第 47 回岩盤力学に関するシンポジウム講演集
公益社団法人土木学会　2020 年 1 月　講演番号 22

地下水流動シミュレーションへの時間並列計算手法の適用

宮城 充宏[1]・山本 肇[1]・高見 利也[2]・飯塚 幹夫[3]・小野謙二[3]・中島 研吾[4]

[1]大成建設 技術センター (〒245-0051 神奈川県横浜市戸塚区名瀬町344-1)
[2]大分大学 (〒870-1192大分県大分市大字大字旦野原700)
[3]九州大学 (〒819-0395福岡県福岡市西区大字元岡744)
[4].東京大学 (〒110-0008 東京都台東区池之端2-5-37)
*E-mail: mygath00@pub.taisei.co.jp

近年の計算機能力の向上は著しく，数 10 万を超える多数の CPU を搭載した超並列計算機が実用化されている．このような超並列計算機を効率よく使用するために，演算を複数の CPU で並列処理する並列計算手法の研究開発がすすめられてきた．最近では，超並列計算機の多数の CPU をさらに効率よく利用する方法として，空間領域をプロセス毎に分割し処理する空間領域分割法に加えて，時間方向にも並列化する（時間並列計算）手法が提案されている．本研究は，時間並列計算手法の一つである Parareal 法を汎用地下水流動シミュレータに実装し，その適用性を検討した．Parareal 法により，放射状流モデルでの注水シミュレーションにおいて約 10 倍（64 並列）の加速性能を得たので，その結果を報告する．

Key Words : *parallel comutation, parallel in time, parareal, groundwater simulation*

1. はじめに

近年の計算機能力の向上は著しく，数 10 万を超える多数の CPU を搭載した超並列計算機が実用化されている．超並列計算機を効率よく使用するために，演算を複数のプロセスに分割して並列処理する並列計算手法の研究開発がすすめられてきた．大規模な数値シミュレーションにおいては，空間領域をプロセス毎に分割し処理する空間領域分割法が適用されることが多い．分割した小領域の境界部については，プロセス間で演算結果を交換することで計算できる．

しかし，空間領域分割法の適用効果には限界がある．例えば，各プロセスにおける演算結果の転送時間と演算に要する時間の比が小さくなるにつれて，空間領域分割法の適用効果は小さくなる．これは，全体の計算時間が，各プロセスの演算時間よりも演算結果の転送時間に強く依存するためである．空間領域分割法の並列性能が飽和する問題に対しては，さらに高速化できる新たな手法の開発が必要である．

この課題に対しては，空間領域の並列計算に加えて，時間方向にも並列化する（時間並列計算）手法が提案されている．時間並列計算手法と空間領域分割法を併用すれば，超並列計算機に搭載されている膨大な数の CPU を有効に利用できると考えられる．

時間並列計算は 1964 年に Nievergelt[1)]により最初に提案され，常微分方程式での適用例が示されている．しかし，空間領域分割法の方が容易に並列性能向上が可能であったことや，時間並列計算法を既存コードに適用する場合の難度が高かったことから，その後の研究の進展は緩慢であった．このような中，2000 年に既存アプリケーションへの適用を容易とした Parareal 法 [2)]が提案され注目された．しかし，Parareal 法の適用性はアプリケーションの種々の条件や解く問題に大きく依存することがわかってきている．そのため，用いるアプリケーション毎に Parareal 法の適用性を調査し，適用の可否及び適用法を検討する必要がある．そこで本報では，時間並列計算手法の一つである Parareal 法を地下水流動シミュレーションに実装し，その適用性を検証した．具体的には，時間並列計算の過程で得られた解の収束過程及び加速性能について調査したのでその結果を報告する．

2. Parareal法

時間並列計算は，解析を行う時間領域をプロセス毎に分割し，それぞれの領域で時間発展計算を並列に行う．しかし，多くの場合，時間発展計算は前の時間領域の計

算結果に強く依存するため，一度の時間並列計算で解を算出することは困難である．

Parareal 法は，反復計算を用いて分割した時間領域間の不整合を修正し，全時間領域における計算を収束させる並列計算手法である．時間領域間の不整合の修正には，全時間領域を十分正確にシミュレーションするために必要な小さな時間ステップ幅で並列計算する並列積分演算と，大きい時間ステップ幅で高速に逐次計算する粗視化積分演算を用いる．

