

平成 30 年 5 月 28 日現在

機関番号：17501

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2015～2017

課題番号：15K04760

研究課題名(和文) 時間方向並列化法に基づくマルチスケールシミュレーションの構築と検証

研究課題名(英文) Construction and Validation of Multi-scale Simulations based on the Parallel-in-Time Method

研究代表者

高見 利也 (Takami, Toshiya)

大分大学・理工学部・教授

研究者番号：10270472

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,800,000円

研究成果の概要(和文)：量子系、二成分流体系、音と流体の連性系に対して、マルチスケール表現を利用した並列計算を実施し、双曲型を除く偏微分方程式系に対して、時間と空間のマルチスケール表現による効率化が可能であることを確認した。しかし、分子動力学系など常微分方程式で表現される多体系の動力学に関しては、Parallel-in-Time法による時間並列計算の収束性が悪く、応用可能な範囲が少ないこともわかった。そこで、自己駆動粒子系を対象にした時間並列計算により収束性の性質について検証し、問題点を明らかにした。

研究成果の概要(英文)：Parallel computations by the use of multi-scale descriptions for quantum systems, two-phase fluids, and sound/fluid complex systems have been executed. Through these studies, it was established that the space-time parallel method is effective to systems described by non-parabolic partial differential equations. On the other hand, it was also revealed that systems under ordinary differential equations are difficult to be parallelized by the parallel-in-time method. This is because convergence property is poor and an application area is narrow. In this study, we demonstrated the poor convergence in self-propelled particle systems when we parallelize them with the parallel-in-time method.

研究分野：非線形動力学

キーワード：時間方向並列計算 マルチスケール表現 自己駆動粒子系 収束性

## 1. 研究開始当初の背景

大規模な並列計算機が広く利用出来るようになったが、マルチコア・メニーコアの CPU では計算コア単体での性能の伸びが鈍化しているため、十分な演算性能を引き出すためには、大規模な並列化を実施せざるを得ないという問題がある。これに対して、2001 年に提案された 'Parareal' アルゴリズムを利用して時間方向という新たな並列化軸を導入すると、小規模シミュレーションでも効果的に並列化が可能であることがわかり、その後、時空間マルチグリッド法として発展している。さらに最近になって、Parareal アルゴリズムをマイクロ・マクロ結合系などのマルチスケールシミュレーションに応用する、というアイデアが提出されている。マルチスケールシミュレーションとは、多階層に渡る複雑な物理現象を扱うために、スケールに応じた表現を組み合わせるシミュレーションを構成する手法で、時間・空間スケールに応じた適切な記述 (マルチスケールモデリング) により、複雑な力学の再現が可能であるという考え方に基づいている。データ点数の多い詳細な表現から、粗視化した表現、あるいは、解析的モデルに近い表現まで階層的にシミュレーションを構成することにより、単に複雑な問題の表現が可能になるというだけでなく、大規模化したシミュレーションの可視化や結果の解析に対してもメリットがあると考えられる。すでに研究代表者の高見らは、時間並列化アルゴリズムの高性能実装を目的として identity Parareal 法を開発し、バケツリレー通信を使って効率的な並列計算ができることを示した。この手法はシミュレーションで多用される陽的な時間発展計算に広く適用でき、パイプライン転送の non-blocking 化により通信を大幅に高速化することが可能になった。さらに、計算機分野でのこれらの成果を受けて、この方法を異なる時間スケールを持つマルチスケール系に適用するための予備的な研究結果を、本研究課題の研究分担者 (下川、小林) との共同名で、非線形動力学分野の国際会議で発表している。

## 2. 研究の目的

本研究課題では、Parareal アルゴリズムに基づくマルチスケールシミュレーションを構成することを考える。時空間マルチグリッド法からの拡張としてマルチスケールシミュレーションを構成する方法を確立し、その有効性を明らかにする。時空間マルチグリッド法は、すでに様々な問題に対して応用段階にあり、このスケール差を大きくしたものとしてマルチスケール表現を取り入れることで、シミュレーションの安定性の向上に寄与することを示す。単一スケール表現によるシミュレーション結果と、マルチスケール表現による結果を比較することによって検証作業を行

う。このために、研究代表者と研究分担者が研究して来た非線形動力学の問題を具体的な例として導入し、これらを扱うシミュレーションプログラムを開発し、現象の再現、計算の安定性、並列化の効率などの観点から評価を実施する。

## 3. 研究の方法

本研究課題では、量子・古典結合系の動力学、二成分流体実験の時系列解析、流体と音との相互作用を研究対象とする。これらの数値計算に対して、時空間マルチグリッド計算に基づくマルチスケールシミュレーションの構成法を確立し、検証および評価を行う。まず、研究代表者は、時空間マルチグリッド計算、時空間マルチスケール計算を記述するための API 開発、および、量子・古典結合系の数値計算を実施する。研究分担者の下川は、二成分流体実験を実施し、その時系列解析を実施する。研究分担者の小林は、楽器と音の相互作用系に対して、シミュレーションプログラムの開発と、API を使ったマルチスケールプログラムへの拡張を実施する。これら分担者の結果を受けて、改めて代表者は、並列計算機上で時間並列マルチスケール計算の効果について定量的な評価を実施する。

