

領域分割法を用いたQSIスキームによる 移流拡散方程式の並列計算法

DOMAIN DECOMPOSITION METHOD FOR ADVECTION-DIFFUSION EQUATIONS WITH QSI SCHEME

牛島 省¹・榑津 家久²・奥山 洋平³

Satoru USHIJIMA, Iehisa NEZU and Yohei OKUYAMA

¹ 正会員 工博 京都大学大学院助教授 環境地球工学専攻 (〒606-8501 京都市左京区吉田本町)

² フェロー 工博 京都大学大学院教授 環境地球工学専攻

³ 学生員 京都大学 工学部 地球工学科

This paper concerns a parallel computation method for advection-diffusion equations using a distributed memory system. The governing equations discretized with a finite difference method are solved with a domain decomposition method which has overlap grid points. The advection terms are discretized with a QSI scheme and upwind difference methods to compare their accuracy and efficiency. The computational time and speedup are modeled with the numbers of the grid points, N_c and N_m , which are used in the computations and message passing respectively, in addition to the processor number p . As a result of the parallel computations, it has been shown that the proposed model reasonably represents the characteristics of the speedup and that the parallel computation is particularly advantageous in the QSI scheme in terms of the speedup and numerical accuracy.

KeyWords : parallel computation, domain decomposition method, QSI scheme, advection-diffusion equation, speedup

1. はじめに

乱流渦の挙動を直接求める流体計算や自然地形あるいは水理構造物形状を正確に扱う水理計算においては、空間的解像度の高い格子分割を用いる必要があり、大規模な計算が行われることが多い。しかし、計算時間の制約により、適切な格子配置が設定されないケースや低精度のスキームが用いられる場合が少なくない。このため、大規模計算を効率よく行う並列計算手法を導入することは、計算時間のみならず計算の精度を向上させるためにも重要な研究課題であると考えられる。

本報では、移流拡散方程式を有限差分法で離散化する場合の解法について考察する。計算機環境としては、近年一般的となったPCクラスタに代表される分散メモリシステムを利用し、大規模な偏微分方程式の並列計算法として有効な領域分割法¹⁾に基づく解法を扱う。

離散化手法としては、移流項に対する計算スキームに重点を置き、QSIスキーム²⁾を含めたいくつかの手法について比較検討を行う。最初に、逐次計算における計算時間と精度をQSIスキームと5次風上差分の間で比較し、粗格子上でも精度の高いQSIスキームを高速化する解法が有効であることを示す。次に、格子点

がオーバーラップする領域分割法に基づき、MPI³⁾を利用した並列計算手法を作成して、これを移流拡散問題に適用する。

本報ではこの並列計算のパフォーマンスに関する検討を加え、基礎式が計算される格子点とメッセージパッシングが行われる格子点数の比、そしてプロセッサ数に着目して、計算時間とスピードアップを評価するモデル式を提案する。最後に、移流拡散問題の並列計算を行い、スピードアップに対する格子点数比および計算負荷などの影響が、モデル式により適切に近似されること、また並列計算法はQSIスキームを用いた移流拡散計算に対して特に有効であることを示す。

2. 計算法

(1) 領域分割と格子点のオーバーラップ

スカラー量 ϕ の移流拡散方程式は次式で与えられる。

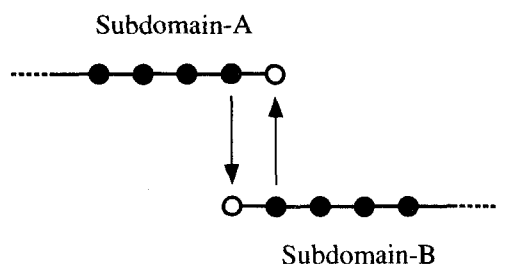
$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + u_j \frac{\partial \phi}{\partial x_j} = \alpha \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_j \partial x_j} \quad (1)$$

ここに、 u_i は x_i 方向の流速成分、 α は拡散係数である。(1) 式を有限差分法を用いて離散化し、これに適切な初期条件と境界条件を与えたときに、ある時刻の

