

領域分割用バケットによる大規模並列 MPS 陽的アルゴリズムの開発

室谷浩平† 大地雅俊† 藤澤智光‡ 越塚誠一†

1. はじめに

MPS とは、Moving Particle Simulation の略であり、粒子法の代表的手法の一つである。粒子法とは、連続体を粒子の集合として表現して、微分方程式で表現される物理法則を粒子間の式に離散化して、粒子の状態を計算する手法である。粒子法は計算点で粒子を移動させることができるため、格子法に比べて、自由表面や大変形などの動きの激しい物理現象を解くのに優れている。

しかしながら、粒子が移動という解法が分散メモリ計算機環境での並列化を困難なものとしてきた。代表的な並列化法には、スライスグリッドと呼ばれる計算領域内に 1 軸をとり、この 1 軸に直交するように計算領域をスライスする方法がある。この方法は、計算速度やメモリ効率の向上に貢献したが、大規模並列計算には対応できなかった。そのため、粒子法計算は、共有メモリ計算機での並列化が主に行われてきた。

本研究では、従来の方法とは異なり、計算領域に領域分割用のバケットを定義して、この領域分割用のバケットを用いて、領域分割を行う手法を開発した。

2. 領域分割用のバケットによる領域分割

MPS 陽的解法[1]では、ある粒子が 1 時間ステップで影響を及ぼす範囲が決められている。この影響範囲以上の長さを一辺とするバケットを作成して、粒子を

バケットに登録する。各バケットに含まれる粒子数が等しくなるように、ParMETIS[2]によって領域分割を行う。各領域からバケット 1 つ分だけ領域を広げて、その領域に所属する粒子を各計算ノードに割り当てる。一旦、割り当てられた粒子は、各ステップ内では通信をする必要がなく正しい計算ができる。

各計算ノード間の粒子数のバランスが著しく崩れた時には、再度 ParMETIS を用いて粒子数が均等になるように領域分割を行う。

3. 計算結果と結論

表 1 は、東京大学 T2K で各計算ノード内 16 スレッド用いたハイブリッド計算を行った結果である。10 ステップの解析を行い、領域分割 (ParMETIS) は 4 回行っている。通信に関わる部分は計算時間の 1 割強程度であることが分かる。そのため、Weak scaling で 80%程度達成している。この結果は、これまで困難と思われてきた粒子法の大規模並列計算に新たな可能性を見出す結果であると考えられる。

参考文献

- [1] 大地雅俊, 越塚誠一, 酒井幹夫, “自由表面流れ解析のための MPS 陽的アルゴリズムの開発”, Trans. Japan Society for Computational Engineering and Science, Paper No.20100013 (2010).
- [2] Iribe T., Fujisawa T. and Koshizuka S., “Reduction of communication in parallel computing of particle method for flow simulation of sea side areas”, Coastal Engineering Journal, Vol 52, Issue 4, pp.287-304, (2010).

表 1. 10 ステップ間にかかった総計算時間の計算ノード間平均 (単位は秒)

number of processes	particles	Total	MPS 計算	近傍探索	通信テーブル作成	通信時間	ParMETIS	同期待ち	Scalability	Memory/PE
4	18,410,016	514	129	333	20	11	4	14	1.00	930 MiB
8	35,891,016	543	132	345	20	13	4	26	0.92	995 MiB
16	69,851,316	597	137	352	20	16	4	65	0.81	1143 MiB
32	136,044,816	592	140	353	19	15	5	58	0.80	1462 MiB
64	268,431,816	599	146	354	19	16	5	56	0.78	2130 MiB

† 東京大学大学院工学系研究科システム創成学専攻, Department of Systems Innovations, School of Engineering, the University of Tokyo

‡ プロメテック・ソフトウェア株式会社, Prometech Software, Inc.