プラズマ電磁粒子コードの並列化手法と速度向上率の評価

$\mathbf{P}^{\dagger 1}$ $治^{\dagger 1}$ 高 $治^{\dagger 2}$ 村 Ħ F 畄 功 橋 誠 健 **7**†4 Ħ 雅 樹†3 F 田 裕 畄 治^{†5} 紘†5 大 村 菙 秋 本

本稿では,プラズマ電磁粒子コードの並列化手法の1つとして,ハイブリッド分割法を考える.ハ イブリッド分割法では,粒子計算サブルーチンを粒子分割法で,電磁場および流体量のサブルーチン を領域分割法で並列化する.並列化数は,サブルーチンごとに,独立して設定する.本研究では,ま ず,MPI 関数の通信速度特性と内部通信ロジックを考慮して,各サブルーチンの並列化数を変数と した速度向上率の定式化を行った.これにより,最大速度向上率の予測値と,各サブルーチンの並列 化数を求めることができる.さらに,この手法を,プラズマ電磁粒子コードの1つである,プラズマ 粒子流体混成コードに適用した.その結果,粒子計算サブルーチン,流体計算サブルーチン,および 電流計算サブルーチンを最大 PE 数で並列化し,電磁場サブルーチンを逐次計算と設定することによ り,16 並列で予測値が12.96,実測値が14.45 という,高い速度向上率を得た.

A Parallel Computing Method for Plasma Particle Simulaton Code

KEN T. MURATA,^{†1} KOJI UEOKA,^{†1} SEIJI TAKAHASHI,^{†2} MASAKI OKADA,^{†3} HIROKO O. UEDA,^{†4} YOSHIHARU OMURA^{†5} and HIROSHI MATSUMOTO^{†5}

In this paper, we discuss a parallelization method for plasma electromagnetic particle simulation codes. Plasma particle codes are composed of particle subroutines, electromagnetic field subroutines, and fluid subroutines. The present method is based on combination between data division method for particles and area division method for fields and fluid. The parallelization number is independently set in each subroutine so that the code achieves best computing performance. With estimation of MPI communication and caluculation duration time, we establish a formula to evaluate the speed-up. We applied this method to a plasma particle code: a hybrid code. High parallelization performance, the speed-up is as high as 13.59 as a predicted value and 14.45 as an evaluated value in 16 PE system, is achieved.

1. はじめに

現在,高速演算や大容量メモリを必要とするさま ざまな分野で,並列計算機の実用的利用が始まって いる^{1),2)}.時空間での物理現象を調べる計算機シミュ

†1 愛媛大学工学部

- Faculty of Engineering, Ehime University †2 NTT 先端技術総合研究所
- NTT Science and Core Technology Laboratory Group †3 国立極地研究所情報科学センター

Information Science Center, National Institute of Polar Region

- †4 宇宙開発事業団技術研究本部システム解析ソフトウェア研究開 発センター
- NASDA System Analysis and Software Laboratory †5 京都大学宙空電波科学研究センター

Radio Science Center for Space and Atmosphere, Kyoto University レーションは,並列計算が有効な分野の1つである. 物理化学の計算機シミュレーションのうち,さまざま な媒質の振舞いを調べる手法としては,媒質の運動を つかさどる微積分方程式を数値的に解く,流体シミュ レーションや粒子シミュレーションが有効である.流 体シミュレーションは,媒質を流体としてとらえる. 粒子シミュレーションは,個々の粒子に働く力を求め, 粒子の運動を数値的に解く.これにより,粒子の軌道 を求め,媒質の運動論的現象を解析する.

流体シミュレーションでは,媒質のすべての物理量 は格子点上で定義される.したがって,空間を PE 個 数で均等に分割し,各 PE が担当する領域のみを計算 する,均等領域分割法を用いた並列化が有効である. この手法は,気体や液体の流れのシミュレーションや, 熱伝導のシミュレーションなどで,広く用いられてき た.プラズマ流体シミュレーションにおいても,均等



図1 プラズマ粒子コードの PIC 法の概要: (a) 粒子は任意の位置, 電磁場と電流は格子点上で定義される.(b) 粒子位置の電磁 場は,近傍格子点から求められる.(c) 粒子量は,格子点上に 足しこまれる

Fig. 1 A schematic picture of PIC (Particle In Cell) method. (a) Particles located at any position in the region. (b) Electromagnetic fields at a particle. (c) Field and current values defined on grid points.

領域分割法は有効である.一方,プラズマ電磁粒子シ ミュレーションは,流体計算と比較して,一般に計算 規模が大きい.そのため,コードの並列化による高速 計算が,特に必要である.

これまで,効率的に粒子軌道を計算するための並列 化手法が,さまざまな分野の粒子シミュレーションに おいて提案されてきた.これらの手法は,粒子分割 法^{3),4)}と領域分割法^{5)~9)}に大別される.本研究では, プラズマ電磁粒子コードの並列化手法として,粒子分 割法と領域分割法を組み合わせた,ハイブリッド分割 法について考える.ハイブリッド分割法による計算時 間を定式化し,速度向上率の予想値と並列計算機によ る実測値を比較する.さらに,最高の速度向上率を達 成するための方法について調べる.

2. ハイブリッド分割法の提案

2.1 プラズマ電磁粒子シミュレーションコード

一般に,プラズマ電磁粒子コードは,粒子計算と流体計算,および電磁場の計算より成る.粒子計算お よび流体計算は,各媒質の運動(量)方程式や連続の 式,エネルギーの式などを解く.一方,電磁場の計算 は Maxwell 方程式を解く.

図1(a) に示すように,プラズマ電磁粒子コードで は,粒子は全計算領域を自由に運動できる.一方,電 磁場および流体量は,格子点上で定義される¹⁰⁾.

プラズマ粒子シミュレーションでは,空間を離散的 な格子に分割する.図1(b)のように,格子内の粒子 は,近傍の格子点上で定義された電磁気力のみを受け, 粒子間力は考えない.一方,電荷密度や電流密度は, 図1(c)に示すように,個々の粒子の電荷や速度を格 子点上で積分して求められる.粒子より求められた電

これは,プラズマ粒子を超粒子として考えるためである $^{11)}$.

荷密度や電流密度により,Maxwell方程式を解き,電 磁場を時間方向に解き進める.

