Vol.2014-HPC-145 No.23
2014/7/29

負荷分散技法OhHelpによる粒子コードの並列化

仁井 大心[1]　坂上 仁志[2]　羽原 英明[1]　田中 和夫[1]

概要: 本稿では, 粒子コードを負荷分散技法 OhHelp[1] を用いて並列化し, その効果を検証した.OhHelp とは, 粒子空間分布の偏りから生じる負荷不均衡を緩和することができる並列化手法である.
今回は極端に偏った空間分布を持つ粒子をシミュレーションの対象とし, プロセス数を 32 から 1024 まで変化させ, 計算速度と各プロセスにかかる負荷を観測した. その結果, プロセス数に対して線形的な計算速度の上昇がみられた. また, 全プロセスに概ね均等に負荷分散がされていることも観測された.

Parallelization of PIC code by OhHelp Load Balancer

Nii Daishin[1]　Sakagami Hitoshi[2]　Habara Hideaki[1]　Tanaka A. Kazuo[1]

Abstract: This paper describes the effect of parallelization of PIC code with the load balancing method OhHelp[1]. OhHelp is a parallelization method which can relieve load imbalance due to the ununiform particle distribution. In this work, we simulated particles which have the extremely ununiform distribution by PIC code with OhHelp and measured its performance using up to 1024 processes. As a result, we obseved a linear speedup for the number of processes and found the achivement of equally load balancing for all processes.

1. はじめに

近年, クリーンで安全なエネルギーとして核融合エネルギーが注目されている. 核融合を起こす手段の一つとしてレーザー核融合 [2] が挙げられる.

レーザー核融合とは, 重水素, 三重水素から成る燃料にレーザーを照射することにより, 極短時間にきわめて高いエネルギーを与え, 核融合反応を起こすという手法である.

レーザー核融合実現のためにはレーザープラズマ相互作用という極めて非線形な物理現象の解明が必要である. このレーザープラズマ相互作用を定量解析する手法として PIC(Perticle-In-Cell) シミュレーション [3] が広く用いられている. PIC シミュレーションとは, 個々の粒子を運動論的に扱うシミュレーションであり, 非平衡かつ非線形な現象の分析に適している.

しかし, レーザー核融合によって生じる物理現象を PIC シミュレーションで再現するとなると膨大な粒子を扱う必要があるため, 計算規模が増大してしまう. そのため, 複数の CPU を用いて並列計算する必要がある [4].

ここで注意しなければならないのが,PIC シミュレーションで扱う粒子の空間分布である. レーザー核融合を再現するためのシミュレーションでは, 図 1 のように極端に偏った空間分布を持つ粒子を扱わなければならないことが非常に多い [5]. 図 1 は金コーンを用いたレーザー核融合 [6] を模したシミュレーションである. 三角形の粒子分布がコーンの先端を表している. そのため単純に領域分割すると並列効率の大幅な低下を招くこととなる. 従って特定の CPU に計算量が集中しないような負荷分散が必要である.

OhHelp[1] とは粒子空間分布の偏りから生じる負荷不均衡を緩和することができる並列化技法である. 具体的な技法として, まず領域を均等分割し, 各々の計算領域とそれに含まれる粒子を各プロセスに割り当てる. そして, 本来の担当とは別の部分領域を一つだけ担当し, その領域に含まれる粒子の一部分について電磁場との相互作用計算を行う. こうすることで粒子空間分布の偏りから生じる負荷不均衡を解決している. 神戸大の三宅氏の研究により, すでに

[1] 大阪大学工学研究科
Faculty of Engineering, Osaka University
[2] 核融合科学研究所基礎物理シミュレーション研究系
Fundamental Physics Simulation Research Division, National Institute for Fusion Sciences

