土木学会論文集B2（海岸工学）
Vol. B2-65，No.1，2009，041-045

領域分割の最適化による3次元CMPS法の並列計算効率の改善

Development of 3D Parallelized CMPS Method with Optimized Domain Decomposition

後藤仁志[1]・Khayyer Abbas[2]・五十里洋行[3]・堀智恵実[4]

Hitoshi GOTOH, Abbas KHAYYER, Hiroyuki IKARI and Chiemi HORI

The paper presents a 3D-CMPS method for refined simulation of a plunging breaking wave and resultant splash-up. The Corrected MPS (CMPS) has been extended to three dimensions and 3D-CMPS method has been developed on the basis of 3D-MPS method. To enhance the computational efficiency of the calculations, the parallelization of 3D-CMPS method has been carried out with two different solvers of simultaneous linear equations corresponding to the Poisson Pressure Equation (PPE). The parallelization has been performed based on a dynamic domain decomposition strategy for an optimized load balancing among the processors.

1. はじめに

MPS（Moving Particle Semi-implicit； Koshizuka・Oka, 1996）法の問題点の一つである運動量保存性の欠陥は，anti-symmetric（逆向き等大）な圧力相互作用を保証する圧力勾配モデルを有するCMPS（Corrected MPS）法（Khayyer・Gotoh, 2008）によって根本的に改善され，巻き波砕波後のsplash-up の過程での水脈のばらけ（粒子の散らばり）が良好に抑制される結果が示された．このCMPS 法を用いた3次元場のシミュレーションを実施すれば，巻き波先端のfingerの出現など，水面の3次元構造についても計算力学的にアプローチが可能となると期待できるが，粒子法の計算では均一径粒子を用いるため，3次元場の本格的な計算には100万オーダーの粒子追跡が不可避となる．

Ikari・Gotoh（2008）は3次元MPS法の並列計算法を開発する際，(1)　粒子分割法と領域分割法，(2)　ICCG法（Incomplete Cholesky decomposition Conjugate Gradient method；不完全コレスキー分解付共役勾配法）とSCG法（Scaled Conjugate Gradient；対角スケーリング付共役勾配法）を組み合わせて，計算効率の比較検討を実施した．本稿では，同様の検討を3次元CMPS法について実施し，数値波動水槽の構築に最適な並列計算法を提案する．

さらに，静的な領域分割法で発生するCPU間のロードの不均衡を是正するため，ロードバランス最適化のアルゴリズムを導入し，動的領域分割を実現して，計算効率を向上させた．

1　正会員　博（工）　京都大学教授　工学研究科都市環境工学専攻
2　正会員　博（工）　京都大学研究員　工学研究科都市環境工学専攻
3　正会員　博（工）　京都大学助教　工学研究科都市環境工学専攻
4　学生員　　　　　　京都大学大学院修士課程　都市環境工学専攻

2. CMPS法

MPS法およびCMPS法の概要を説明する．粒子法の基礎式は，Navier-Stokes式

$$\frac{D\boldsymbol{u}}{Dt} = -\frac{1}{\rho}\nabla p + \boldsymbol{g} + \nu\nabla^2\boldsymbol{u} \quad \cdots\cdots (1)$$

（ρ：流体の密度，$\boldsymbol{u}$：流速ベクトル，p：圧力，ν：動粘性係数，$\boldsymbol{g}$：重力加速度）および連続式である．式（1）の各項を近傍粒子間の相互作用として記述した微分演算子モデルにより離散化するが，標準MPS法の圧力勾配には，

$$\langle\nabla p\rangle_i = \frac{D_s}{n_0}\sum_{j\neq i}\frac{p_j - \hat{p}_i}{|\boldsymbol{r}_{ij}|^2}(\boldsymbol{r}_{ij})w(|\boldsymbol{r}_{ij}|) \;\;;\;\; \boldsymbol{r}_{ij} = \boldsymbol{r}_j - \boldsymbol{r}_i \quad \cdots\cdots (2)$$

$$\hat{p}_i = \min_{j\in J}(p_i,\ p_j) \;\;;\;\; J = \{j:\ w(|\boldsymbol{r}_{ij}|) \neq 0\} \quad \cdots\cdots (3)$$

が採用されている（D_s：次元数，n_0：基準粒子数密度，$\boldsymbol{r}_i$：粒子iの位置ベクトル，w：重み関数）．標準MPS法では粒子i自体の圧力値でなく，粒子iの周囲の影響円内で最小となる圧力値を基準として圧力勾配を評価する．この操作には，粒子間に常に排斥力が作用することを保証し，粒子の重なりを抑制して，計算を安定化させる効果がある．