2.2 電磁粒子コードの並列化の目的

プラズマ電磁粒子シミュレーションコードの基礎方 程式は,Vlasov方程式

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \boldsymbol{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{r}} + \boldsymbol{a} \cdot \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{v}} = 0 \tag{1}$$

の,0次,1次,2次のモーメントをとることにより得られる . なお,fは速度分布関数で,時刻t,位置r,および速度vの関数である.aは,加速度dv/dtである.

プラズマ電磁粒子シミュレーションでは,速度分布 関数が,位置空間および速度空間において,十分に滑 らかでなくてはならない.図2に,(a)64個,(b)160 個,(c)320個,(d)640個,(e)1,000個の粒子が作 る速度分布関数を示す.図より,滑らかな速度分布の ためには,格子点あたり粒子数が640以上であること が望ましい.

このような大規模粒子シミュレーションのためには, 一般に,数GB以上の主記憶容量を必要とする.大規 模主記憶容量は,単一ノードから構成される計算機で は,実現が容易ではない.近年,発達してきた並列計 算機を用いることにより,このような大規模計算が可 能となる.

2.3 ハイブリッド分割法の概要

過去,プラズマ電磁粒子シミュレーションでは,負 荷分散のための,動的領域分割法についての研究¹²⁾ や,粒子分割法^{4),5)}の研究が進んでいる.動的領域分 割法では,図3(a)に示すように,領域に含まれる粒 子数が均等になるよう,領域を動的に分割する.その ため,電磁場および流体の計算では,負荷のばらつき が生じる.

ハイブリッド分割法では,図3(b)に示すように,粒 子計算を均等データ分割し,電磁場および流体計算を 均等領域分割する.そのため,ほぼ完全な負荷分散を 実現することができる.ハイブリッド分割法では,粒 子計算サブルーチンと電磁場および流体計算サブルー チンで処理が異なる.粒子計算については2.4節で, 電磁場および流体計算については2.5節で説明する.

2.4 粒子計算部の並列化

一般に,プラズマ電磁粒子コードでは,全粒子数は 全格子点数の数十から数百倍である.したがって,粒 子計算が全体に占める割合は,電磁場計算や流体計算 と比較して大きい.粒子計算を効率的に並列化するこ



(d) 640, and (e) 1,000 particles. Thermal velocity is 1.0.

とが,全計算効率向上には重要である.

プラズマ電磁粒子コードの粒子計算は,粒子の位置 および速度を時間的に進める運動計算部と,粒子の位 置と速度を各格子点上に足し込み,モーメント量(運 動量と電荷密度)を求めるモーメント計算部から成る.

運動計算部の手法としては,Bunemann-Boris法¹³⁾ が最もよく使用される.Bunemann-Boris法では,粒 子の位置と速度を時間的に進めるために,図1(b)に 示すように,粒子位置における電磁場の値を,近傍格 子点上から内挿する.プラズマ電磁シミュレーション コードでは,すべての粒子は,シミュレーション空間 全体に移動することが可能である.そのため,並列計 算機においては,各PEは,全空間の電磁場のデータ を有する必要がある.ただし,運動計算部でPE間の 通信が必要ない.そのため,計算に要する時間は,並 列化数が増えるごとに,反比例に短縮される.

一方,各粒子の持つ速度や電荷は,モーメント計算 部において,図1(c)に示すように,モーメント量(密 度や運動量)として,粒子近傍の格子点に足し込まれ る.各PEのモーメント量を合計することにより,全 粒子によるモーメント量を得る.全PEのモーメント 値を合計する計算には,PE間通信が必要となる.

2.5 電磁場および流体計算部の並列化

電磁場および流体計算に必要な計算量は,プラズマ 電磁粒子コード全体の計算量の数%から数十%程度 である.しかし,アムダールの法則によると,少量の 逐次処理も,全体の並列処理の効率を妨げる¹⁴⁾.その ため,八イブリッド分割法では,電磁場や流体の計算

(a) Dynamic Region Division Method

(b) Hybrid Division Method

000	°°°°	ွိဳ	• •	PE0
• • • •	0000	ွိစိုလိုစီစိ	0 ° 0	●■ PE1
° o o	000	ೲಁಁಁಁಁಁ	ຸັ	
° ° °			ွိိ	0
000		ູ້ຈິ	000 000	PE3

図 3 (a) 動的領域分割法と (b) ハイブリッド 分割法の模式図 Fig. 3 Schematic picture of (a) Dynamic region division method and (b) Hybrid division method.

に関しても、より高い効率を得るための並列化を行う. 電磁場および流体計算の並列化には,計算する領域 を実空間上で均等に分割し,各領域の計算を各PEに 割り当てる均等領域分割法を採用する.ただし,電磁 場計算と流体計算では,PE間のデータ通信は,異な る通信となる.

各 PE での粒子計算には, 全空間の電磁場値が必要 である.すなわち,電磁場計算では, 各 PE は担当領 域の計算後,担当領域のデータをすべての PE 間で交 換する.一方,流体量は粒子計算に不要であるので, 分割したまま計算を進めることができる.したがって, 流体計算では,担当計算領域の境界部(のりしろ部) のデータのみ,交換すればよい.

2.6 ハイブリッド分割法の手順

プラズマ電磁粒子コードでは,基礎方程式は共通で あっても,方程式の差分化法やアルゴリズム,また, 各サブルーチンの計算手順などは,コードによって 異なる.したがって,八イブリッド分割法の実装は各 コードによって異なり,一般化は難しい.一般的には, 以下のような手順で,各計算部のサブルーチンを実装 する.

- (1) タイムチャートを作成し,各サブルーチンの計 算順序を決める.
- (2) 電磁場計算サブルーチンおよび流体計算サブ ルーチンを,領域分割法により実装する.粒子 計算サブルーチンを,粒子分割法により実装 する.
- (3) 各サブルーチン間の関係を調べ、それに応じた
 通信関数をサブルーチンに実装する.



Fig. 4 Construction of an EM plasma particle simulation code (a plasma hybrid code): Relationship between EM field, particle and fluid subroutines.

- (4) 各サブルーチンの計算時間と通信時間を,測定 または予測より求める.
- (5) 各サブルーチンの並列化数を決定する.

ハイブリッド分割法の,プラズマ電磁粒子コードへ の応用例を,3章で議論する.