ⓒ 2014 Information Processing Society of Japan

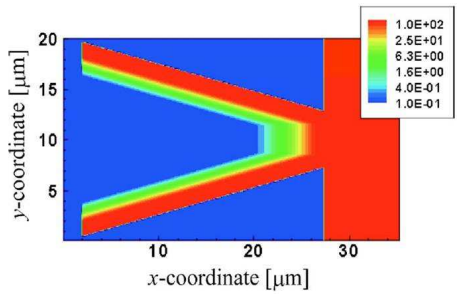


図 1　レーザー核融合を再現したシミュレーション
Fig. 1　Simulation for laser fusion

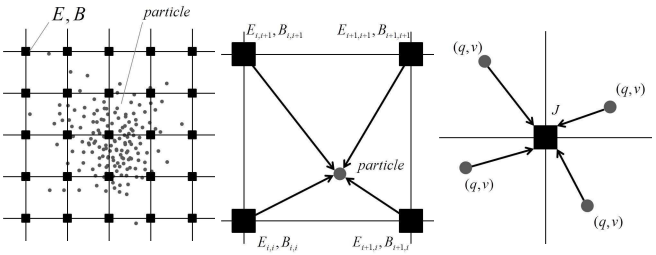
OhHelp は宇宙プラズマ解析のための PIC シミュレーションに応用されている [7]. また, 京大の秋山氏の研究により粒子・流体ハイブリッドプラズマシミュレーションにも適応され, 良好なスケーラビリティが得られることが確認されている [8].

本稿では, レーザー核融合研究を背景としたレーザープラズマ相互作用の解析のために開発された粒子コード ,Fis-cof2[9] に OhHelp を実装し , その性能を評価した.

2. PIC シミュレーション

1. で述べたように,PIC シミュレーションとは個々の粒子を運動論的に扱うシミュレーションであり , 非平衡かつ非線形な現象の分析に適している.

PIC シミュレーションでは, 図 2(a) のように粒子は全計算領域を移動し , 電磁場及び電流密度に関してはグリッド点上に定義される. 図 2(b) に示すように, グリッド内の粒子は近傍のグリッド点上で定義された電磁場からのみ影響を受ける. 一方で電荷, 電流密度は図 2(c) に示すように, 個々の粒子の電荷や速度をグリッド点上で足し合わせることにより求められる.



(a) 粒子, 電磁場の位置関係　(b) 粒子位置更新　(c) 電磁場更新

図 2　PIC シミュレーション概要
Fig. 2　Concept of PIC code

PIC シミュレーションで用いる基礎方程式として, 荷電粒子の相対論的運動方程式が挙げられる.

$$\frac{d\mathbf{u}}{dt} = \frac{\mathbf{F}}{m} = \frac{q}{m}(\mathbf{E} + v \times \mathbf{B}) \tag{1}$$

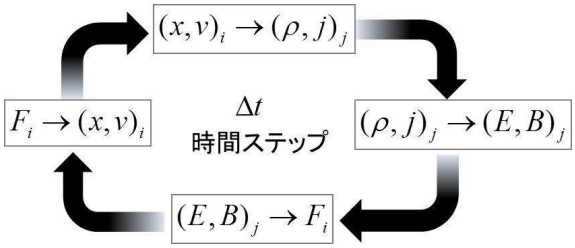


図 3　PIC シミュレーション計算サイクル
Fig. 3　Simulation cycle of PIC code

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{v} = \frac{\mathbf{u}}{\gamma} \tag{2}$$

式 (1) 中の u とは, 粒子が光速に近い相対論速度まで加速された場合に生じるローレンツ因子の効果を加味した速度であり , 式 (2) で表される. ここで,γ はローレンツ因子である.

また, 電磁場を記述する Maxwell 方程式(式(3) ～式(6)) も基礎方程式の一つである. この Maxwell 方程式に電荷, 電流密度を与えることにより電磁場を時間発展させる. ただし , 式(5) は全領域フーリエ変換を必要とするため並列計算に向いていない. そのため実際には式(5) と等価な $d\rho/dt + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0$ を解いている. また, 式(6) について, 初期値が 0, すなわち電流が全領域で 0 となるように粒子を配置すればそれ以後の時間においては自動的に満足されるので, 解かなくてもよい.

$$\nabla \times \mathbf{B} - \left(\frac{1}{c^2}\right)\left(\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}\right) = \mu_0 \mathbf{j} \tag{3}$$

$$\nabla \times \mathbf{E} + \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = 0 \tag{4}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0} \tag{5}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \tag{6}$$

以上を計算サイクルとしてまとめると, 図 3 のようになる. まず, 荷電粒子の位置 x と速度 v から, 空間メッシュ上に定義される電荷密度 ρ と電流 j を計算する. 次に, 得られた電荷密度 ρ と電流 j から Maxwell 方程式を解くことにより空間メッシュ上に定義される電場 E と磁場 B を時間発展させる. そして, 更新された電場 E と磁場 B から , 各荷電粒子に働く力 F を求める. 最後に得られた F により運動方程式を用いて荷電粒子の位置 x と速度 v を時間発展させる. 以上の手順を経て, 一つの時間ステップ Δt が計算される. シミュレーションではこれを繰り返し行うことで時間を進めている.