## 4. 研究成果

本研究の準備期間を含めた研究期間の中で、量子系の動力学、流体系における複雑な動力学、楽器における非圧縮流体の動力学の研究を実施し、マルチスケール表現を利用して効率的な並列計算を実施してきた。これら偏微分方程式でモデル化される系のうち、双曲型を除く偏微分方程式系に対して、時間と空間のマルチスケール表現による効率化が可能であることが確定しつつある。これは、この研究、および、時間並列計算に関連する他の研究による成果である。しかし、分子動力学系など常微分方程式で表現される多体系の動力学に関しては、表面上は Parareal 法による時間並列計算が適用できるが、収束性が非常に悪く、応用可能な範囲が少ないこともわかってきた。そこで本研究の研究成果の一例として、粒子系の動力学を対象にして通常の計算法による高速化の結果と、時間並列計算における収束性の検証結果を報告する。

数値計算の対象とした系は、ここ数年様々な分野で注目を集めている自己駆動粒子系 (マイクロな系ではアクティブマターとも呼ばれる) である。このような系のうち、1987 年に Reynolds によって提案された BOID モデルは、シンプルなルールによる相互作用ながら、鳥や魚などの群れを再現することが知られており、現在では GPU を利用して  $10^6$  個体程度までの大規模な高速計算が実施されている。

最初にまず、この BOID モデルを対象として、 $10^6$  個体程度までの計算が可能なプログラム

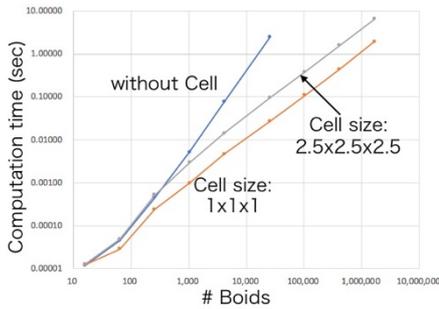


図 1 個体数の増加に対する計算量

を構成した。各個体間で考慮する相互作用は、周りの個体に集まろうとする cohesion、周りの速度に合わせようとする alignment、および、衝突を避ける separation の 3 つの力のみであり、全体の個体数を  $N$  として、相互作用の計算には  $O(N^2)$  の計算量が必要である。実際には、遠く離れた個体間の相互作用は考慮されないため、各個体を cell に分配して近傍リストを管理することで、計算量が  $O(N)$  となるように構成することができる。図 1 によると、効率化を実施しない場合には BOID 数に対して  $N^2$  に比例する傾きだったものが、効率化によって高速化され、 $N$  の傾きになっていることがわかる。また、設定する cell の大きさにもよるが、 $10^6$  個体の系で 1 ステップの計算に約 1 秒かかっていることがわかる。

次に、時間方向の並列計算アルゴリズムを導入するために、近似的な計算方法を導入する。一つ目の方法は、時間粗視化によるもので、常微分方程式を積分する時の時間刻みを大きく取ることで計算量を落とす方法である。ここでは、元の計算より 10 倍大きい時間刻みを利用した近似計算による時間並列化の収束性を調べた。その結果は図 2 に示した通り、時間並列計算の繰り返し数  $m$  を増やしても、軌道誤差が収束する様子が見られず、時間並列計算の実施が困難であることがわかる。同様にして、近傍リストの作成回数を削減することで高速化した近似計算を導入し、時間並列計算の収束性を調べた。これによる結果は図 3 に示す通りで、時間粗視化に比べると幾分誤差の増加がゆるやかであるが、やはり収束したとは言い難い誤差の状況である。

これらの結果は、粒子系の時間並列計算は偏微分方程式系に比べて困難な場合が多いという結果を裏付けるものであり、特に、気体や液体状態の分子動力学計算と同じく、カオ

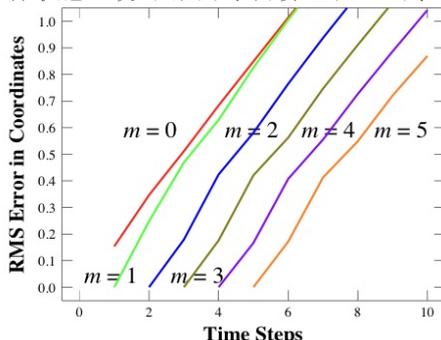


図 2 時間粗視化による誤差

ス的な運動を対象とする場合には、近似計算の設定が困難であることを示している。このような場合には、個々の軌道誤差を収束性の判断基準とすること自体を再考する必要があり、粒子の密度表現にたいして近似時間発展計算を導入するなど、力学変数の記述方法を変更して偏微分方程式系に書き直し、時間並列計算を導入していくなどの新しい方法を構築する必要があると考えられる。以上の通り、時間並列計算の効率化は、マルチスケール表現との連携が重要であることが示唆される結果となった。