3. ハイブリッド分割法のプラズマ電磁粒子 コードへの適用

3.1 プラズマ粒子流体混成コードについて

前章のハイブリッド分割法を,既存のプラズマ電磁 粒子シミュレーションコードに適用する.本稿では, プラズマ電磁粒子シミュレーションコードの1つであ る,プラズマ粒子流体混成コードを用いる(図4). プラズマ粒子流体混成コードは,電荷の準中性条件 を仮定し,イオンを超粒子¹⁰⁾,電子を無質量の流体と して扱うもので,低周波のイオン粒子運動の解析に適 したコードである.図1(a)に示すように,イオン粒 子はシミュレーション空間内にランダムに配置され,

電磁場および流体量は,格子点上で定義される.

プラズマ粒子流体混成コードで用いられる基本方程 式は,以下のとおりである.

• s種のイオンの運動方程式(超粒子として扱う) $m \frac{dv}{dv} = q (E + v \times B)$ (2)

$$n_s \frac{d\boldsymbol{v}}{dt} = q_s (\boldsymbol{E} + \boldsymbol{v} \times \boldsymbol{B}) \tag{2}$$

$$\frac{d\boldsymbol{r}}{dt} = \boldsymbol{v} \tag{3}$$

電荷の準中性条件式

$$-en_e + \sum_s q_s n_s = 0 \tag{4}$$

プラズマ電磁ハイブリッドコードとも呼ばれる¹¹⁾.本稿では, 提案するハイブリッド分割法との混乱を避けるため,プラズマ 粒子流体混成コードと記述する.



- 図 5 プラズマ粒子流体混成コードのタイムチャート(変数は 3.1 節 に準じる). ○ は初期値, ● は最終値, □ は中間値, △ は予 測値である
- Fig. 5 The timechart of the present plasma hybrid code. The parameters are given in Section 3.1: o: initial value, •: destination value, □: intermediate value and △: predicted value.
 - 電子の運動方程式(無質量の流体として扱う)

$$n_e m_e \frac{d\boldsymbol{u}_e}{dt} = 0 = -en_e(\boldsymbol{E} + \boldsymbol{u}_e \times \boldsymbol{B}) + \eta \boldsymbol{J} \quad (5)$$

● 電子のエネルギー式

$$\frac{\partial}{\partial t} + \boldsymbol{u}_e \cdot \boldsymbol{\nabla}) P_e = -\gamma_e P_e \boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{u}_e + \eta J^2(6)$$

マックスウェル方程式(ダーウィン近似)

$$\frac{\partial \boldsymbol{B}}{\partial t} = -\boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{E} \tag{7}$$

$$\boldsymbol{J} = \frac{1}{\mu_0} \boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{B} \tag{8}$$

電流密度の定義式

$$\boldsymbol{J} = -en_e \boldsymbol{u}_e + \sum_s q_s n_s \boldsymbol{u}_s \tag{9}$$

E, B, J, P_e は, それぞれ, 電場, 磁場, 電流密度, 電子圧力を表す.また, m_s , q_s , n_s , v, r は第s種イオンの質量,電荷量,数密度,速度,位置となる.さらに, m_e , e, n_e , u_e は, それぞれ,電子の質量,電荷量,数密度,流速である.比熱比 γ_e および電気抵抗 η は,定数で与えられる.

プラズマ粒子流体混成コードでは、これらの基本式 を差分化する.式(2)~(9)はサブルーチン化される が、サブルーチン順序はコードに依存する.本研究で 用いる粒子流体混成コードのタイムチャートを、図5 に示す.2.6節の手順(1)タイムチャートの作成に対 応する.図中の各サブルーチンの並列化については、 3.2 節において議論する.

3.2 ハイブリッド分割法による計算全体の流れ

本研究で用いたプラズマ粒子流体混成コードの,並 列化の流れについて説明する.本研究では,PE間の データ通信に,MPI-2(Message-Passing Interface) 関数を用いる.MPIは,現在,多くの並列計算機で 標準化されている,代表的な通信ライブラリである.

プラズマ粒子流体混成コードの並列化の結果を,図6 に示す.図は,4PEで並列化を行った例である.2.6節 の手順(2)領域分割法と粒子分割法の適用,および, 手順(3)各サブルーチンの MPI 通信関数の決定が, これにあたる.

図 6 の (1), (5), (9), (14), (15) は, 電磁場計算 である.(2), (6), (7)(8), (10), (13) は電流および 電子流体計算, (3)(4), (11)(12) が粒子計算を表して いる.以上のステップ番号は,図5のステップ番号と 一致している.

(1) で, 各 PE は, 担当する領域の磁場計算を行う. 粒子計算のため,磁場の全データをすべての PE が保 持している必要がある . そのため , MPLBCAST を用 いてデータ通信を行う.次に (2)で,各PEが担当す る領域の電流の計算を行う.電流の計算は磁場のデー タを必要とする.(3)(4)では,粒子の位置,速度を時 間的に進める.次に(5),(6)で,再度,磁場および 電流値を求める.(7)では,各PEが担当する粒子の モーメント量を求める.MPLALLREDUCE を用い て,全領域のモーメント量の和をとる.(8)で,各PE は,担当する領域の電子流体計算を行う.(9)では,各 PE が担当する領域の電場の計算を行う.電場のデー タは磁場のデータと同様に,粒子計算を行う際に使用 される.そのため,電場のデータを MPI_BCAST を 用いて, すべての PE にコピーする. (10) 以降は, (1) ~(9)と同様である.

4. 並列化による計算時間の評価式の導出

4.1 処理時間測定環境

本節では,2.6 節において示した並列化手順の最後, すなわち,手順(4)各サブルーチンの計算および通 信時間の評価,および,手順(5)各サブルーチンの並 列化数決定について述べる.後に示すように,八イブ リッド分割法では,すべてのサブルーチンを,最大の PE数で並列化しないほうが速度向上率が良い場合が ある.したがって,各サブルーチンの並列化数を決定 するための,速度向上率の評価式が必要となる.本稿 では,例として,3.1節のプラズマ粒子流体混成コー ドにおける定式化を行う.



図 6 プラズマ粒子流体混成コードの並列化処理の流れ(4PEの場合) Fig. 6 Process of parallelization of a hybrid code (4PE).