ところが，式（2）による2粒子間内力はanti-symmetricとならないため，厳密な運動量の局所的保存が保証されず，各粒子座標の不自然な微小変動が誘発される．著者ら（Khayyer・Gotoh, 2008）は，anti-symmetryを保証するため，式（2）に代わる圧力勾配モデル

$$\langle\nabla p\rangle_i = \frac{D_s}{n_0}\sum_{j\neq i}\frac{(p_i + p_j) - (\hat{p}_i + \hat{p}_j)}{|\boldsymbol{r}_{ij}|^2}(\boldsymbol{r}_{ij})w(|\boldsymbol{r}_{ij}|) \quad \cdots\cdots (4)$$

を提案した．2次元砕波問題に式（4）を適用すると，水面形の再現性や衝撃波圧の推定精度が向上する（Khayyer・Gotoh, 2008）．本稿では3次元砕波における式（4）の効果を検証する．

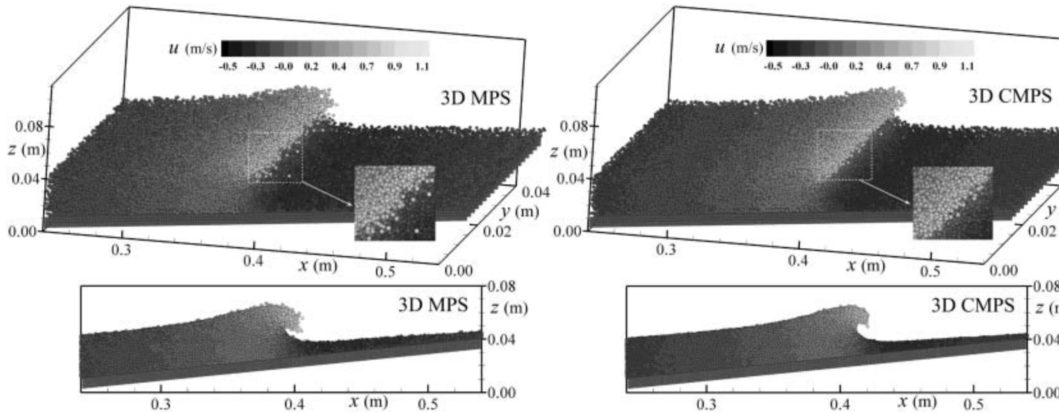

図-1　3次元MPSおよびCMPS法による巻き波発達過程のシミュレーション

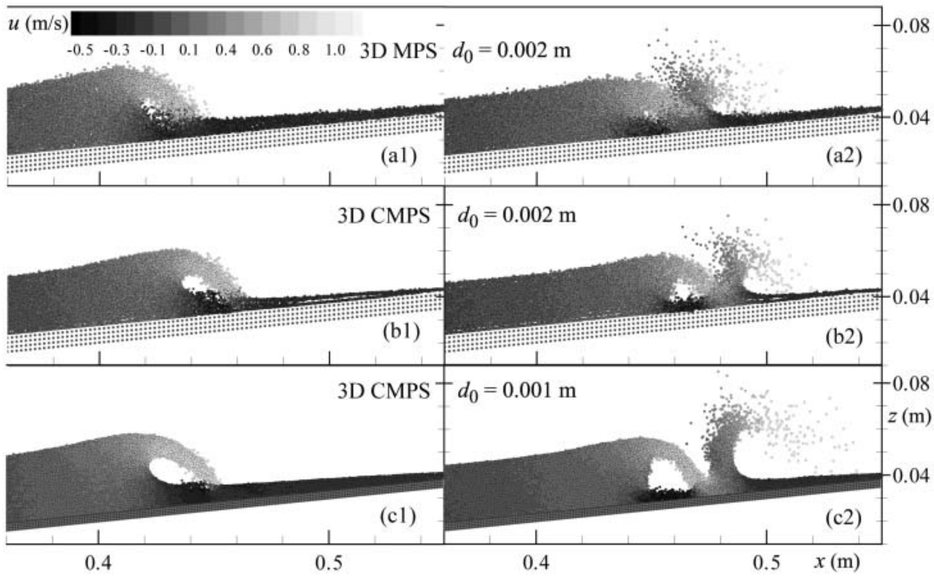

図-2　plunging jetの水面衝突とsplash-up過程のシミュレーション

3. 3次元CMPS法

拡張された3次元CMPS法コードを用いて，数値造波水槽を構築し，1/10勾配の一様斜面上の巻き波型砕波および遡上のシミュレーションを実施した．計算領域は室内実験のスケールであり，全長80.0cm（水平区間20.0cm，斜面60.0cm），水平区間の静水深は4.0cmである．沖側の水路端に設けた造波板（すなわち鉛直移動壁）で，波高1.96cm，周期0.777sの規則波（長尾ら（1997）による水理実験と同様）を造波した．計算に用いた粒子径d_0は2.0mmで，この場合の総粒子数は約96,000個である．なお，側方を周期境界として側壁による抵抗の影響を除去した．

図-1は，一様勾配斜面上の巻き波型砕波過程を3D-MPS法および3D-CMPS法によりシミュレーションした結果の例（plunging jetの発生の瞬間）である．この図から明らかなように，CMPS法では，MPS法に見られる粒子の非物理的な不規則挙動が抑制され，特にplunging jet先端のばらけが小さくなって，整った巻き波が再現されている．また，x方向流速も，CMPS法のほうがより整然とした分布を呈している

図-2は，jetの衝突とsplash-up過程の瞬間図を示している．MPS法に比べCMPS法は，plunging jetの着水の瞬間とair chamberの存在をより鮮明に表現している．加えて，砕波領域外の自由水面についても比較的滑らかな性状を呈している．その後のsplash-upについても，弧を描くjetの形状やjetの下方に維持されるair chamberの存在がMPS法よりも明瞭に描かれている．図-2（c）は粒子径を1.0 mmにした高解像度の結果であるが，弧を描くjetの形状が更に鮮明に表れている．