なお，本報ではこれ以降，通常の時間ステップ幅で並列に計算する演算と逐次的に計算する演算を各々並列積分演算，逐次積分演算と呼称する．

(1) 計算手法の概要

ここでは，Newton-Raphson 法の考えに基づき，Parareal 法の計算方法を説明する [3]．まず，全時間領域を$i = 1 \sim n$に分割して並列に解くことを考える．このとき，時間領域$i+1$の初期時刻t_{i+1}における主変数値$u(t_{i+1})$は，隣接する時間領域iの$u(t_i)$から求められる．

$$u(t_{i+1}) = F_i(u(t_i)) \tag{1}$$

$$t_i \in \emptyset = [0, T] \tag{2}$$

ここに，t_i：全時間領域$\emptyset = [0, T]$で離散化された時刻，$u(t_i)$：時間t_iに依存する解くべき主変数，F：$u(t_i)$から$u(t_{i+1})$を求める並列積分演算子である．すなわち，式(1)は時刻t_iでの解を求める漸化式として表現されている．式(1)を Newton-Raphson 法に基づいて以下のように変形する．

$$\boldsymbol{U}^r = (u(t_0), u(t_1), \cdots, u(t_{n-1}), u(t_n))^T \tag{3}$$

$$f(\boldsymbol{U}^r) = \begin{pmatrix} u(t_1)^r - F_0(u(t_0)^r) \\ \vdots \\ u(t_{n-1})^r - F_{n-1}(u(t_{n-2})^r) \\ u(t_n)^r - F_n(u(t_{n-1})^r) \end{pmatrix} = 0 \tag{4}$$

ここに，f：$f(\boldsymbol{U}) = 0$を満足する方程式，r：Newton-Raphson 法の反復回数である．$f(\boldsymbol{U}^r)$を$\boldsymbol{U}^r$について微分した行列を$f'(\boldsymbol{U}^r)$とすると，$\boldsymbol{U}^{r+1}$は式(5)より求解できる．

$$\boldsymbol{U}^{r+1} = \boldsymbol{U}^r - f(\boldsymbol{U}^r)[f'(\boldsymbol{U}^r)]^{-1} \tag{5}$$

$$f'(\boldsymbol{U}^r) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & & 0 \\ -F_0'(u(t_0))^r & 1 & & & \\ \vdots & & \ddots & & \vdots \\ 0 & & \cdots & 1 & 0 \\ & & & -F_{n-1}'(u(t_{n-1}))^r & 1 \end{pmatrix} \tag{6}$$

式(5)を整理すると，式(7)が得られる．

$$u(t_{i+1})^{r+1} - F_i(u(t_i)^r) = F'_i(u(t_i)^r)[u(t_i)^{r+1} - u(t_i)^r] \tag{7}$$

式(7)は$r \to \infty$で 0 に収束する，すなわち解くべき式(1)に収束する．

$$\lim_{r\to\infty} (u(t_{i+1})^{r+1} - F_i(u(t_i)^r)) = 0 \tag{8}$$

Parareal 法では，式(7)の右辺を粗視化積分演算子Cを用いて式(9)のように近似する．

$$u(t_{i+1})^{r+1} - F_i(u(t_i)^r) \cong C_i(u(t_i)^{r+1}) - C_i(u(t_i)^r) \tag{9}$$

すなわち，$u(t_{i+1})$は，時間t_iにおける並列積分演算子と粗視化積分演算子の結果を元に収束計算を行うことで求められる．最終的に，$u(t_{i+1})$の更新方法として式(10)が得られる．

$$u(t_{i+1})^{r+1} = F_i(u(t_i)^r) + C_i(u(t_i)^{r+1}) - C_i(u(t_i)^r) \tag{10}$$