本研究でハイブリッド分割法評価のために用いた 並列計算機は,富士通社の並列計算機AP3000(以下 AP3000)である.用いたコンパイラはmpifrtで,オ プティマイズ等は行っていない.AP3000は,1つの ノードが2つのプロセッサから構成される共有分散メ モリ型の並列計算機である.本研究で用いたAP3000 は,それぞれのノードに640 Mbyteのメモリが備わっ ている.本研究では,実行時のオプション設定により, 16PEの分散メモリ型並列計算機として設定し,測定 を行った.実行コマンドは, mpiexec である.

本稿で用いる MPI 通信の評価式は, ベンチマークプ ログラムにより確認する.ベンチマークプログラムと して, Pallas 社の b_eff benchmark (version 3.3)¹⁹⁾ を用いる.b_effでは, 1 byte から 4 Mbyte までのデー 夕長の,通信速度特性を評価することができる.

4.2 全処理時間の定式化

ハイブリッド分割法における各サブルーチンの並列 化数を n_i , サブルーチンの全処理時間を $T_i(n_i)$ とす る.ここで,iは,サブルーチンを識別する引数であ る.電場計算,磁場計算,粒子計算,電子流体計算, および電流計算の各サブルーチンを,それぞれ E,B, P,e,および J と表す.最大並列化数 n の場合の,計 算全処理時間 T(n)は,次式で表される.

$$T(n) = \sum_{i}^{E,B,P,e,J} T_i(n_i)$$
(10)

また,速度向上率 S(n) は

$$S(n) = \sum_{i}^{E,B,P,e,J} T_{i}(1) / \sum_{i}^{E,B,P,e,J} T_{i}(n_{i}) \quad (11)$$

となる.

サブルーチン i の全処理時間は,実計算時間 $T_i^{cal}(n_i)$ と, PE 間でのデータ通信時間 $T_i^{com}(n_i)$,の和で与えられる.

$$T_i(n_i) = T_i^{cal}(n_i) + T_i^{com}(n_i)$$

$$(12)$$

本稿では,各サブルーチンの逐次計算時間,および 2 並列の場合の MPI 通信時間を,それぞれ既知とする.すなわち,各サブルーチンiの $T^{cal}(1)$, $T^{SR}(2)$, $T^{BC}(2)$, $T^{AR}(2)$,を既知として, n_i 並列における全処理時間の評価を行う.

4.3 実計算時間の評価式

プラズマ電磁粒子シミュレーションでは,各サブルー チン内での実計算のほとんどがループ処理になってお り,逐次計算部分はわずかである.したがって, n_i 並 列のサブルーチン i の実計算時間 $T_i^{cal}(n_i)$ は,

$$T_{i}^{cal}(n_{i}) = \frac{T_{i}^{cal}(1)}{n_{i}} \quad (n_{i} \ge 1)$$
 (13)

となる.

4.4 MPI 通信時間の定式化

MPL_SENRECV の内部通信ロジック¹⁾を,図7(a) に示す.通信に要する時間 T^{SR}(n)は,次式で与えられる.

$$\mathbf{T}^{\mathrm{SR}}(\mathbf{n}) = \mathbf{T}^{\mathrm{SR}}(2) \quad (n \ge 2) \tag{14}$$

MPLBCAST の内部通信ロジック¹⁾を,図7(b)に 示す.図より,n並列(ただしnは2のべき乗)の場 合,log₂n回の通信が必要となることが分かる.一方, 一回の通信量は,2並列の場合と比較して,2/n倍と なり,全通信時間はn/2倍となる.以上より,通信に 要する時間 T^{BC}(n)は,次式により与えられる.

$$T^{BC}(n) = T^{BC}(2) \cdot \log_2(n) \quad (n \ge 2)$$
 (15)

MPI_ALLREDUCE 通信の内部通信ロジック¹⁾を, 図 7 (c) に示す.通信に要する時間 T^{AR}(n) は,次式 により与えられると考えられる.



- 図7 MPI 関数の内部通信ロジック(4並列および8並列の場合) (a) MPI_SENDRECV,(b) MPI_BCAST, (c) MPI_ALLREDUCE
- Fig. 7 Internal logics for MPI functions (4 and 8 parallelization): (a) MPI_SENDRECV, (b) MPI_BCAST and (c) MPI_ALLREDUCE.

$$\mathbf{T}^{\mathrm{AR}}(\mathbf{n}) = \mathbf{T}^{\mathrm{AR}}(2) \cdot \log_2 \mathbf{n} \quad (n \ge 2) \tag{16}$$

4.5 速度向上率の評価式

本節では,4.3 節と4.4 節の結果を用いて,プ ラズマ粒子流体混成コードの速度向上率の定式化 を行う.図6より,粒子計算における通信には, MPLALLREDUCEを用いる.式(12),式(16)よ リ,粒子の全計算時間は,

$$T_{\rm P}(n_{\rm P}) = \frac{T_{\rm P}^{\rm cal}(1)}{n_{\rm P}} + T_{\rm P}^{\rm com}(2) \cdot \log_2 n_{\rm P} \qquad (17)$$

となる.

図 6 より, 電場計算サブルーチンは, MPLBCAST を用いる.電場全処理時間は,式(12),式(15)より,

$$T_{\rm E}(n_{\rm E}) = \frac{T_{\rm E}^{\rm cal}(1)}{n_{\rm E}} + T_{\rm E}^{\rm com}(2) \cdot \log_2 n_{\rm E} \qquad (18)$$

となる.磁場についても同様であるので,

$$T_{\rm B}(n_{\rm B}) = \frac{T_{\rm B}^{\rm car}(1)}{n_{\rm B}} + T_{\rm B}^{\rm com}(2) \cdot \log_2 n_{\rm B}$$
(19)

である.

図6より,電子流体の MPI通信は MPI_SENDRECV を用いる.式(12),式(14)より,電子流体全処理時 間は,

$$T_{e}(n_{e}) = \frac{T_{e}^{cal}(1)}{n_{e}} + T_{e}^{com}(2)$$
(20)

となる.

電流計算は, MPI 通信が不要である.したがって, 電流全処理時間は,

$$T_{J}^{cal}(n_{J}) = \frac{T_{J}^{cal}(1)}{n_{J}}$$
(21)



Fig. 8 MPI benchmark test estimated by b_eff (ver. 3.3) ¹⁹): for (a) MPI_SENDRECV, (b) MPI_BCAST and (c) MPI_ALLREDUCE.

