2H-09

TSC 法によるバネ質点シミュレーションの並列時間積分の評価

嵯峨山凌† 藤井昭宏† 田中輝雄† 鷲尾巧†† 岩下武史†††

工学院大学† 東京大学†† 北海道大学†††

1 はじめに

時間発展シミュレーションでは，空間方向と時間方向の並列化の二つが考えられる．空間方向の並列化はシミュレーションを行う質点などをプロセスごとに割り振って計算を行う手法である．時間方向の並列化はシミュレーションのタイムステップを各プロセスに割り振る手法である．しかし，空間方向の並列化ではとれる並列度に限界が生じる場合があり，近年，時間方向の並列化手法が活発に研究されている．そのため，本研究では時間方向の並列化の手法の一種である TSC 法（Time Segment Correction Method）[1][2]をバネ質点シミュレーションに適用し，その有効性を検証する．

2 TSC 法

2.1 概要

TSC 法は一定間隔で時間方向の依存関係を切り並列に時間進展を進める処理である smoothing と，全時間ステップに対するヤコビ行列を係数とする線形方程式を粗く解く処理を繰り返す手法である．

2.2 Smoothing 処理

Smoothing は F-smoothing と C-smoothing の二つに分けられる．図 1 に smoothing 処理を図示する．横軸はタイムステップ数になっており，各点 C で時間方向の依存関係を切っている．F-smoothing は各点 C から次の点 C の手前までシミュレーションを解く処理である．その後 C-smoothing により点 C の手前の点 F の解を用いて点 C の解を更新する．これらは依存関係を切っているため並列に処理することができる．

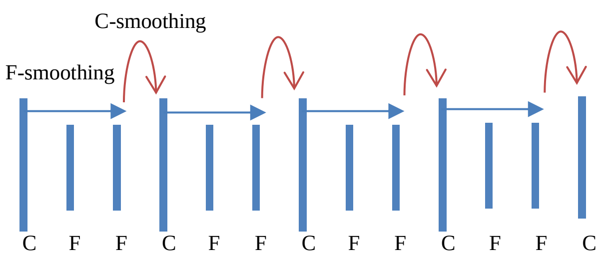

図 1 Smoothing 処理

2.3 線型方程式

時間進展問題は非線形の連立方程式(1)の形で記述できる．変数u_iはiタイムステップ目の変数を表している．$\boldsymbol{g_i}$は各タイムステップ数における定数項を示している．

$$\begin{cases} \boldsymbol{u_0} = \boldsymbol{g_0} \\ \boldsymbol{A(u_1, u_0)} = \boldsymbol{g_1} \\ \boldsymbol{A(u_2, u_1)} = \boldsymbol{g_2} \\ \vdots \\ \boldsymbol{A(u_i, u_{i-1})} = \boldsymbol{g_i} \end{cases} \tag{1}$$

線型問題に帰着させるため，関数 $\boldsymbol{A}$ のヤコビ行列を全タイムステップ数分まとめたものをLとし，残差$\boldsymbol{g_i} - \boldsymbol{A(u_i, u_{i-1})}$を$\boldsymbol{r}$とする．これらを用いて補正解$\Delta\boldsymbol{u}$を求めたものが式(2)である．

$$L\Delta\boldsymbol{u} = \boldsymbol{r} \tag{2}$$

2.4 ヤコビ行列の縮小

TSC 法では逆行列のコストを減らすために式(2)をそのまま解くのではなく，分割幅 W に応じて縮小を行ってから解く．分割幅とは各点 C から次の点 C までのタイムステップ数のことである（図 1）．縮小は補間行列 B を用いて行う．空間の自由度数を Ns，全タイムステップ数を Nt とすると行列 B は、Ns x Nt 行 Ns x Nt / W 列の縦長の行列である．式(3)にヤコビ行列，式(4)に残差ベクトルの縮小方法を示す．この処理により問題サイズを 1/W にすることができる．