Parareal 法の具体的な計算のフローを**図-1** に示す．

Parareal 法の反復計算の収束判定には，プロセス 0 以外のすべてのプロセスにおいて，式(10)が示す時間領域間の整合性を満足する条件とした．

$$\frac{|u(t_{i+1})^r - F_n(u(t_i)^r)|}{u(t_{i+1})^r} \leq 10^{-3} \tag{11}$$

(2) Parareal 適用の効果予測式

Parareal 法を適用することで期待できる計算の加速性能を式(12)に記す．

$$a = \frac{T_s}{T_p} = \frac{N_p t_p^f}{r(t_p^f + N_p t_s^c) + r t_{com}} = \frac{N_p}{r(1 + N_p t_s^c / t_p^f) + r t_{com}/t_p^f} \tag{12}$$

ここに，T_s：逐次積分演算による時間，T_p：Parareal 法を用いた計算時間，N_p：使用するプロセス数（時間領域の分割数），r：反復回数，t_p^f：並列積分演算に要する時間，t_s^c：粗視化積分演算に要する時間，t_{com}：1 回の反復に要する通信時間である．式(12)から，時間並列計算を適用する上で，t_p^fの計算コストがt_s^c及びt_{com}を無視できるほど高いケースが理想的であり，理想的な加速性能は時間領域分割数と反復回数の比に漸近するといえる．

3. 動作検証シミュレーション

いま説明したParareal法をシミュレータTOUGH2[4]に実装し，動作検証シミュレーションを実施した．TOUGH2 は有限体積法を用いて，熱・多成分多相流体をシミュレーションできる汎用解析コードである．ここではその詳