である.

以上より,式(17),式(18),式(19),式(20),式 (21)を用いると,粒子流体混成コードの全処理時間 T(n)を,式(10)から求めることができる.

4.6 MPI 関数評価式の検証

図 8 (a) に, b_eff による MPI_SENDRECV を用い たデータ通信速度のベンチマーク測定結果を示す.そ れぞれ,2,4,8,16 並列におけるデータ通信速度特性 を表している.通信データ長は,1 byte から 4 Mbyte である.データ長が約1 Mbyte 以上において,ピーク バンド幅を達成している.

図9(a)に,図8(a)のベンチマークの結果と式(14) の比較を示す.図は,並列化数ごとの通信時間を示 す.データ通信時間は,PE数の増加にともない,上 昇する傾向がある.これは,MPI_SENDRECV関数 の開始および終了処理時間が,実通信時間と比較して 無視できず,かつ,PE数増加にともない増大するた めであると考えられる.しかし,図9(a)で示される MPI_SENDRECVの通信時間は,後述の図8(b)や 図8(c)の通信関数と比べ,十分に短い.したがって, 本稿では,式(14)を仮定する.すなわち,2PEでの MPLSENDRECVの通信時間をあらかじめ測定する ことにより,任意のPE数での通信時間が予測できる.

図 8 (b) に, b_eff による通信速度の測定結果を示 す.それぞれ,2,4,8,16 並列における,データ通 信速度特性を表している.通信データ長は1 byte か ら 4 Mbyte である.ただし,MPLBCAST では,並 列化数によってデータ長が異なるため,図 8 (b)の横 軸は,2 並列時のデータ長で示す.通信データ長が約 500 Kbyte 以上で,ピークバンド幅を達成している.

図9(b)に,図8(b)のベンチマーク結果と,式(15) との比較を示す.並列化数やデータ長にかかわらず, ベンチマーク測定結果と式(15)は,よい一致を示す ことが分かる.すなわち,2PEでのMPLBCASTの 通信時間をあらかじめ測定することにより,任意の PE 数での通信時間が予測できる.ただし,通信量が 128 Kbyte以上では,ベンチマーク値は,式(15)を わずかに上回る傾向がある.

図 8 (c) に , b_eff による通信速度の測定結果を示す . それぞれ , 2 , 4 , 8 , 16 並列における , データ通信速



- 図9 MPI 関数のペンチマーク実測値と理論式(14),(15),(16)
 の比較.点線が理論値を表す.(a) MPI_SENDRECV,(b)
 MPI_BCAST,(c) MPI_ALLREDUCE の測定時間
- Fig. 9 Computational and theoretical period of MPI communications. The dashed lines are theoretical curves: (a) MPI_SENDRECV, (b) MPI_BCAST and (c) MPI_ALLREDUCE.

度特性を表している.通信データ長は,4 byteから 4 Mbyteである.ばらつきはあるが,約100 Kbyte以 上で,ピークバンド幅を達成している.

図 9 (c) に , 図 8 (c) のベンチマーク結果と式 (16) との比較を示す . 図より , 64 Kbyte 以上のデータ長で は , ベンチマーク測定時間が , 式 (16) とよい一致を 示すことが分かる . すなわち , MPLBCAST と同様 , 2 並列時での MPLALLREDUCE の通信時間をあら

- 表 1 プラズマ粒子流体混成コードの各サブルーチンの逐次実計算 時間と 2 並列時の MPI 通信時間(AP3000 による). 粒子数 は, (a) 640/grid, (b) 320/grid, (c) 160/grid
- Table 1 Calculation and MPI communication times in 2 PE for each subroutine: Particle numbers are (a) 640/grid, (b) 320/grid, and (c) 160/grid, repsectively.

e		
	Т	Time (sec)
E	$T_{\rm E}^{\rm cal}(1)$	0.13
_	$T_{\rm E}^{\rm com}(2)$	0.08
В	$T_{\rm B}^{\rm cal}(1)$	0.17
	$T_B^{com}(2)$	0.22
$P(\mathbf{a})$	$T_{P}^{cal}(1)$	137.86
. ,	$T_{\rm P}^{\rm com}(2)$	0.42
$P(\mathbf{b})$	$T_{\rm P}^{\rm cal}(1)$	68.90
	$T_{\rm P}^{\rm com}(2)$	0.19
P(c)	$T_{\rm P}^{\rm cal}(1)$	34.53
	$T_{\rm P}^{\rm com}(2)$	0.16
e	$T_{e}^{cal}(1)$	0.43
2	$T_e^{com}(2)$	0.01
J	$T_{J}^{cal}(1)$	0.11
	$T_{I}^{com}(2)$	0.00

かじめ測定することにより,任意の並列化数での通信 時間が予測できる.

5. プラズマ粒子流体混成コードの速度向上率 の評価

5.1 計算実測環境

本節では、プラズマ粒子コードの速度向上率を実測 し、4章で求めた評価式と比較する、実験は、4章と同 様、プラズマ粒子流体混成コードを用いる、特に、与 えられた格子点数や粒子数などのシミュレーションパ ラメータに対して、最高の速度向上率を得ることを目 標とする、用いるシミュレーションパラメータは、格 子点数128×128の2次元である、粒子数は、2.2節 の図2を考慮して、格子点あたり160、320、640個 とする、測定実験には、前節同様、AP3000を用いる、 なお、実測値は、すべて8回の計算の合計値である、

5.2 速度向上率の予測

本節では,4章で求めた式(10)および式(11)より, n 並列時の,速度向上率の予測値を求める.4.4 節に よると,式(10)の各項を求めるためには,各サブルー チンの逐次計算の実計算時間と,2並列時の通信時間 の実測値が必要である.これらの測定結果を,表1に 示す.格子点あたりの粒子数は(a) 640 個,(b) 320 個,(c) 160 個で,格子点数は 128 × 128 である.