$$B^T L B = L_C \tag{3}$$

$$B^T \boldsymbol{r} = L_C \tag{4}$$

縮小後は式(5)で補正解を求め，式(6)のように補間行列 B で粗く解いていた補正解を拡大し解の補正を行う．

$$L_c \Delta\boldsymbol{u}_c = \boldsymbol{r}_c \tag{5}$$

$$\boldsymbol{u} \leftarrow \boldsymbol{u} + B\Delta\boldsymbol{u}_c \tag{6}$$

3 マルチレベル TSC 法

TSC 法は Fine level と coarse level1 の 2 レベルからなっていたが，マルチレベル TSC 法はそれに coarse level2 を追加し，3level にしたものである．ヤコビ行列の縮小は 2 度行われ，さらに計算コストを減らすことができる．図 2 にマルチレベル TSC 法の概要を示す．なお，L_{cc}，$\Delta\boldsymbol{u}_{cc}$，$\boldsymbol{r}_{cc}$は$L_c$，$\Delta\boldsymbol{u}_c$，$\boldsymbol{r}_c$をさらに縮小したものを表している．

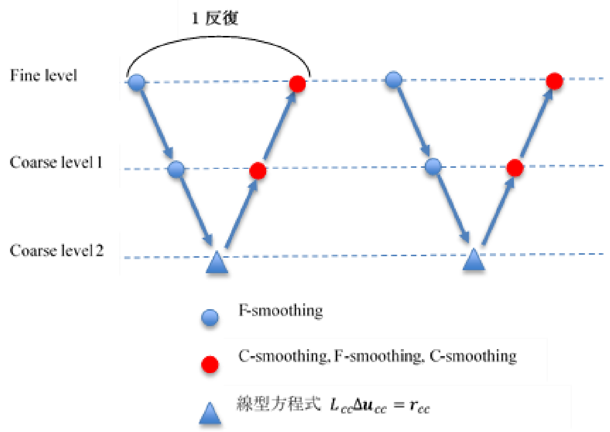

図 2 マルチレベル TSC 法概要

Evaluation of TSC method for mass spring parallel in the time simulation

Ryo sagayama†，Akihiro Fujii†，Teruo Tanaka†，Takumi Washio††，Takeshi Iwashita†††

Kogakuin University†，Tokyo University††，Hokkaido University†††

4　バネ質点シミュレーション

4.1　シミュレーションの概要

本実験では，時間発展シミュレーションの一つとしてバネ質点シミュレーションを選択した．これは，たんぱく質でできた繊維を複数の質点とバネにより再現し，これを粘性のある液体に入れたときに受けるランダムな力とバネ力による時間変化を Overdamped Langevin 方程式によりシミュレーションする．なお，シミュレーションは陽解法で時間発展させる．

MATLAB 上で時間積分の並列化手法の収束に要する反復回数を調べ，並列実行時のモデル実行時間を算出する．2 次元 3 質点の小規模問題と，3 次元 160 質点の実問題で実行を行った．

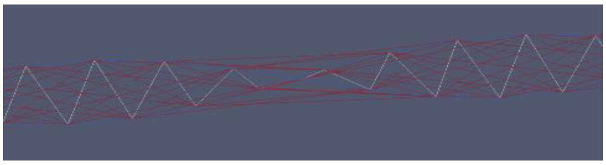

図 3　実問題の３D モデルの一部

4.2　モデル実行時間の算出

逐次との速度比を求めるために，並列化を行った際の実行時間をモデル化した．式(7)に TSC 法，式(8)にマルチレベル TSC 法でのモデル実行時間を示す．逐次で 1 タイムステップ解く時間を 1TM とし，これをタイムステップ数と比較することにより逐次との速度比が求められる．W は Coarse level1 の分割幅，W2 は Coarse level2 の分割幅，N は反復回数を表している．C は線型方程式を解くコストを 1TM を単位として表しており，C 言語による実測値により求めている．小規模問題のとき C=7，実問題のとき C=105 となる．