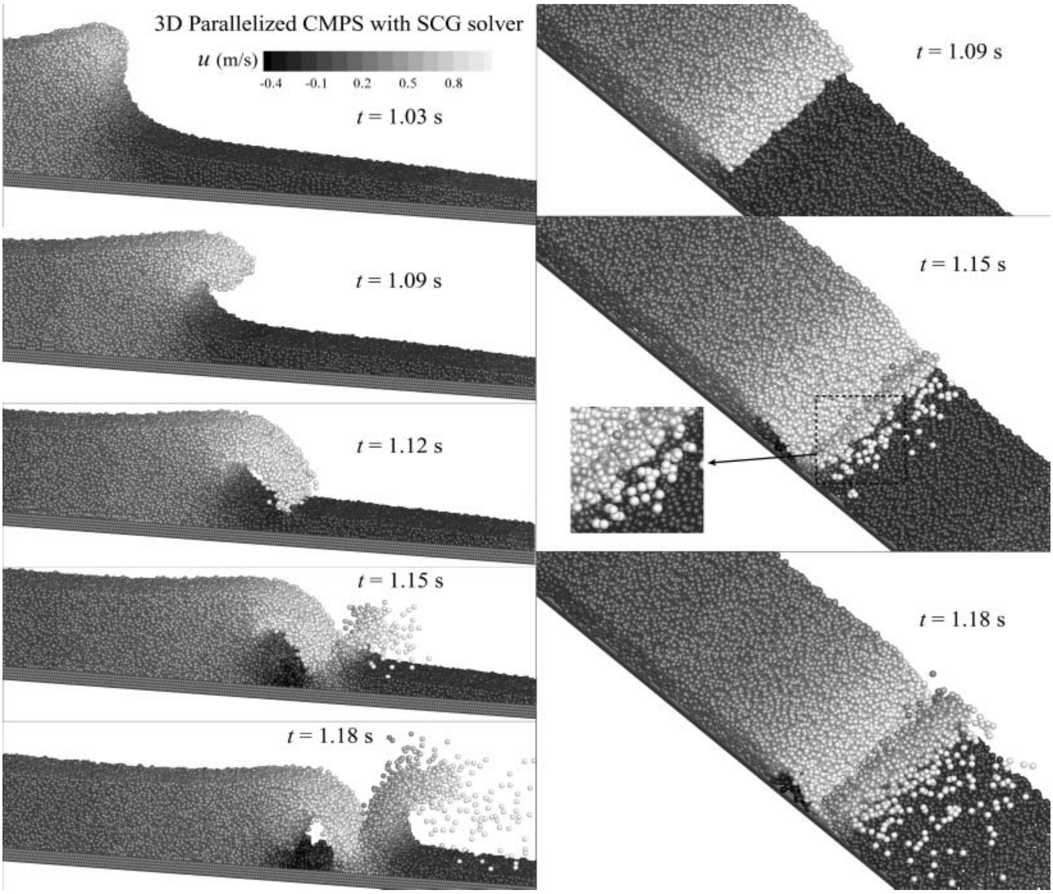

図-3　3次元CMPS法の並列計算（SCG法）によるfingerの再現

以上図-2を総合すれば，次の2つのことが言える．第一に，速度場や圧力場において時空間的に急勾配が発生する現象（例えば，巻き波型砕波など）を対象とした粒子法シミュレーションでは特に，空間解像度（粒子径）が重要である．第二に，手法の性能と計算時間の両方を考慮して最適な粒子径を選ぶ必要がある．比較的広領域を扱う3次元計算の場合，最適な空間解像度を実現するためには莫大な計算が必要となることが多い．したがって，並列計算の実施は不可避である．次章では，3D-CMPS法計算の効率を向上するために開発した並列計算法について述べる．

4. MPS法の並列計算

（1）データ分配方法の検討

本稿では，分散記憶型並列計算機を使用して並列計算を行う．この場合，あらかじめデータを各プロセッサ（本研究では，プロセッサ数＝CPU数）に配分してデータの通信を適宜行いながら計算を進めることとなる．一般的に，データ分配方法には粒子分割法と領域分割法のいずれかが用いられる．領域分割法では，粒子が分割領域間を移動するため，各CPUが計算を担当する粒子数が変動し，CPU間のロードに不均衡が生じる．一方、粒子分割法では，ロードバランスは常に一定であるが，近傍粒子情報を局所的に（個々のCPUが独立して）利用できないので，他の全てのCPUに対する通信が必要となる．