3. OhHelp

3.1 概要

図 4[1] に示すように,OhHelp は領域を単純に均等分割し , その分割した部分領域を各々のプロセスに「 1 次担当領域」として割当てる. 図 4 において, 黒色の数字はプロセス

ⓒ 2014 Information Processing Society of Japan

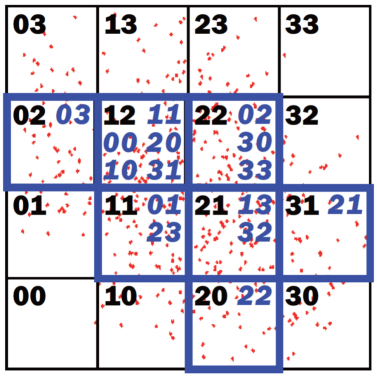


図 4　OhHelp の領域分割
Fig. 4　Space Domain Partitioning

番号かつそのプロセスの 1 次担当領域の番号を示す. 各プロセスの 1 次担当領域にある粒子の数が均衡してる, すなわち領域 s にある粒子の数 P_s が全ての s で次の不等式を満たすなら, 負荷分散は行われずにそれぞれのプロセスは 1 次担当領域とその中にある粒子を担当する.

$$P_s \leq (P/N)(1+\alpha) \equiv P_{limit} \qquad (7)$$

ここで,P は全粒子数つまり全領域にある粒子の合計,N はプロセスの数,α は 0 より大きい数であり, P_s の上限をプロセスごとの平均粒子数 P/N よりも少し大きな値以下としている. 一方, 図 4 に示すように, 不等式(7) を満たさない領域が一つでも存在するときは, 負荷分散が行われる. なお, 本稿では α を 100 倍し, 百分率に置き換えた数値を”負荷分散許容度 [%]”と記す.

その負荷分散技法を示したものが図 5[1] である. 手順としては, 最も粒子数の多いプロセス(以下「 最密プロセス」) から, 最も粒子数の少ないプロセス(以下「 最疎プロセス」) へ粒子を割り当てる. こうして最密プロセスの粒子の一部を最疎プロセスの 2 次担当領域の粒子として処理するこれにより, 最疎プロセスが担当する粒子数は,1 次担当領域と 2 次担当領域合わせて P/N となる. この操作を繰り返すことで負荷分散を実現する.

このモードではほとんどのプロセスが, 平均より多くの粒子が存在している領域を一つだけそれぞれの 1 次担当領域と共に担当する. 例えば, 図 4 において領域 22 は, 青色で示されるプロセス 02,30,33 の「 2 次担当領域」であり, これらのプロセスは領域 22 に存在する粒子の計算を分担する. すなわち, 粒子数が平均よりも大きな 1 次担当領域を持つプロセスは, その領域を分担するプロセスに粒子の一部を「 2 次担当粒子」として委譲することで, 自身が担当する粒子数を他のプロセスの担当粒子数と均衡させる. ここで注意しなければならないのは, 図 5 で示した負荷分散技法の結果, 粒子数が平均よりも多いプロセス 22 も他プロセスの粒子を 2 次粒子として受け取っているということである. 平均よりも粒子数が多いプロセスは他プロセスに粒子を移譲するだけではないのが OhHelp の特徴である.