表1の基準値を用いて,速度向上率の予測値を,式 (10),式(11)を用いて求めることができる.5.2節で は,すべてのサブルーチンを,同じ並列化数で並列化



Number of PE

- 図10 プラズマ粒子流体混成コードの速度向上率の予測値と実 測値(AP3000 による).粒子数は,(a) 640/grid,(b) 320/grid,(c) 160/grid,(d) 40/grid,(e) 640/grid. 格子点数は,(a),(b),(c),(e) が 128 × 128,(d) が 521 × 512.電磁場サブルーチンの並列化数は,(a),(b), (c),(d) が最大並列化数,(e) は逐次計算.(a)',(b)',(c)', (d)',(e)' は予測値,(a),(b),(c),(d),(e) は実測値
- Fig. 10 Predicted and evaluated speed-up of present hybrid code via AP3000: Particle number is (a) 640/grid, (b) 320/grid, (c) 160/grid, (d) 40/grid and (e) 640/grid. Grid number is 128 × 128 in (a), (b), (c) and (e), and 512 × 512 in (d). Parallelization number of EM Field Routine corresponds to maximum PE number in (a), (b), (c) and (d), and no parallelization in (e). (a), (b), (c), (d) and (e) are evaluated values respectively, and those with dash are predicted values.

した場合について考える.図10に,2,4,8,16並 列時の,(a),(b),(c)の速度向上率の予測値を,そ れぞれ(a)',(b)',(c)'として示す.なお,16並列で は,予測値は,(a)'13.04,(b)'11.75,(c)'10.54と なった.

5.3 速度向上率の実測評価

本節では,プラズマ粒子流体混成コードを用いた, 16 並列までの速度向上率の実測を行う.5.3.1 項では, すべてのサブルーチンを,最大並列化数で並列化した 場合の評価を行う.5.3.2 項では,各サブルーチンご との処理時間を調べ,最も高い速度向上率を得るため に,サブルーチンごとに並列化数を設定する.

5.3.1 すべてのサブルーチンで並列化数が等しい 場合

まず, すべてのサブルーチンを, 等しい並列化数 n (=最大並列化数)で並列化する場合について考える. 5.2 節 (a),(b),(c)の3つのパラメータについて,16 並列までの速度向上率を実測した結果を,図10(a), (b),(c)に示す.16並列では,(a)12.96,(b)11.09, (c)8.84であった.(a)は予測値とよい一致を示して いるが,(b)と(c)は,予測値よりも低くなる.この 理由については,5.4 節において議論する.

図10より,速度向上率は,格子点数が等しい場合 には,粒子数が多いほど向上することが読み取れる. これは,粒子計算サブルーチンと比較して,電磁場計 算サブルーチンの並列化効率が悪いからである.図11 に,5.2節(a)の,サブルーチンごとの実計算時間と 通信時間を示す.(c)粒子計算,(d)電子流体計算,お よび(e)電流計算サブルーチンは,通信時間に比して 実計算時間が大きいため,スケーラビリティが高い. 一方,(a)と(b)の電磁場サブルーチンは計算量が小 さく,また,スケーラビリティの低いMPLBCAST を通信関数として用いているため,並列化数が大きい ほど,全処理時間が増加する.(c)の全処理時間が短 くなると,相対的に,(a)や(b)の効果が大きくなる.

速度向上率の低下は,粒子数が等しい場合には,格 子点数が多いほど,顕著になる.比較のため,粒子数が 5.2節(a)と等しく,格子点数が512×512のパラメー タによる速度向上率を調べた.その結果を,図10(d) に示す.同図(a)と比較して,速度向上率の低下が顕 著に見られる.

5.3.2 サブルーチンごとに並列化数を設定する場合 図 11 では,電磁場サブルーチンにおいて,並列化 数が大きいほど,全処理時間が増加する傾向が見られ た.この結果は,サブルーチンごとに並列化数を変更 することにより,さらに速度向上率を向上できること を示唆している.本項では,サブルーチンごとの並列 化数を個別に設定することにより,図 10 (a)の速度向 上率の向上を試みる.

図 11 より, 16PE システムで全処理時間が最小と なるのは,粒子,電子流体,および電流サブルーチン が,それぞれ,16,16,15 並列の場合である.一方, 電磁場サブルーチンでは,PE 数にかかわらず,逐次 計算が最も全処理時間が小さN.このように,並列化 数をサブルーチンごとに個別に設定して,5.2 節(a) のパラメータによって求めた,16 並列までの速度向上 率の実測値と予測値を,図10(e)および(e)'に示す. 16 並列時の速度向上率は,予測値(e)'が13.59,実測 値(e)が14.45 となった.したがって,同図(a)の実 測値12.96 と比べ,速度向上率は約12%改善された. なお,実測値(e)が予測値(e)'よりも高い速度向上率 を示している理由については,5.4 節で議論する.



Fig. 11 Calculation duration and communication duration in hybrid code via AP3000: (a) Electric Field Solver Subroutine, (b) Magnetic Field Solver Subroutine, (c) Particle Solver Subroutine, (d) Electron Fluid Solver Subroutine and (e) Current Solver Subroutine.

図 10 (e) では,電流計算サブルーチンは,15 並列 の場合に処理時間が最小となるが,実測では16 並列 化した.その理由についても,5.4 節で述べる.

5.4 速度向上率測定の考察

本節では, 5.3.1 頃と 5.3.2 頃の, 16 並列時の速度 向上率の,予測値と実測値の差について考察する.

図 10 では、16 並列時の速度向上率は、予測値 (b)'、(c)'よりも実測値(b)、(c)の方が低かった.こ れは、MPLBCASTの影響である.図9(b)によると、 MPLBCASTは、16 並列において、通信時間が理論 値よりも上回っている.すなわち,電場計算サブルー チンと磁場計算サブルーチンの全処理時間が予測値を 上回るため,5.3.1項の差が発生したと考えられる.こ の傾向は,格子点数に対する粒子数が少なくなるほど, 顕著になる.

一方,図10(e)で実測値が予測値を上回る原因は、
MPI_ALLREDUCEである.図12に、5.3.1項の(b)
と(e)の、MPI_ALLREDUCE通信の実測値と予測値
を示す.(b)および(e)が実測値、(b)、および(e)、が、
式(16)による予測値である.(b)と(e)より、デー



図12 5.3.1 項 (b) と 5.3.2 項 (e) の, ALL_REDUCE の通信時 間の実測値と予測値. (b) は 5.3.1 項の (b) の実測値, (b) は (b) の予測値, (e) は 5.3.2 項の (e) の実測値, (e)' は (e) の予測値, (f) は b_eff より求めた予測値

Fig. 12 Evaluated and predicted duration time of ALL_REDUCE in (b) and (e). (b) is evaluated time of (b), (b)' is predicted time of (b), (d) is evaluated time of (e), (d)' is predicted time of (e) and (f) is predicted time via b_eff.