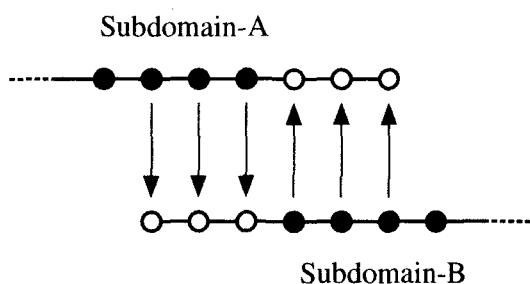
解の分布 $\phi(t, x_i)$ を計算する問題を考える。分散メモリシステムを利用して、この問題を領域分割法により解く場合には、分割した領域間で一部の格子点をオーバーラップ (重合) させ、その変数値をメッセージパッシングにより受け渡す方法がとられる。1次元場において、(1) 式を離散化した結果が次式のように表されるとする。

$$\phi_j^{n+1} = f(\phi_k^n), \quad k = j, j \pm 1, \dots, j \pm m \quad (2)$$

上式は、格子点 j における $n+1$ ステップの値 ϕ_j^{n+1} が、点 j の前後に位置する m 個の ϕ^n の値を使って計算されることを示している。たとえば、移流項に1次風上差分、拡散項に中央差分を用いる場合、 $m=1$ となる。このときには、図1(a)に示すように、各分割領域に1点ずつオーバーラップ格子点を設定する。図1(a)の分割領域 A, B では、端部の変数 (図中の○の格子点) を境界条件として使用し、計算領域内 (●の格子点) の ϕ^{n+1} の値が求められる。値を更新した後、 ϕ^n を矢印のように交換して、再び ϕ^{n+1} を求める計算が継続される。



(a) オーバラップ格子点が1個の場合



(b) オーバラップ格子点が3個の場合

図-1 1次元場における格子点のオーバーラップ

これに対して、(1) 式の各項の離散化の精度を向上させると、一般に m の値が増加するため、オーバーラップ格子点をより多く設定する必要が生ずる。例えば、3次風上差分 (KK スキーム)⁴⁾ では $m=2$ 、5次風上差分⁵⁾ および QSI スキーム²⁾ では $m=3$ となり、図1(b)のように3個のオーバーラップ格子点を設ける。

2次元あるいは3次元の問題では、領域の分割の仕方として複数の方法があるが、本報ではある一方向に均等に領域分割を行う場合を扱う。この場合には、図

2に示すように、2次元ではオーバーラップ格子点を含んだデータ列、また3次元では同様のデータ面を分割領域間で交換することになる。なお、多次元場において分割面に直交する境界面上の変数値が各分割領域内で境界条件から定められる場合には、これらに対する値の交換は不要となる。

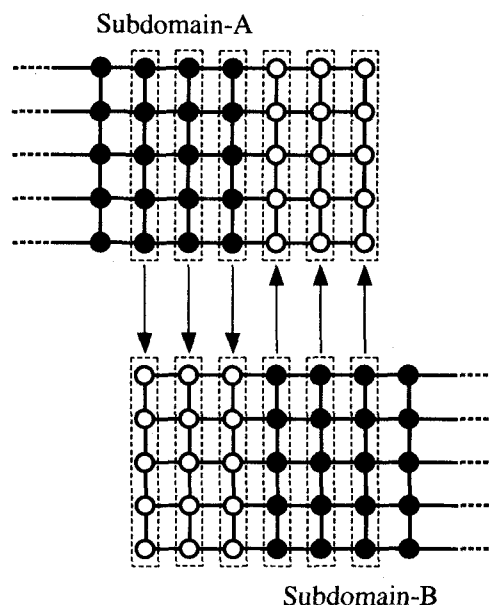


図-2 2次元場におけるデータ列の交換 (オーバーラップ格子点3個の場合)