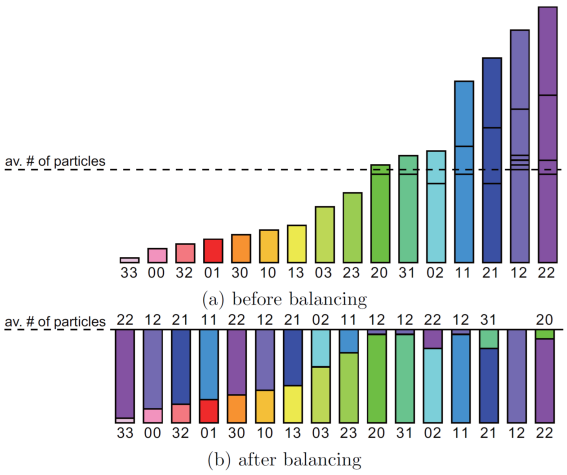


図 5　負荷分散後の粒子割り当て
Fig. 5　Subdomain assignment with perfect balancing of number of particles

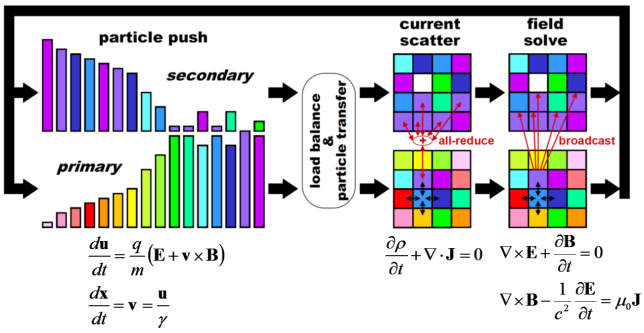


図 6　OhHelp 実装後の PIC シミュレーション
Fig. 6　Typical PIC simulator with OhHelp

3.2　計算サイクル

以上を踏まえ,OhHelp を粒子シミュレーションの計算サイクルに適用すると図 6[1] のようになる.

particle push とは, 電磁場から粒子に対して生じるローレンツ力に基づき, 粒子の位置を更新する過程である. この計算は粒子周辺の電磁場ベクトルがあれば十分に行えるため,1 次領域,2 次領域で独立して行われる.

load balance & perticle transfer とは,particle push により変化した粒子空間分布を基に負荷均衡度の判定を行い, その判定に基づいたプロセス間粒子移送を行う過程である. load balance において, 不等式(7) を満たさない領域が一つでも存在すれば,2 次担当粒子の再割り当てを行う.

current scatter は, 電流密度を求める過程である. 1 次領域,2 次領域とも, 粒子の変位を基に電流密度を求め,2 次領域の値を 1 次領域に合計することにより 1 次領域のみで担当する場合と同一の電流値を得ることができる. 1 次領域で求めた電流密度を再度 2 次領域へ通信することでこの過程は完了する.

ⓒ 2014 Information Processing Society of Japan

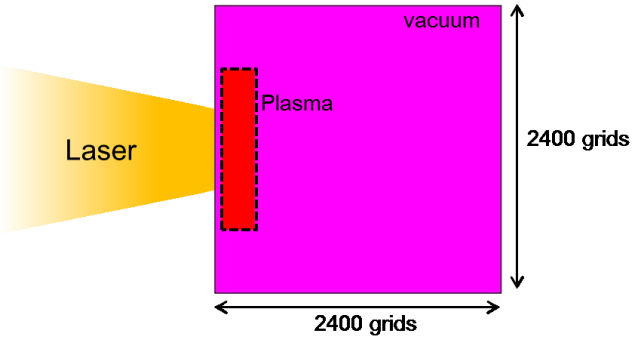


図 7　シミュレーションセットアップ (イメージ図)
Fig. 7　simulation setup

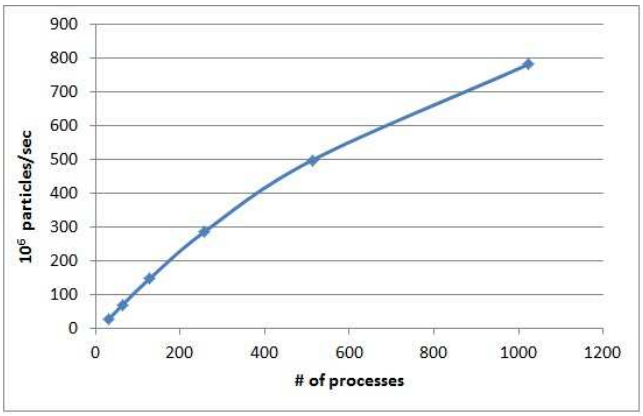


図 8　シミュレーション性能
Fig. 8　Simulation

4. 性能評価

本稿では, 図 7 のように極端に偏った空間分布をもつ粒子にレーザーを照射するシミュレーションを行った. 大きく分けて 2 通りの性能評価を行った.