その点，領域分割法では，CPU間の境界から十分離れた内部領域に存在する粒子の近傍粒子は全て同プロセッサの担当する粒子であるので，隣接するプロセッサの境界近傍に属する粒子情報のみを送受信することで相互作用計算を行うことができる．Ikari・Gotoh（2008）は，3D-MPS法の並列化における計算効率では領域分割法のほうが優れていることを示した．本稿でも，3D-CMPS法の並列化には領域分割法を採用した．さらに，CPU間のロードの不均衡を是正するための動的アルゴリズムを導入したが，これについては後述する．

（2）圧力Poisson方程式解法の検討

連立1次方程式である圧力Poisson方程式の反復解法を効率的に並列化することも，並列計算効率の向上に大き

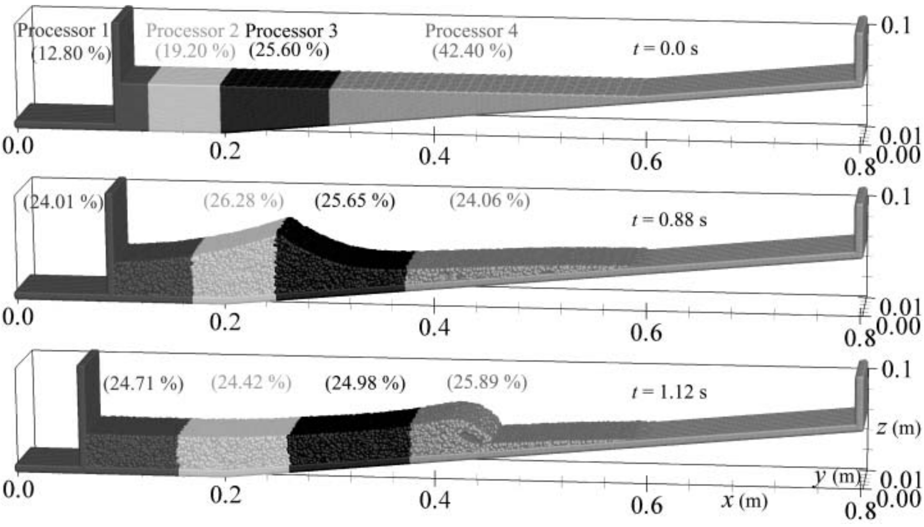

図-4 動的領域分割法

く寄与する．標準MPS法では，ICCG法を用いて圧力解を得ている．ICCG法はきわめて安定に機能するが，内在する前進消去・後退代入操作が逐次処理であるため，並列化が難しい．本稿ではこれに対応する手法として，Iwashita・Shimasaki（2000）のリナンバリング処理を施したICCG法（PICCG-RP; Parallelized ICCG with Renumbering Process）を採用する．一方，SCG法では前進消去・後退代入を必要とする演算は現れず，完全な並列処理が可能になる．