3. 計算結果と考察

(1) 計算対象とする移流拡散問題と離散化法

本報では、2次元および3次元の移流拡散問題を計算対象として、計算時間と精度に関する考察を行う。

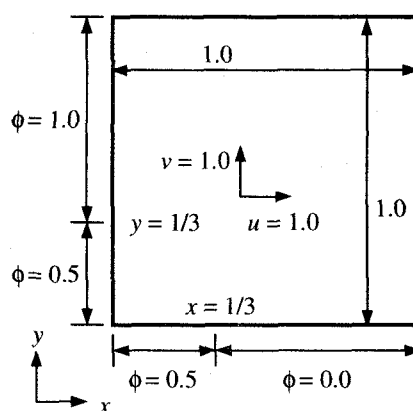


図-3 2次元移流拡散問題の計算条件

図3に示すように、2次元問題では一辺の長さが1の正方形の領域において、 $u = v = 1$ の流速分布を与えたとき、図中に示した上流側の境界線上の ϕ の分布が移流拡散される過程を考える。また、3次元問題では、図4に示すように、一辺が1の立方体の計算領域

において、 $u = v = w = 1$ の流速分布を与え、 $z = 0$ において $\phi = 1$ 、 $x = 0$ および $y = 0$ において $\phi = 0$ という境界条件を設定し、これらが計算領域内で移流拡散される過程を考える。いずれの問題においても、初期値は $\phi = 0$ とし、下流側の境界では $\partial\phi/\partial n = 0$ なる境界条件が成り立つものとする。

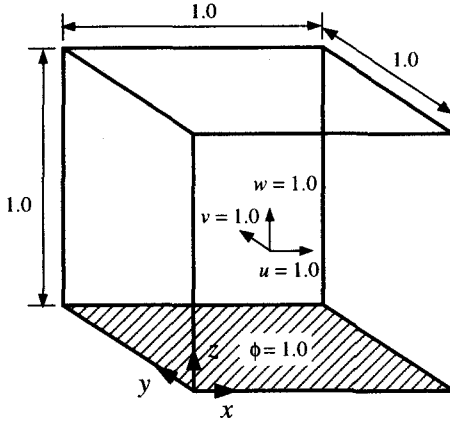


図-4 3次元移流拡散問題の計算条件

(1) 式の離散化には、時間項に Euler 陽解法、拡散項に 2 次中央差分を用い、移流項には、計算時間と精度の比較のため、1 次風上差分、3 次風上差分、5 次風上差分、そして QSI スキームの 4 手法を適用する。1 次風上差分以外の計算手法においては、数値振動を抑制するため、同一の MMT フィルタ⁶⁾を用いる。並列計算を行う場合には、計算領域を x 方向に p 個の均等な領域に分割し、これらを分割領域数と同じ p 個のプロセッサにより解析する。分割面には、使用するスキームに応じたオーバーラップ格子点を設定する。

(2) 逐次計算における計算時間と移流計算の精度

領域分割による並列計算に先立ち、逐次計算により上記の移流拡散問題を解析するときの計算時間と移流項に対する計算精度を確認する。

2 次元あるいは 3 次元の計算領域に N_g 個の計算格子点を配置した場合、実際に移流拡散計算が行われる格子点数 N_c は、 N_g から境界面上の格子点数を除いた値となる。図 5 は、QSI スキームと 5 次風上差分を用いて 3 次元移流拡散問題を逐次計算したときの N_c と計算時間 T_c の関係を示すものである。図中で $N_{co} = 638 \times 18 \times 18 = 206,712$ であり、 T_{co} は $N_c = N_{co}$ のときの各スキームの T_c である。離散化式の計算内容から想定される結果ではあるが、QSI スキームおよび 5 次風上差分のどちらの場合でも、移流拡散計算に要する計算時間は N_c とほぼ比例する。QSI スキームおよび高次風上差分では、境界面近傍において内部と異なる計算手法が用いられるため、厳密には

N_c 個の格子点で計算負荷は均等ではない。しかし、図 5 に示されるように、その影響は顕著には現れず、 T_c と N_c はほぼ線形関係にあると見なせる。このことは、領域分割法に代表されるデータパラレル型の並列化を行う場合、通信等に要するオーバーヘッドが無視できると仮定すると、使用するプロセッサ数に比例するスピードアップが期待されることを示している。

