

新しい時間並列化法 iParareal とマルチスケール解析

1) 九州大学, 2) JST CREST 1),2) 高見利也, 1) 福留大貴

現在の並列計算機では、SIMD 演算機や加速機構の並列度まで含めると、莫大な数の並列演算が可能である。しかし、現実には、計算スケールを大きくすることに意味のある問題ばかりではなく、問題サイズを固定した状況での高速化要求も多い。強スケーリングの観点から性能を評価する場合、並列度の増加に伴う性能の飽和は避けられない。本ポスターでは、飽和した並列計算の高速化に威力を発揮する時間方向並列化法の改良と応用について発表する。

1 iParareal 法の導入

時刻 t_k ($k = 1, 2, \dots$) での系の状態を x_k と表すとき、 $x_0 = x(t_0)$ からの初期値問題が、時間発展計算 $x_{k+1} = F_k(x_k)$ によって解かれる場合を考える。Parareal 法 [1] は、近似計算 $\tilde{x}_{k+1} = G_k(x_k)$ を導入し、時系列 $\{x_k\}$ の r 次近似 $\{x_k^{(r)}\}$ を、漸化式

$$x_{k+1}^{(r+1)} = G_k(x_k^{(r+1)}) + F_k(x_k^{(r)}) - G_k(x_k^{(r)}), \quad (1)$$

により求めるものである。ここで、 $F_k(\cdot)$ の計算は並列に実行できるが、 $G_k(\cdot)$ の良否と計算コストが、近似解の収束性と計算全体のスピードアップ比に影響することが知られており、注意が必要である。

我々は、式 (1) を簡略化した漸化式

$$x_{k+1}^{(r+1)} = x_k^{(r+1)} + F_k(x_k^{(r)}) - x_k^{(r)} \quad (2)$$

を提案し、Identity Parareal (iParareal) と名付けた。これは、 $G_k(\cdot)$ の代わりに恒等変換 (identity) を利用したもので、通常の連続な時間発展計算に広く適用できることがわかっている [2]。本ポスターでは、出来るだけ多くの計算科学の問題に適用することを目指して、iParareal 法の実装方法と性能評価について詳しく解説する。

2 バケツリレー実装と性能

Parareal 法 (1) を並列実装するとパイプライン的な通信のパターンとなるが、iParareal 法 (2) では、さらに単純化されたバケツリレー型の通信関数を用いて実装できる [3]。この場合、データを細分化して非同期転送にすることで、大幅な高速化が可能である (図1)。これにより、転送量が多いため不向きであると考えられていた流体系に対しても、時間並列化が適用できることとなった [3]。

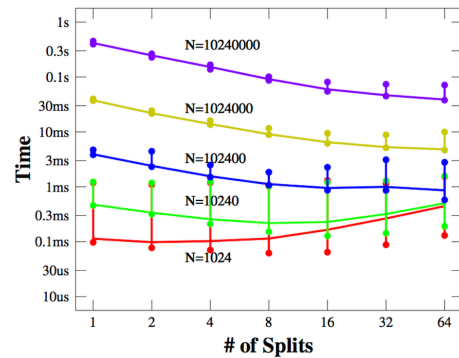


図 1: バケツリレー転送の性能。転送量が多い場合は、非同期通信の利用により、大幅な性能向上が期待できる。

3 マルチスケール解析への応用

Parareal 法は、分離した時間スケールの中で、高次の摂動計算を数値的に実施する。これは、時間方向に対してマルチスケール展開を行う形になっているが、本ポスターでは、このような構造を応用して、新しい解析手法としての可能性を検討したい。

生体分子の動力学や振動緩和の問題など、複数の時間スケールを内在する複雑な系では、短い時間スケールは予測不可能な揺らぎを含んでいるにも関わらず、ゆっくりしたスケールの運動が特定の機能を示すことがある。このような動力学の再現には、ミクロスケールの自由度をすべて取り込んだ大規模なシミュレーションが欠かせないが、何が起きているのかを理解するためには、また別の解析を必要とする。そこで、このような系に Parareal 法を適用し、数値的な摂動解析を実施する方法を考える。まずは、解析的に扱える例に対して、どのような解析結果が得られるのかを明らかにした上で、今後の応用について議論したい。

本研究は、科学研究費補助金基盤 (C) 「身近な非線形現象に対するマルチスケールの解析手法の確立と応用」 (課題番号 23540454) の支援を受けています。

Reference:

- [1] J.-L. Lions, Y. Maday, and G. Turinici, "A 'parareal' in time discretization of PDE's," C. R. Acad. Sci., Ser. I, Math. **332**, 661–668 (2001).
- [2] T. Takami and D. Fukudome, "An Efficient Pipelined Implementation of Space-Time Parallel Applications," ParCo'13, Sep. 10–13, 2013, Munich.
- [3] D. Fukudome and T. Takami, "Parallel Bucket-Brigade Communication Interface for Scientific Applications," in Proc. EuroMPI'13, 135–136 (2013).