3D-CMPS法の単一CPU計算，PICCG-RP法およびSCG法による並列計算の3種類の結果に関して，水面形の再現性を比較したが，3者でほぼ同一の水面形が得られた．各手法の計算効率の比較に関しては後述する．

図-3は，SCG法を用いた3D-CMPS法の並列計算による瞬間図である．plunging jetの発生段階（図-3右上段；t = 1.09）では，粒子分布が奥行方向にほぼ一様であるが，plunging jetが水面に衝突して以降の2次jetでは，粒子分布の奥行方向のずれが顕在化し，fingerの出現とも見なせるspike状の粒子の飛び出しが出現する（より鮮明なfingerの再現には空間解像度を上げる必要がある）．また，圧力Poisson方程式の生成項の高精度化（Khayyer・後藤, 2008）を適用することによって，ノイズの更なる低減が実現されると考えられる．

(3) 動的領域分割法の導入

前報（Ikari・Gotoh, 2008）では，CPU間のロード不均衡という欠点があったが，本稿ではロードバランスを最適化する動的領域分割（Dynamic Domain Decomposition; DDD）法を導入した．これは，各CPUに割り当てられる粒子数をCPUごとにほぼ一定とする手法であるが，そのアルゴリズムの概要は以下のようである．

まず，計算領域をx軸に対して垂直に近傍粒子検索格子の単位（影響半径r_eに一致）で切断し，薄板の小領域の集合を構成する．各薄板内に存在する粒子数と，その薄板のx軸格子座標のモーメントから，全粒子のx軸方向における重心位置を概算する．その重心を含むy-z平面で計算領域を2分する．CPU数（$= N_{\mathrm{NODE}}$とする）が4以上であれば，これを（$N_{\mathrm{NODE}} - 1$）回繰り返す．ただし，N_{NODE}は2の乗数であることが必要となる．以上の操作は20時間ステップごとに行えば十分である．

図-4は，3次元CMPS法の並列計算を行った際の初期配置と計算開始後の瞬間図である．動的領域分割の状態をわかりやすくするため，各CPUに割り当てられる粒子を濃淡に色分けして表示している．また，図中には各CPUの受け持つ粒子数の割合を併示している．初期（t = 0.0s）には不均衡に分割された領域が自動的に最適分割され，時間が経過したt = 0.88sとそれ以降（t = 1.12s）にはほぼ均等の粒子数に分割された状態となって，各CPU間でロードバランスが良好に保たれていることが理解できる．

図-5（a）は，3D-CMPS法における各時間ステップあたりの計算実行時間の時系列を表している．今回のシミュレーションでは，PICCG-RP法とSCG法のどちらの反復解法を用いても，静的領域分割法による並列計算の実行時間には大きな差は見られず，時間ステップの経過にしたがった実行時間の不安定な変遷の様子は類似している．一方，動的領域分割法を採用した場合，時間ステップの経過に対する計算実行時間はほぼ一定である．また，平均計算速度は単一CPUの場合の約3倍となった．