$$(W*2+TS/W*C)*N\ [TM] \tag{7}$$

$$(W*2+(W2*2+TS/W/W2)*C)*N\ [TM] \tag{8}$$

4.3　結果と考察

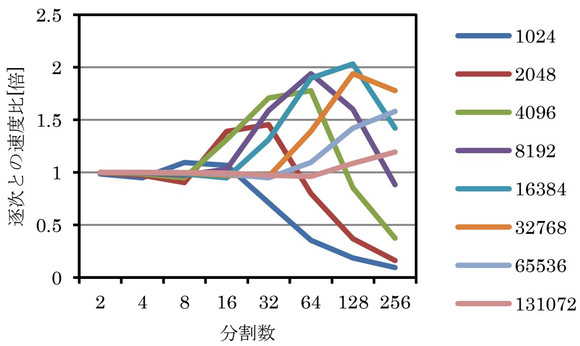

図 4　小規模問題，TSC 法での実行結果

図 4 に小規模問題を TSC 法で実行したときの結果を示す．系列は全タイムステップ数が異なる 8 個の時間発展シミュレーションの結果に対応している．横軸の分割数は全タイムステップをいくつに分けて処理を行うかを示しており，縦軸は 4.2 節で求めたモデル実行時間とタイムステップ数の比になっている．グラフを見ると，タイムステップ数を増やしていくにつれて性能の最大をとる分割数が増えていくことがわかる．このことから，最大で 16384 タイムステップ数のときに分割数 128 でおよそ 2 倍まで性能が向上しているが，分割数をさらに増やして実験を行えば 16384 より大きなタイムステップ数でさらに良い結果が望めることが予測される．

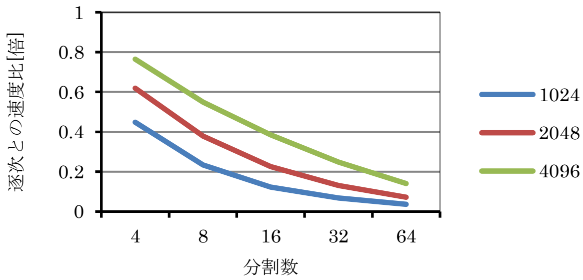

図 5　実問題，マルチレベル TSC 法での実行結果

図 5 に実問題をマルチレベル TSC 法で実行したときの結果を示す．図 4 とは異なり 1 倍を下回る性能となった．しかし，タイムステップ数が増えるにつれて性能は向上しており逆行列の縮小の効果は表れているといえる．このような結果となったのは，線型方程式を解くコスト C が小規模問題より非常に大きくなっているためであると考えられる．

5　おわりに

本研究では時間進展問題の一種であるバネ質点シミュレーションを時間方向の並列化を行うことにより，逐次より良い性能が出ることがわかった．また，TSC 法で並列化による高速化の恩恵を受けるためには，タイムステップ数ごとに最適な分割数を見つける必要があることがわかった．

実問題，マルチレベル TSC 法の場合は線型方程式を解くコストがネックとなり，逐次より良い結果を得ることはできなかった．C を 50 まで下げることができれば 4096 タイムステップ，分割数 4 のとき，速度比は 0.76 倍から 0.87 倍になる．そのため今後はいかに実問題のときの C を減らしていくかが課題となる．

謝辞

本研究は，学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点の支援による(課題番号: jh200041-NAH).

参考文献

[1] Akihiro Fujii，Shigeo Kaneko，Teruo Tanaka，Takeshi Iwashita，Time Segment Correction Method for Parallel Time Integration，Journal of Information Processing，Volume27，pp.822-830 (2019).

[2] 金子 重郎，藤戸 宙希，藤井 昭宏，田中 輝雄，岩下 武 史，非線形熱拡散方程式を対象とした時間方向の並列化手 法における補正手法の比較—MGRIT と TSC—，情報処理学会研究報告，Vol. 2017-HPC-161，No.8，(2017).