1 つ目は, 負荷分散許容度を 10%とし, プロセス数を 32〜1024 まで変化させながら, 計算速度がプロセス数に対してどのように向上していくかを観測した. これを性能評価 1 とする.

そして 2 つ目は, レーザー強度を 1.0×10^{18}〜1.0×10^{20}W/cm^2, 負荷分散許容度を 1%〜35%の範囲で変化させ, 計算速度を観測した. これを性能評価 2 とする.

4.1 計算速度測定環境

この測定には核融合科学研究所の大型計算機, プラズマシミュレータを用いた.

機種は, 日立製作所の大規模並列計算サーバ,SR16000 モデル M1 である. コンパイラは日立最適化 FORTRAN90 を用いた. また, この機器は 1 ノードにつき 32 プロセッサ, 搭載メモリが 128GB である. 合計のノード数は 322 であり, ネットワークは 96GB/s の双方向である. プロセッサは 3.83GHz の POWER7 である.

4.2 性能評価1

このシミュレーションでは, プロセス数に対する計算速度のスケーラビリティを観測した. 粒子の配置については図 7 の通りである.

粒子密度は臨界密度の 10 倍, 粒子数は 2.162×10^7 である. レーザーについては, 波長が 1.06μm の矩形波である. なお, レーザー強度はピークに達するまでに線形上昇し, 時間幅は 5fs である. ピーク後についても同様に 5fs で線形下降する. ピーク時の強度は 1.0×10^{20}W/cm^2 であり, フラット幅は 100fs である. シミュレーション時間は 150fs(8429 タイムステップ) とした.

上記のセットアップで, シミュレーションに要した時間, 各プロセスが移動計算を行った粒子数, 各プロセスが粒子計算に要した時間を計測した.

性能評価 1 の結果を図 8, 表 1 に示す.

表 1　計算粒子数
Table 1　the number of calculated particles

# of processes	average[10^6 particles]	max[%]	min[%]
32	5697	0.3654	-0.8357
64	2848	1.057	-0.5324
128	1424	3.274	-4.527
256	712.1	3.012	-7.639
512	356.1	4.190	-23.37
1024	178.0	5.332	-10.05

図 8 は,1 秒間に移動計算を行った粒子数を縦軸に, 横軸にプロセス数を示したものである. 縦軸の定義は以下の式で表される. なお本稿ではこれ以降, 計算速度という言葉を用いることがあるが, それはこの定義式を意味する.

$$\frac{[\#\ of\ particles] \times [\#\ of\ time\ steps]}{[execute\ time]}$$

表 1 は, シミュレーション実行時間の間に各プロセスが移動計算を行った粒子数の総計である. 表中の average とは, シミュレーション時間内に各プロセスが計算した粒子数の平均値であり, 以下のように表される.

$$\frac{[\#\ of\ particles] \times [\#\ of\ time\ steps]}{[\#\ of\ processes]}$$

max,min は最も計算粒子数が多かった (少なかった) プロセスの計算粒子数が average と比べて何%の差異があるのかを表したものである.

これらの結果から計算速度のスケーラビリティについて考察する. まずは図 8 から, 性能評価 1 で行ったシミュレーションの並列効率について考える. 各プロセス数での計算

ⓒ 2014 Information Processing Society of Japan

速度と, プロセス数 32 の計算速度との比率を性能向上比として, またプロセス数 32 の並列効率を 1.00 とした場合の各プロセスの並列効率を表 2 に示す.

表 2　性能向上比
Table 2　efficiency

# of processes	10^6 particles/sec	性能向上比	並列効率
32	29.83	1.00	1.00
64	71.02	2.38	1.19
128	148.5	4.98	1.24
256	285.5	9.57	1.19
512	498.2	16.7	1.04
1024	781.8	26.2	0.818

この表から,1024 プロセスで若干の並列効率低下が見られるものの, プロセス数増加に従って計算速度が線形的に上昇していることがわかる.