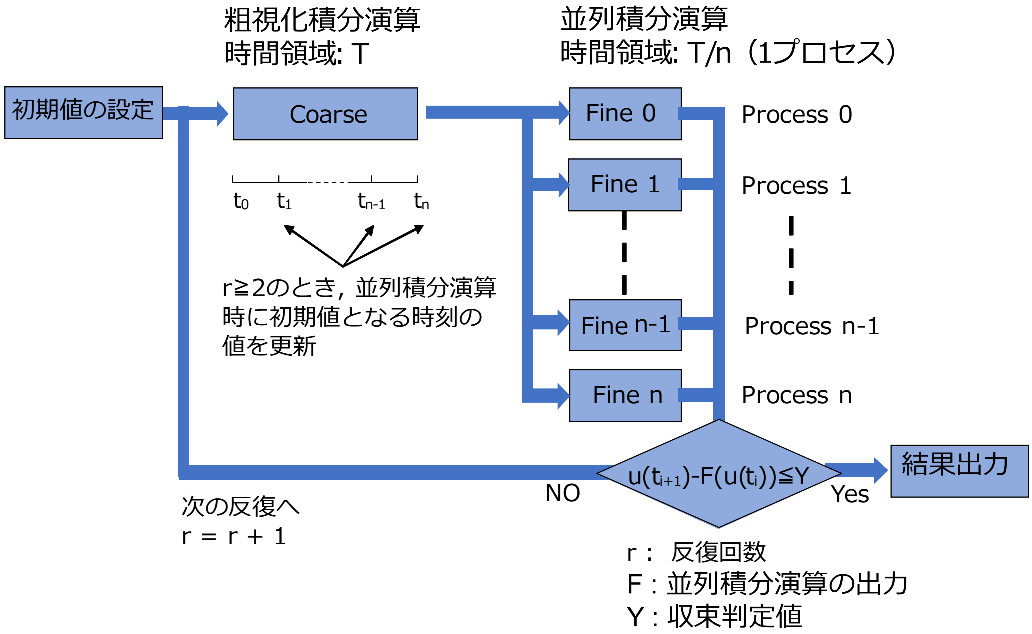

図-1 Parareal の計算フロー

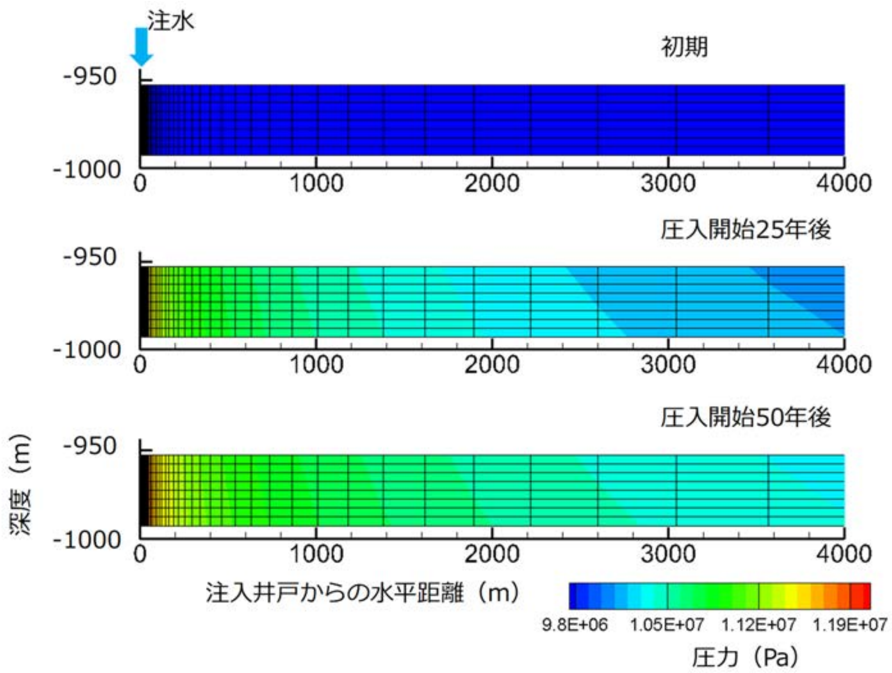

図-2 地下水流動シミュレーションの圧力分布

細について述べる．

(1) 解析条件

モデルの形状は半径約 10km，層厚 45m の 2 次元放射状モデルとし，水平方向に 60 層，鉛直方向に 9 層に分割した．また，地層物性は孔隙率が 0.2，絶対浸透率が $10^{-14}m^2$ で均質とした．このモデルを用いて，中心の鉛直井戸から年間約 45 万トンを注水する 1 成分 1 相流の地下水問題を考えた．深度約 1km を想定し，初期圧力は 10MPa とし，モデルの上下面及び側面は不透水境界とした．

時間領域の分割数は 1，4，16，32，64 とし，全時間領域 50 年を均等分割した各時間領域に，1CPU（1 プロセス）を割り当てた並列計算を実施した．なお，今回のシミュレーションでは，Parareal の適用性を評価するため，空間領域分割法は適用しない．