タ通信量が等しい場合には,実測結果も,比較的よ い一致を示す.しかし,n=2における実測値のばら つきが,n=16において,(b)'と(e)'の差異を生じ る.その結果,(e)では,実測値が予測値を上回った. MPI_ALLREDUCEでは,通信の開始・終了処理時 間が無視できない.開始・終了処理時間はランダムに 発生し,n=2のばらつきの原因となる.したがって, MPI_ALLREDUCEを用いる場合にはn=2以外の測 定も行い,評価式(16)のフィッティングを,より正確 に行うことが望ましい.

なお,図9(c)で実測と予測がよい一致を示したの は,b_effが,開始・終了処理時間を除外して測定がで きるためである.比較のため,同じ通信量の場合の,ベ ンチマークプログラムb_effによる予測値を,図12(f) として示す.

次に,5.3.2 項で,電流計算サブルーチンを16並列 化した理由を述べる.ハイブリッド分割法では,最小 の処理時間となる並列化数が,サブルーチンごとにば らつくことがある.図11でも,電子流体計算は16並 列,電流計算は15並列で,全処理時間が最小となっ た.しかし,図6によると,サブルーチンの並列化は 他のサブルーチンとの関係に依存するため,独立に設 定できない.たとえば,電流計算と電子流体計算のサ ブルーチンの並列化数を異なる値で設定すると,両者 の間に新しい通信が発生する.このとき,速度向上率 は,逆に低下することになる.

電磁粒子シミュレーションコードでは,一般に,各 サブルーチンの並列化条件が従属的である.したがっ て,ハイブリッド分割法の最適並列化数決定方法は, コードに依存し,一般化が容易ではない.今後の研究 が必要である.

6. おわりに

これまでの電磁粒子シミュレーションの並列化手法 は,領域分割法と粒子分割法に大別される.本研究で 扱う並列化手法は,この2つの手法を組み合わせた, ハイブリッド分割法である.ハイブリッド分割法は, 粒子計算サブルーチンを粒子分割し,電磁場および流 体計算サブルーチンを領域分割する.サブルーチン間 でデータ交換をしながら,計算を進める.

ハイブリッド分割法では,各サブルーチンの実計算 部の逐次処理時間と,2並列時の通信時間を既知とし て,速度向上率を予測できる.本研究では,速度向上 率評価のための定式化を行った.さらに,ベンチマー クプログラムにより,評価式が有効であることを確か めた.

次に,プラズマ電磁粒子コードの1つである,プラ ズマ粒子流体混成コードに,ハイブリッド分割法を適 用した.MPI関数を用いてプラズマ粒子流体混成コー ドを並列化し,速度向上率を実測した.代表的なパラ メータにより,並列計算機 AP3000 で実測したとこ ろ,16 並列の場合,予測値は13.04,実測値は12.96 であった.

ハイブリッド分割法では,MPI 関数や通信データ量 に応じて,計算サブルーチンごとに,並列化数を個別 に設定できる.一般に,粒子計算のサブルーチンは, 計算時間が通信時間よりも十分に長い.そのため,最 大の PE 数を並列化数とすることで,最高の速度向 上率が得られる.一方,電磁場および流体計算のサブ ルーチンでは,並列化数が PE 数となるとは限らない. たとえば,本研究で16PEを用いた場合に,評価式に より速度向上率を評価したところ,電磁場計算の並列 化数は1,すなわち逐次計算の場合に,速度向上率が 最高となることが分かった.

そこで, ハイブリッド分割法で, サブルーチンごと に並列化数を設定して速度向上率を測定した.電磁場 サブルーチンを逐次計算した場合,16並列では,予測 値が13.59,実測値が14.45の速度向上率を得た.す なわち,約12%の速度向上率の改善がなされた.

ハイブリッド分割法では,粒子計算に必要な電磁場 の情報を,すべての PE が保持していなければなら ないという,主記憶容量上の不利点がある.しかし, 最近のプラズマ粒子シミュレーションでは,格子点数 に対する粒子数が増加する傾向にあり,大きな不利点 となりえない.逆に,すべての配列変数が各 PE に均 等に割り当てられるため,並列計算効率の妨げとなる PE間の同期²⁰⁾を最小限に抑えることができる.また, ハイブリッド分割法は,動的領域分割法と比較して, 粒子データ通信の必要がない.そのため,データ通信 量は,パラメータや問題に依存せず一定となる.ほぼ 完全な負荷分散が実現できることが,ハイブリッド分 割法の利点の1つである.

なお,流体量を持たないプラズマ電磁粒子コード (たとえば KEMPO コード¹¹⁾)でも,電磁場方程式は 領域分割できるため,ハイブリッド分割法は適用可能 である.すなわち,本手法は,ほとんどの標準的なプ ラズマ粒子コードに適用でき,汎用性は高いと言える.

粒子流体混成コードは,すでに,宇宙プラズマ^{15),16)}, 核融合プラズマ^{17),18)}などの,さまざまなプラズマ研 究分野で利用されている.本研究で用いた2次元粒子 流体混成ハイブリッド並列コードは筆者らにより公開 されており,今後も,さまざまなプラズマ研究分野に おいて,利活用されることが期待される.

謝辞 本研究は,科学技術振興事業団計算科学技術 活用型特定研究開発推進事業での成果である.

参考文献

- 1) 天野英晴: 並列コンピュータ, 昭晃堂 (1996).
- 2) 湯浅太一, 安村通晃, 田中登志之: はじめての 並列プログラミング, 共立出版 (1998).
- 3) 松原正純,板倉憲一,朴 泰祐:超並列計算機 CP-PACS における大規模分子動力学法シミュ レーション,情報処理学会論文誌,Vol.40, No.5, pp.2172-2182 (1999).
- 4) Akiyama, Y., Misoo, K., Omura, Y. and Matsumoto, H.: Parallelization of Space Plasma Particle Simulation, *High Performance Computing*, Polychronopoulos, et al. (Eds.), Lecture Notes in Computer Science 1336, pp.281–292, Springer (1997).
- 5) 蔡 東正,安室秀則,李 尭亭,陸 全明,肖 池階:Linux PC クラスタを用いた並列粒子シミュ レーション,情報処理学会論文誌,Vol.42, No.12, pp.124–131 (2001).
- 6)林 亮子,堀口 進:固定分配セルを用いた動的 負荷分散法による並列分子動力学法シミュレーション,情報処理学会論文誌,Vol.40,No.5,pp.2152-2162 (1999).
- Berger, M.J. and Collela, P.: Adaptive Mesh Refinement for Hyperbolic Partial Differential Equations, J. Comput. Phys., Vol.53, pp.484– 512 (1984).
- Berger, M.J. and Collela, P.: Local Adaptive Mesh Refinement for Shock Hydrodynamics, J. Comput. Phys., Vol.82, pp.64–84 (1989).
- 9) 古山彰一,松澤照男:動的負荷分散を用いた適応

格子法の並列計算,情報処理学会論文誌, Vol.38, No.9, pp.1869–1877 (1997).