次に, 表 1 について, プロセス数が増加するに従い, 計算領域の面積に対する境界線の長さの割合が高くなるため, 粒子数のバラつきが大きくなっている. 特に 512 プロセスや 1024 プロセスの最小値については平均値と比べて 10%以上の差異が発生している. しかし, その他は負荷分散許容度の 10%以内に収まっているので, 全計算時間において, 各プロセスに概ね均等に負荷が分散されていると考えられる.

以上, 図 8, 表 1, 表 2 から, 極端に偏った空間分布を持つ粒子シミュレーションでも OhHelp により均等な負荷分散が達成され, 良好なスケーラビリティが得られたといえる.

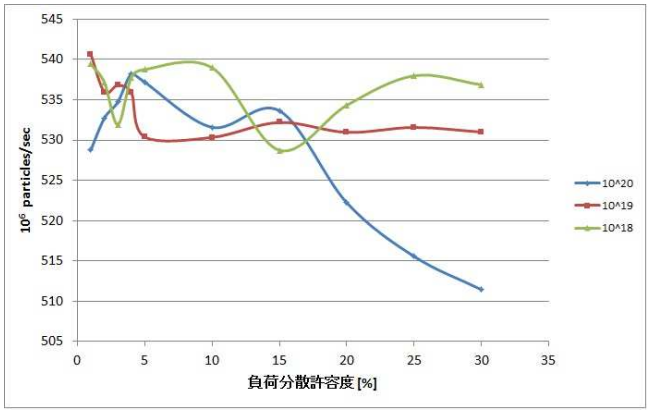


図 9　負荷分散許容度とレーザー強度
Fig. 9　alpha-power

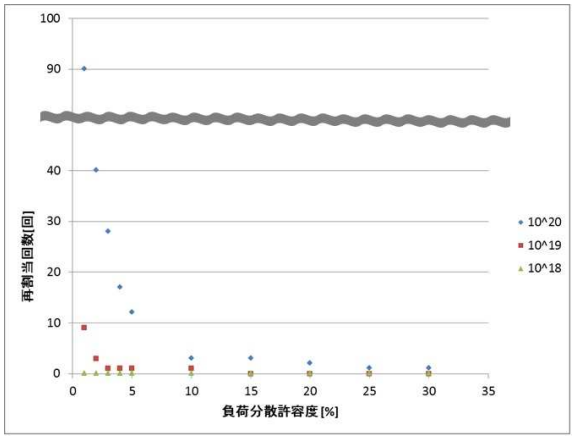


図 10　再割当回数
Fig. 10　rebuild

4.3　性能評価2

ここでは性能評価 1 同様に図 7 のような空間分布をもつ粒子にレーザーを照射するシミュレーションを行った. そして, レーザー強度と負荷分散許容度との 2 つのパラメータを変えることで, 計算速度がどのように変化するかを観測した.

一般に, レーザー強度が高くなるほど粒子は飛散しやすいため, タイムステップ毎の粒子の空間分布が変化しやすくなる. そのような環境下において, 空間分布の偏りはある程度無視してプロセス間の通信時間を最小限に抑えながら計算を進めることと頻繁に負荷分散しながら計算を進めること, この 2 つがどのように計算速度に影響を与えるか見出すことが性能評価 2 の意義である.

ここでは, レーザーのピーク強度が 1.0×10^{18},1.0×10^{19}, $1.0 \times 10^{20}\mathrm{W/cm^2}$ の 3 通り, 負荷分散許容度が 1,2,3,4,5,10,15,20,25,30 の 10 通りのシミュレーションを行った. そしてそれぞれ計算速度 (図 9),2 次担当粒子再割当の回数 (図 10) を計測した. なお, シミュレーション時間は性能評価 1 と同様に 150fs(8429 タイムステップ) である.

$1.0 \times 10^{18}W/\mathrm{cm^2}$ のレーザーについては, レーザー強度が低く, 粒子の空間分布がほとんど変わらない状態であった. それゆえ図 10 より全タイムステップにおいて, 一度も 2 次担当粒子の再割り当てが行われなかった. そのため図 9 において, 計算速度と負荷分散許容度に明確な相関性は見出せなかった.