(2) 解析結果

地下水流動シミュレーションから得られたモデル半径 4km 以内の注水による圧力上昇を**図-2** に示す．同図より，

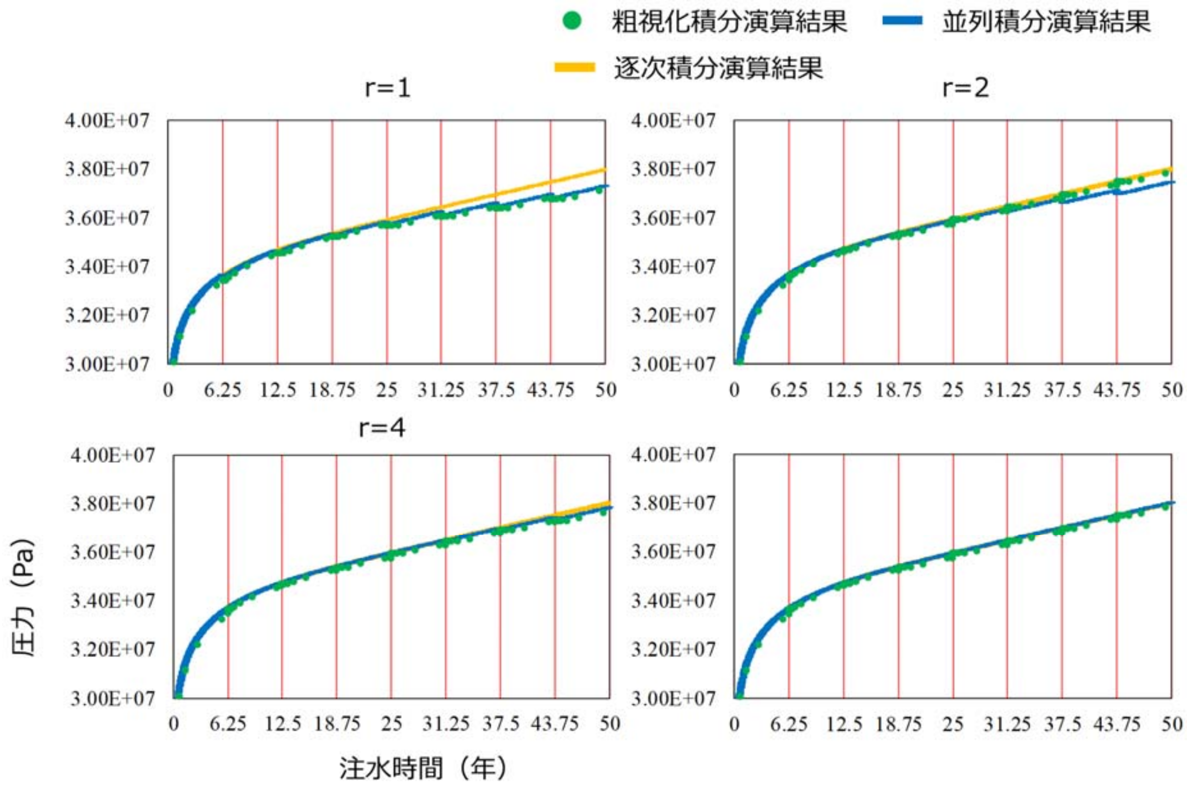

図-3　Parareal 法の反復過程における地下水流動シミュレーションの圧力分布の分布

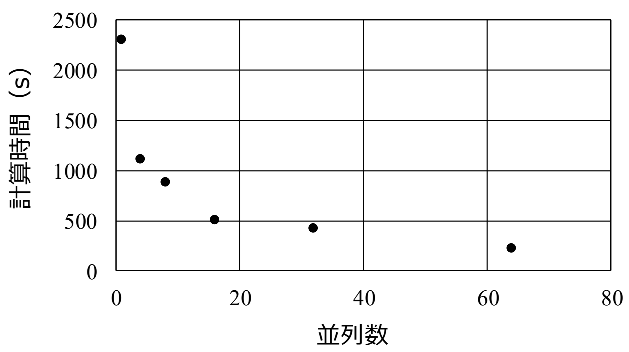

図-4　並列数と計算時間の関係

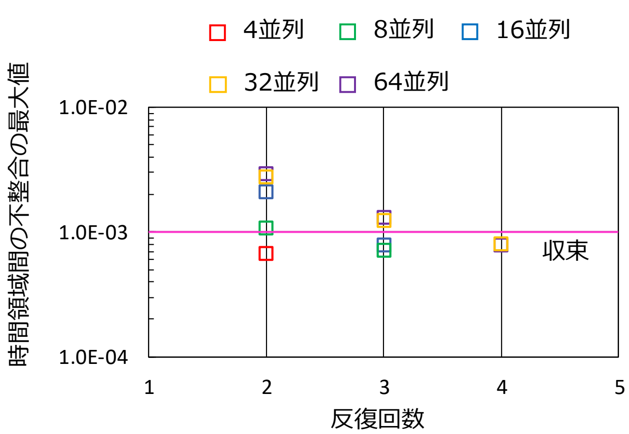

図-5　Parareal 法の反復数と時間領域間の不整合の最大値

注入井戸を中心に放射状に圧力が上昇していることが分かる．

(3)　Parareal の収束確認

今回の問題に対する Parareal 法の収束過程を図-3 に示す．同図中には注入井戸から約 2m 離れた地層表面点の圧力の時間変化を示している．同図中，緑色のプロットが粗視化積分演算，青色が並列積分演算である．また，図は全時間領域を 8 分割しており，各時間領域の境界を赤線で区切ってある．Parareal 法の適用性を検討するため，比較対象として，逐次積分演算の結果を黄色のプロットであわせて示した．最初の反復（$r = 1$）では，各プロセスでの並列積分演算は粗視化積分演算の結果を初期値としているため，各時間領域で圧力値が不連続になっている．加えて，並列積分演算と粗視化積分演算の結果は逐次積分演算結果と比較しても異なっている．しかし，反復回数の増加に伴い，並列積分演算の結果が逐次積分演算の結果に漸近した．最終的に，7 回の反復回数（$r = 7$）で全プロセスで式(11)の収束条件を満足した．この結果より，Parareal 法により妥当な計算結果が得られることを確認した．

(4)　Parareal 法適用の効果

図-4 は時間領域の並列数と演算時間の関係を示している．並列数を増やすことにより計算時間が短縮されて

おり，今回のシミュレーションでは，Parareal 法適用により，64 並列で約 10 倍高速化できている．

図-5 は Parareal 法の反復数と時間領域間の不整合（式(11)の左辺）の最大値をプロットしたものである．**図-5** から反復数の増加に伴い，各時間領域間の不整合が修正されていることが確認される．

今回の問題は 2 次元放射状モデルであったため，時間領域間の通信時間及び粗視化積分演算の時間が並列積分演算の時間と比較して短く，理想的な加速性能を得ることができた．すなわち，今回のように空間領域に対して相対的に，時間領域が大きい問題において時間並列化計算は有効であると考えられる．

4. まとめ

時間並列計算手法である Parareal 法を地下流体シミュレータに実装し，地下水流動シミュレーションへの適用性を検討した．その結果を以下にまとめる．

・地下水流動シミュレーションに Parareal 法を適用した結果，正確なシミュレーション結果と同等の結果が得られたことを確認した．

・今回の例題に対しては，Parareal 法を適用することで，地下水流動シミュレーションの計算時間を最大約 10 倍高速化できることが分かった．