図-5（b）は，3D-CMPS法の並列計算において，PICCG-RP法およびSCG法による圧力解収束までの反復

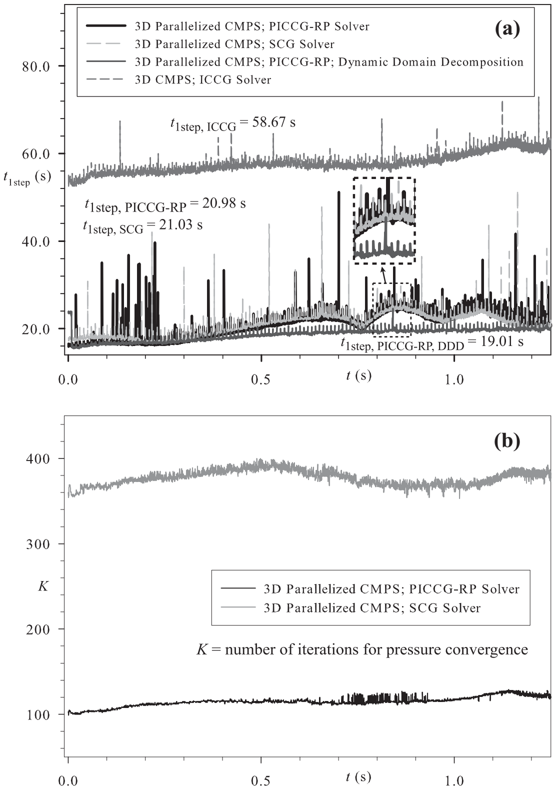

図-5　計算時間の比較（(a) 時間ステップあたりの計算実行時間の時系列；(b) 圧力Poisson方程式計算反復回数の時系列）

計算回数の時系列である．これより，SCG法は収束までに，PICCG-RP法に比べ数倍多くの反復を要することがわかる．しかし，1時間ステップあたりの計算実行時間は逐次計算の数分の1で，1ステップの収束に要する時間はPICCG-RP法と同程度になる．これは，ICCG法（PICCG-RP法）はLU分解を含むので1時間ステップあたりの計算時間が増加するためである．

物理時間t = 1.25sまでに要した計算時間と総時間ステップ数を**表-1**に載せた．本稿では，粒子位置の異常更新を抑制するため可変時間間隔を用いて計算を進めた．**表-1**より，動的領域分割を導入した並列計算では，それを採用していない他の並列計算および単一CPUによる計算と比較して総時間ステップ数が100回ほど少ない．各ステップにおける全粒子の加速度計算が比較的安定に行われている現れである．これに加えて，**図-5**（a）で述べたように時間ステップあたりの計算時間が低値を安定的に遷移していることから，動的領域分割を採用していない手法と比較して総計算時間も10%程度短縮された．

5. おわりに

本稿ではCMPS法を3次元に拡張し，巻き波型砕波における plunging jetの着水とそれに続くsplash-up過程のシミュレーションを実施した．3D-CMPS法は，plunging jetとsplash-upについて，3D-MPS法に見られる粒子の不自然な散らばりを抑え，良好な再現性を示すことが確認された．また，fingerとも見なせる，3次元組織構造の一端を確認できた．

3D-CMPS法の計算効率を向上させるために，PICCG-RP法およびSCG法を連立1次方程式の反復解法として用いた並列計算を行った．それら2つの手法による計算では，水面形の再現性や計算実行時間がほぼ同一であるが，並列化実装の容易さから見ればSCG法が優位と考えられる．

また，新たに，各CPUのロードバランスを保つための動的領域分割のアルゴリズムを導入した．粒子分配率や1時間ステップあたりの計算時間の時系列などから，このアルゴリズムを実装したコードが適切に機能し，計算効率の向上にも好影響を与えることがわかった．

表-1　総計算時間の比較（物理時間1.25s）

Method	Total number of time steps	Net running time (s)	Averaged CPU time per time step (s)
3D-CMPS; ICCG	4269	250481.30	58.67
3D Parallelized CMPS; PICCG-RP	4291	90010.32	20.98
3D Parallelized CMPS; SCG	4290	90214.78	21.03
3D Parallelized CMPS; PICCG-RP; DDD	4170	79271.70	19.01

参　考　文　献

長尾昌朋・新井信一・上岡充男（1997）：PTVとPIVを組み合わせた砕波帯の流速分布測定，海岸工学論文集，第48巻，pp.116-120.

Khayyer Abbas・後藤仁志（2008）：粒子法における圧力擾乱低減のためのCMPS-HS法の提案，海岸工学論文集，第55巻，pp.16-20.

Ikari, H and Gotoh, H (2008): Parallelization of MPS method for 3D wave analysis, *Advances in Hydro-science and Engineering, 8th International Conference on Hydro-science and Engineering (ICHE),* Nagoya, Japan.

Iwashita, T. and Shimasaki, M.(2000): Parallel Processing of 3-D Eddy Current Analysis with Moving Conductor Using Parallelized ICCG Solver with Renumbering Process. *IEEE TRANSACTIONS ON MAGNETICS,* 36(4), pp.1504-1509.

Khayyer, A. and Gotoh, H.(2008): Development of CMPS method for accurate water-surface tracking in breaking waves, *Coastal Engineering Journal,* 50(2), pp.179-207.

Koshizuka, S. and Oka, Y.(1996): Moving particle semi-implicit method for fragmentation of incompressible fluid, *Nuclear Science and Engineering,* 123, pp.421-434.

Watanabe, Y., Saeki, H. and Hosking, R.J.(2005): Three-dimensional vortex structures under breaking waves, *Journal of Fluid Mechanics,* 545, pp.291-328.