$1.0 \times 10^{19}W/\mathrm{cm^2}$ の場合と $1.0 \times 10^{20}W/\mathrm{cm^2}$ を比較すると, 計算速度が最大値となる場合の負荷分散許容度がそれぞれ 1%,4%である. このことから, 計算領域内の粒子数が同じであれば, 粒子の散逸度合いが大きければ大きいほど粒子空間分布の偏りはある程度許容して計算を進める方が計算時間短縮につながると言える.

$1.0 \times 10^{20}W/\mathrm{cm^2}$ のレーザーの場合は, 負荷分散許容度が 4%の点で極大値を持つ. このことから,1〜4%の間では負荷分散許容度が上がるにつれて通信時間が減少し, 計算速度が上昇していくが, 4%を越えるとプロセス間の粒子数のばらつきが大きくなるため計算速度が減少していると考えられる.

ⓒ 2014 Information Processing Society of Japan

5. まとめ

本稿では, 粒子コードに負荷分散技法 OhHelp を実装し, その性能評価を行った. シミュレーションの対象とする物理現象として, 極めて偏った空間分布をもつ粒子を扱った. そして大きく 2 種類の性能評価を行った.

1 つ目はプロセス数と計算速度の関係を評価した. プロセス数を 32〜1024 の範囲で変化させながら計算速度を求め, プロセス数増加とともにそれがどのように向上するかを求めた. その結果,1024 プロセスまで線形的な計算速度の上昇が見られ, 各プロセスへの負荷分散もほぼ均一に行われていることが分かった.

2 つ目はレーザー強度, つまり粒子の散逸度合いと負荷分散許容度を変化させることで計算速度にどのような影響を与えるかを検証した. その結果, 粒子の散逸度合いが高くなるほど最大計算速度となる負荷分散許容度は上昇した. つまり, 粒子が激しく動く場合は, 粒子空間分布の偏りある程度許容して並列計算するのがよいということが分かった.

これらの性能評価より, この並列化手法を用いることで, 空間的にさらに大きな分布をもつ粒子をシミュレーションの対象とすることが可能になったといえる. 具体的言うと, これまでの粒子シミュレーションではレーザー核融合について一部の領域しか模擬できなかったが, OhHelp を実装したコードを用いるとほぼ全ての領域を模擬することが可能になったと考えている. 今後はこのコードを, レーザー核融合で生じるレーザープラズマ相互作用という物理現象の解析に生かしたいと考えている.

謝辞 本研究は, 核融合科学研究所共同研究プログラムによる成果である (NIFS13KNSS040).

参考文献

[1] H.Nakashima : OhHelp: A Scalable Domain-Decomposing Dynamic Load Balancing for Particle-in-Cell Simulations, ICS' s09(2009) 90-99.
[2] 畔地宏 : レーザー核融合の概念, J.Plasma Fusion Res. Vol.81,Suppl.(2005)2-10
[3] 内藤裕志 : 粒子シミュレーションの基礎, プラズマ・核融合学会誌 第 74 巻第 5 号 (1998)
[4] 坂上仁志 : 粒子コードによるレーザープラズマ相互作用シミュレーションの発展, J.Plasma Fusion Res. Vol.81,Suppl.(2005)67-75
[5] T.Nakamura : Optimization of cone target geometry for fast ignition, PHYSICS OF PLASMAS 14, (2007)103-105.
[6] 兒玉了祐 : 超高強度レーザーによる新しい慣性核融合研究の進展, J.Plasma Fusion Res. Vol.78,No.8.(2002)792-798
[7] Y.Miyake : Development of a Scalable PIC Simulator and Its Application to Spacecraft—Plasma Interaction Problems, 2010-HPC-124 No.8(2010), 1-11.
[8] J.Akiyama : 負荷分散技法 OhHelp による粒子・流体ハイブリッドプラズマシミュレーションの並列化, Vol.2010-HPC-124 No.8(2010).
[9] H.Sakagami and K.Mima : Fast Ignition Simulations with Collective PIC Code, Proc. 2nd Int. on Inertial Fusion Sciences and Applications.(2002)380-383

ⓒ 2014 Information Processing Society of Japan