・実問題では，物理量の空間分布が複雑でかつ非線形性も強くなるため収束性の悪化が予想される．そのため Parareal 法の反復計算の収束性を向上させる研究がより一層必要である．

今後は，ここで開発した時間並列計算手法を空間並列計算手法と組み合わせて，時空間並列計算手法として統合し，より実用的で高速なシミュレータ開発を目指したい．

参考文献

1) Nievergelt, J. : Parallel methods for integrating ordinary differential equations, *Communications of the ACM*, p.731, 1964.
2) Lions, J., Maday, Y. and Turinici, G. : A parareal in time discretization of PDEs, *C.R. Acad. Sci. Paris*, Serie Ⅰ, 332, p.661, 2001.
3) 高見利也，西田晃：時間方向並列化の線形計算への適用可能性，情報処理学会研究報告，2011.
4) Pruess, K. : ECO2N : A TOUGH2 Fluid Property Module for Mixtures of Water, Nacl and CO_2, Earth science division, *Lawrence Berkeley National Laboratory Report*, LBNL-57952, 2005

APPLICATION OF PARALLEL COMPUTATION METHOD IN TIME FOR GROUNDWATER FLOW SIMULATION

Atsuhiro MIYAGI, Hajime YAMAMOTO, Toshiya TAKAMI, Mikio IIZUKA, Kenji Ono, Kengo NAKAJIMA

A computer performance is recently developed and supercomputers are in practice. Applying the space domain decomposition method computing subspace in each CPU for a large scale simuation has been studied to leverage supercomputers. The time domain decomposition method is state-of-the-art as a method to efficiently use supercomputers. In this research, applicability of Parareal, which is one of the time domain decomposition method, was investigated for a groundwater simulation. As a result, Parareal with 64 CPUs contributed about 10 times speed-up in groundwater simulation on a radial flow model.