- 10) 矢部 孝,川田重夫,福田昌宏:シミュレーション物理入門---超粒子モデルの世界,朝倉書店.
- Matsumoto, H. and Omura, Y.: Computer Space Plasma Physics: Simulation Techniques and Software, Terra Scientific Publishing Company, Tokyo (1993).
- 12) Ferrard, R.D., Liewer, P.C. and Decyk, V.K.: Dynamic Load Balancing for a 2D Concurrent Plasma PIC Code, J. Comput. Phys., Vol.109, pp.329–340 (1993).
- Bunemann, O.: Time reversible difference procedures, J. Comput. Phys. (1967).
- 14) Amdahl, G.M.: Validity of the Single-Processor Approach to Archiving Large Scale Computing Capabilities, *Proc. Spring Joint Computer Conference*, Vol.30 (1967).
- 15) Thomas, V.A., Winske, D., Thomsen, M.F. and Onsager, T.G.: Hybrid simulations if a hot flow anomaly, *J. Geophys. Res.*, Vol.96, p.11625 (1991).
- 16) Winske, D. and Leroy, M.M.: Hybrid simulation techniques applied to the Earth's bow shock, *Computer Simulations of Space Plasmas*, Matsumoto, H. and Sato, T. (Eds.), p.255, D. Reidel/Terra Sci., Hingham MA (1984).
- 17) Imamura and Tokuda: A hybrid computing by coupling different architectural machines, a case study for takamak plasma simulation, *Proc. Int. Conf. PDCS99* (1999).
- 18) Tokuda, S., Naitou, H. and Lee, W.W.L.: A Particle-Fluid Hybrid Simulation Model Based on Nonlinear Gyrokinetics, *Journal of Plasma* and Fusion Research, Vol.74, No.1, pp.44–53 (1998).
- 19) Pallas MPI Benchmarks—PMB, Part MPI. http://www.pallas.com
- 20) 岡本一晃,松岡浩司,廣野英雄,横田隆史,佐藤 三久,坂井修一:超並列計算機のための同期処理 機構とその評価,情報処理学会論文誌,Vol.40, No.3, pp.1245-1256 (1999).

(平成 13 年 8 月 19 日受付)
(平成 13 年 10 月 23 日再受付)
(平成 13 年 12 月 11 日再々受付)
(平成 14 年 3 月 25 日採録)



村田 健史(正会員) 平成7年京都大学大学院工学研究 科研究指導認定退学.同年愛媛大学 工学部助手.平成8年愛媛大学工学 部講師.宇宙プラズマ計算機実験,宇 宙電波解析システムおよび無線ネッ

トワークの研究に従事.博士(工学).電子情報通信 学会,応用数理学会,地球電磁気・地球惑星圏学会, アメリカ地球物理学会(AGU)各会員.



上岡 功治(正会員)

平成12年愛媛大学工学部情報工 学科卒業.同年同大学大学院工学研 究科博士前期課程在籍.プラズマ粒 子シミュレーションの並列計算の研 究に従事.



高橋 誠治(正会員) 平成10年愛媛大学大学院工学研 究科博士前期課程修了.NTTサー ビスインテグレーション基盤研究所. セキュリティーシステム開発に従事.



岡田 雅樹(正会員) 平成6年京都大学大学院工学研 究科研究指導認定退学.同年文部省 国立極地研究所助手.宇宙飛翔体電 磁波環境シミュレーションおよび地 球磁気圏物理学の研究に従事.博士

(工学).地球電磁気・地球惑星圏学会,アメリカ地球 物理学会(AGU)各会員.



上田 裕子

平成4年電気通信大学大学院電気 通信学研究科単位取得退学.同年千 葉大学工学部助手.平成13年宇宙 開発事業団技術研究本部副主任研究 員.宇宙プラズマおよび電磁波動計

算機シミュレーションの研究に従事.博士(工学).電 子情報通信学会,地球電磁気・地球惑星圏学会,アメ リカ地球物理学会(AGU)各会員.



大村 善治

昭和 60 年京都大学大学院工学研 究科博士後期課程電気工学第二専攻 研究指導認定退学.同年京都大学工 学部助手.昭和 63 年京都大学超高 層電波研究センター助手.平成元年

京都大学超高層電波研究センター助教授.平成12年 京都大学宙空電波科学研究センター教授.専門は電子 ビーム不安定性と静電孤立波の計算機実験および電波 科学計算機実験システムの開発.アメリカ地球物理学 会(AGU),地球電磁気・地球惑星圏学会各会員.



松本 紘

昭和40年京都大学工学部電子科 卒業.昭和42年同大学大学院工学 研究科修士課程了.昭和52年同大超 高層電波研究センター教授,平成4 ~10年同大超高層電波研究センター

長,平成12年同大宙空電波科学研究センター教授,現 在に至る.文部科学省宇宙科学研究所客員教授併任. 文部科学省核融合科学研究所客員教授併任.独立行政 法人通信総合研究所客員研究官およびアドバイザリー ボード.中国武漢大客座教授.工学博士.地球電磁気・ 地球惑星圏学会評議員.国際電波科学(URSI)会長. JGR アジア・太平洋地域編集長.河上記念財団作工 会賞,昭和50年日本電磁気学会田中館賞,平成5年, 平成10年 NASA Group Achievement Award,平成 11年情報通信月間推進協議会志田林三郎賞,平成12 年アンテナ・伝播国際シンポジウム論文賞受賞,アメ リカ地球物理学会フェロー,IEEEシニア各会員.