがあることはスライスの厚さに依らず、共通である。

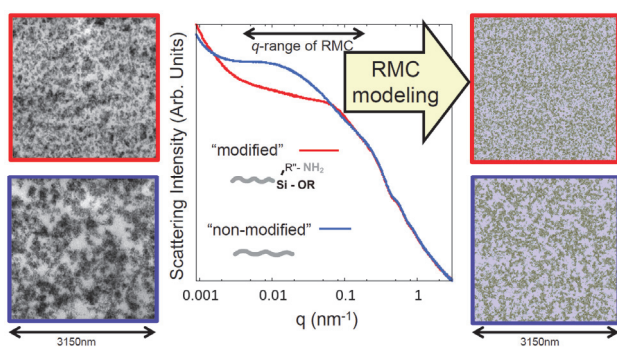


図5 TEM 像と、RMC 結果のスライス像の比較

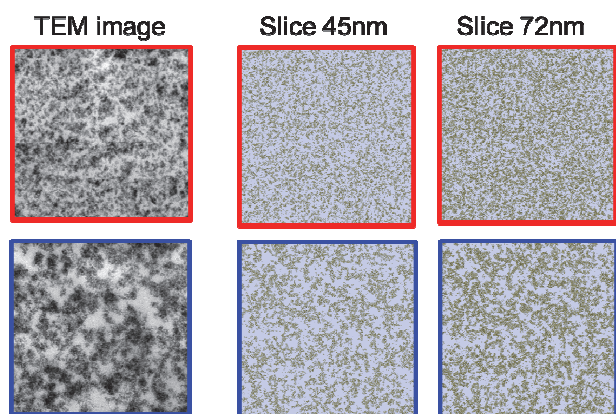


図6 スライスの厚さの違い

末端変性 SBR (赤枠) と未変性 SBR (青枠) の場合で凝集状態が異なるため、凝集体の界面にある粒子の数や、界面粒子付近の空間の大きさが異なると考えられる。その1つの解析方法として、ボロノイ分割したセルの体積のヒストグラムを調べる方法を考案した。ボロノイ分割には、VORO++パッケージを用いた。図7に、ボロノイ体積のヒストグラムを示す。末端変性 SBR の場合には、大きな体積の頻度が、未変性 SBR の場合に比べて、小さいことがわかる。これは、凝集体間のフリースペースが小さいことに対応すると考えられる。

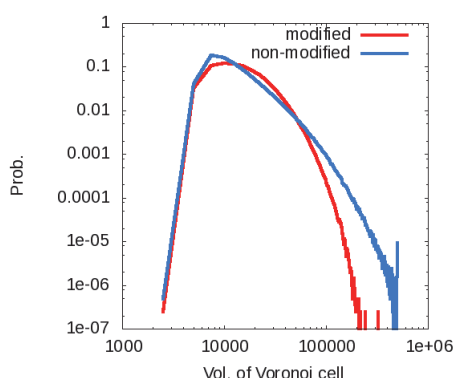


図7 ボロノイ体積のヒストグラムの比較

本研究課題で得た 400 万粒子系で予備的な検討を踏まえて、京のプロダクトランの結果について種々の解析を実施し、論文としてとりまとめた。現在、投稿中である。

## 6. 今年度の進捗状況と今後の展望

時間方向並列化の概念整理や個別事例での検討は、概ね予定通りである。しかしながら、アウトカムの1つとして想定した分子動力学での時間方向並列化の効果発揮については、他の高速化手法の適用により、相対的に困難 (コスト対効果での目減り) と判断した。

平成 27 年 8 月に、偏微分方程式系の時間方向並列化で著名な Dr. Robert Sperk (ドイツユーリッヒ スパコンセンター) と、時間方向並列化に関する長時間ディスカッションを行い、時間方向並列化の類型について、整理することができた。

その結果をとして、PPSC 型の時間方向並列化の宣伝として、成功事例である大規模 RMC 法解析の結果を広く周知させる事とした。そのために、論文として確立させるための作業を実施した。現在投稿中である。

今後、時間方向並列化の成功例や考え方（本研究課題の議論を通じて整理したもの）を広く成果発表するとともに、特に、PPSC 型の時間方向並列化のさらなる応用を広げていく考えである。

## 7. 研究成果リスト

### (1) 学術論文

- K. Hagita, “Supercomputer aided analysis of polymer nano-composites by X-ray scattering analysis and large-scale coarse-grained MD simulations”, Journal of the Imaging Society of Japan, Vol., No. 6 570-577 (2015).
- K. Hagita, “Time-parallelization of sequential reverse Monte Carlo analysis with prediction-correction computing”, HPCI Research Report, Vol. 1, 9-15 (2016).
- K. Hagita, T. Tominaga, and S. Sone, “Large-scale reverse Monte Carlo analysis for ultra-small-angle X-ray scattering data of silica nanoparticles in end-modified rubbers”, submitted.

### (2) 国際会議プロシーディングス

### (3) 国際会議発表

### (4) 国内会議発表

- A. Naribayashi and T. Takami, “Performance Measurement of Parareal-in-time Method by Spatial Coarse Graining”, 情報技術, 応用数学そして教育に関するワークショップ, 津和野町コミュニティセンター (2015.8)
- 萩田克美, “モンテカルロ探索による散乱関数

からの逆問題的構造推定への挑戦”, 第 2 回大型実験施設とスーパーコンピュータとの連携利用シンポジウム, 秋葉原, (2015.9)

- 高見利也, “非線形・マルチスケールと時間並列化法”, 研究会「非線形現象の捉え方」, FIT セミナーハウス (2015.10)
- T. Takami, “Future Prospects for the Parallel-in-Time Algorithm”, 第 19 回環瀬戸内応用数理部会シンポジウム, 天瀬公民館 (2016.1)
- 萩田克美, “粗視化 MD によるフィラー充填高分子系の 2 次元散乱パターン評価と可視化”, パーチャルリアリティ技術などを用いた可視化表現法の研究会 (2016.1)
- 萩田克美, “LAMMPS 粗視化 MD によるフィラー充填高分子系の 2 次元小角散乱パターン評価”, 第 1 回「京」における材料系ワークショップ～LAMMPS を中心として～ (2016.2)
- 萩田克美, “大規模可視化と HPC の活用で促進させる高分子ナノ複合材料研究”, 大阪大学 Cyber HPC Symposium (2016.3)

### (5) その他 (特許, プレス発表, 著書等)

- 高見利也, “Parallel-in-Time 法の現状と今後, 数理構造保存を接点とした数学・HPC・実科学のクロスオーバー(ディスカッションセッションでの情報提供)”, 2015 年 11 月 24-25 日, 電気通信大学 (東京都調布市)
- 理研にて、2015 年 8 月 20 日に、Dr. Robert Sperk に時間方向並列化のセミナーを実施した。時間方向並列化について、広く周知するとともに、関心を持つ研究領域を把握することができた。