## 5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 6 件)

- ① H. Fujisaki, K. Yagi, H. Kikuchi, T. Takami, and G. Stock, Vibrational energy transport in acetylbenzonitrile described by an ab initio-based quantum tier model, *Chemical Physics* 482, 2017, 86-92, 査読有  
DOI: 10.1016/j.chemphys.2016.09.010
- ② M. Shimokawa, R. Mayumi, T. Nakamura, T. Takami, and H. Sakaguchi, Breakup and deformation of a droplet falling in a miscible solution, *Physical Review E* 93, 2016, 062214 [9 pages], 査読有  
DOI: 10.1103/PhysRevE.93.062214
- ③ K. Fukazawa, T. Takami, T. Soga, Y. Morie, and T. Nanri, Effective Calculation with Halo Communication using Halo Functions, *Proceedings of Euro MPI16*, 2016, 215-216, 査読有  
DOI: 10.1145/2966884.2966893
- ④ K. Takahashi, S. Iwagami, T. Kobayashi, and T. Takami, Theoretical Estimation of the Acoustic Energy Generation and Absorption Caused by Jet Oscillation, *Journal of the Physical Society Japan*, 85, 2016, 44402 [13 pages], 査読有  
DOI: 10.7566/JPSJ.85.044402
- ⑤ M. Shimokawa and T. Takami, Effect of fluid viscosity on surface patterns

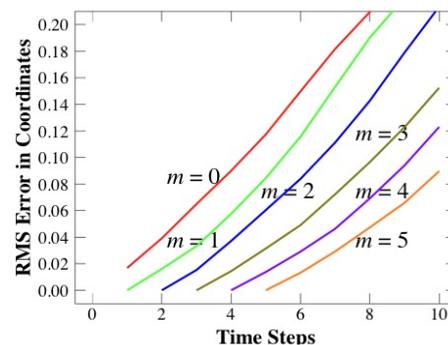


図 3 リスト更新の削減による誤差

formed by gravitational instability, Modern Physics Letters B, 29, 2015, 1550237 [11 pages], 査読有  
DOI: 10.1142/S0217984915502371

- ⑥ 世木裕人、高見利也、リアルタイムシミュレーションのためのエッジトーンの一次元モデル化、九州大学大学院システム情報科学紀要、20巻、2015、45-51、査読有  
DOI: 10.15017/1560526

[学会発表] (計 12 件)

- ① T. Takami, PinT Computation of Swarm Behavior, SIAM Parallel Processing, 早稲田大学, 2018年
- ② 高見利也、平野聖大、ギターのハーモニクス音の物理と数値計算、日本物理学会年次大会、豊中市、2017年
- ③ 高見利也、下川倫子、小林泰三、数値流体的アプローチによる二成分流体計算の精度検証、日本物理学会秋季大会、金沢市、2016年
- ④ 小林泰三、松田秀隆、高橋公也、高見利也、木管楽器の音孔と移動境界、日本物理学会秋季大会、金沢市、2016年
- ⑤ T. Takami, Future Prospects for the Parallel-in-Time Algorithm, 第19回環瀬戸内応用数理部会シンポジウム, 日田市, 2016年
- ⑥ T. Takami and T. Nanri, Parallelization of Irregular Sparse Computations with One-sided Communications, International Meeting on High-Dimensional Data Driven Science, 京都市, 2015年
- ⑦ 高見利也、Parallel-in-Time法の現状と今後、研究会「数理構造保存を接点とした数学・HPC・実科学のクロスオーバー」、電通大、2015年
- ⑧ 高見利也、非線形・マルチスケールと時間並列化法、研究会「非線形現象の捉え方」、由布市、2015年
- ⑨ T. Takami, M. Shimokawa, and T. Kobayashi, Multiscale descriptions for nonlinear dynamics, Dynamics Days Europe, Exeter, U. K., 2015
- ⑩ T. Takami and M. Shimokawa, Instability of vortex rings and numerical simulations, 情報技術、応用数学そして教育に関するワークショップ, 津和野町, 2015年
- ⑪ A. Naribayashi and T. Takami, Performance Measurement of Parareal-in-Time Method by Spatial Coarse Graining, 情報技術、応用数学そして教育に関するワークショップ, 津和野町, 2015年
- ⑫ H. Seki and T. Takami, Configuration of Virtual One-dimensional Musical Instruments, 情報技術、応用数学そして教育に関するワークショップ, 津和野町, 2015年

## 6. 研究組織

### (1) 研究代表者

高見 利也 (Toshiya Takami)  
大分大学・理工学部・教授  
研究者番号: 10270472

### (2) 研究分担者

下川 倫子 (Michiko Shimokawa)  
福岡工業大学・工学部・助教  
研究者番号: 80554419

### 小林 泰三 (Taizo Kobayashi)

帝京大学・福岡医療技術学部・准教授  
研究者番号: 20467880

### (3) 連携研究者

戸田 幹人 (Mikito Toda)  
奈良女子大学・自然科学系・准教授  
研究者番号: 70197896

### 高橋 公也 (Kin'ya Takahashi)

九州工業大学・情報工学研究院・教授  
研究者番号: 70188001

### 藤崎 弘士 (Hiroshi Fujisaki)

日本医科大学・医学部・准教授  
研究者番号: 60573243