

連成・連携計算による総計算時間の評価

九大院シス情、¹ 九大情基セ 押川雄大、¹ 小林泰三、¹ 森江善之、¹ 高見利也、¹ 青柳 睦

「京」コンピュータや TSUBAME 2.0 などのように、計算環境は飛躍的に大規模化し、且つ、GPU などの加速機構がついたヘテロジニアスな環境も注目されてきている。このように大規模化している並列計算環境を効率よく利用する計算方法の一つとして、計算科学で需要が拡大しつつある連成・連携計算が提案されている [1][2]。本講演では、連成・連携計算の総計算時間について議論を行う。計算対象は、金属微粒子の物性研究、即ち典型的な過渡現象であり、分子動力学シミュレーションとその結果のデータ解析までを含む。また、並列計算環境は GPU+CPU を用いた。GPU で生成されるシミュレーション計算結果を CPU が平行に解析することで、総計算時間の削減とその評価を行った。

1 連成・連携計算の概要

連成・連携計算とは、一言で表すならば異なる種類の複数の計算を組み合わせる計算のことである。これまでの連成計算との違いとして、連成計算では数値シミュレーションのみを計算対象としているのに対し、連成・連携計算では可視化やデータ解析などのプレ・ポスト処理からセンサーからのデータ入力とセンサーの制御まで、数値計算

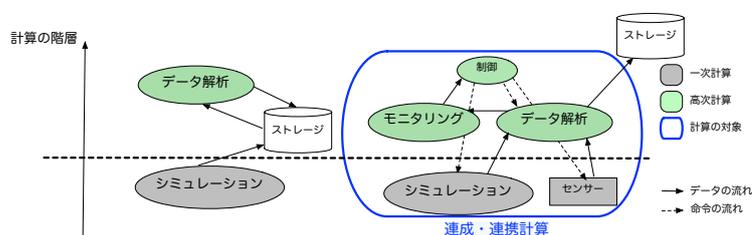


図 1: 連成・連携計算の概念図

を利用する研究ひとセットを丸ごと対象にしている。また計算対象とする過渡現象とは、化学反応のように初状態から終状態へと状態が変化していくもので、計算する際に長時間の時間発展を必要とする。過渡現象の研究では、最初の計算（一次計算）で求めるものは系の時系列データで、物理現象を議論するには次にその時系列データを解析（高次計算）しなければならない。つまり複数段の数値計算が階層的に必要な。連成・連携計算が対象とするのはこのような階層的な数値計算全体である。これまでの連成計算では一次計算の終了後に高次計算でデータの解析を進めていたが、連成・連携計算では一次計算と高次計算を平行に実行する。

2 総計算時間の評価

連成・連携計算により、逐次的に実行していた一次計算と高次計算を並列に実行することで、計算部分に関しての時間削減に加え、一次計算が終了した後の計算結果を外部記憶装置へ書き出す処理と、その後のデータ解析のために一次計算結果を読み込む処理とを省略することができる。

本講演では、実際に少数多体系の過渡現象の計算を例にとり、連成・連携計算の適用前と適用後の総計算時間の比較を行い、その結果を報告する。

Reference:

- [1] 押川雄大、小林泰三、森江善之、高見利也、青柳睦、「連成・連携計算によるデータ量削減の評価」、Hokke19 2011
- [2] 押川雄大、小林泰三、森江善之、高見利也、青柳睦、「ヘテロジニアスな並列計算環境を応用した連成・連携計算の提案」、SWoPP 2011