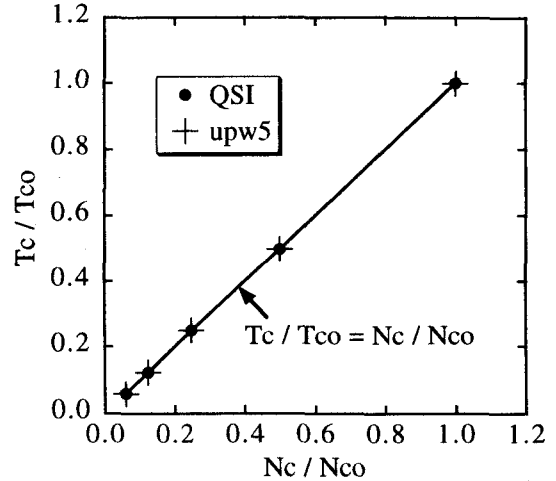


図-5 正規化した計算時間と格子点数の関係 (逐次計算の結果)

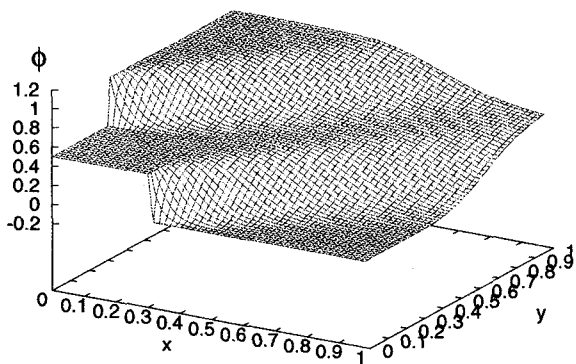
次に、移流項に対する計算精度を比較するため、拡散係数を $\alpha = 0$ とし、2 次元移流問題を解析した。計算格子点数を $N_g = 60 \times 60$ とし、クーラン数を 0.12 とし、 $t = 1.0$ まで計算したときの各スキームの計算結果を図 6 に示す。

この結果に対して、 $(x, y) = (0, 1)$ および $(1, 0)$ を結んだ対角線上の ϕ の分布が有する計算誤差を比較したものが図 8 である。ここで、誤差 err は次式で定義される計算値と理論値の差のノルムである。

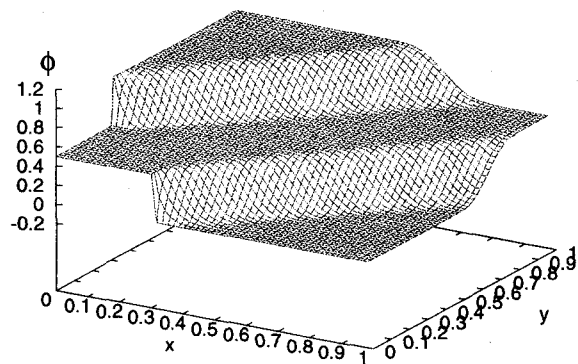
$$err = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N (\phi_{jc} - \phi_{j0})^2} \quad (3)$$

ここに、 ϕ_{jc} と ϕ_{j0} は計算値と理論値で、総和は対角線上の値についてのみ取っている。

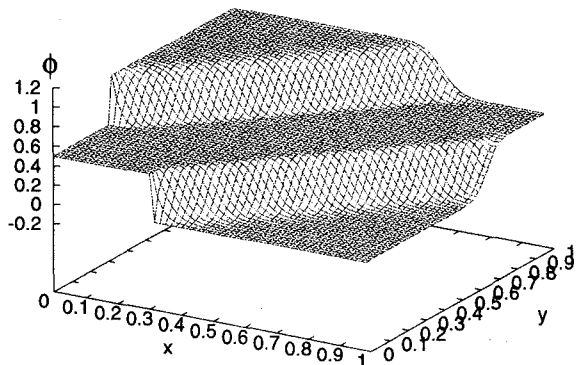
QSI スキームは図 8 の結果に示されるように、同一の格子数では 5 次風上差分よりも精度が高い。しかし、同スキームは 5 次風上差分と比較してより多くの計算時間を必要とする。このため、5 次風上差分で N_g を増加させたときの計算時間と計算誤差を QSI スキームの結果と比較した。これを図 9 に示す。すべての計算において、同一のクーラン数 (0.12) となる Δt を用い、 $t = 1.0$ まで計算を行った。図中の T_{co} は、 $N_g = 240 \times 240$ のときの 5 次風上差分の T_c である。また、図中の QSI スキームのプロットは、 $N_g = 60 \times 60$ なる粗格子上の



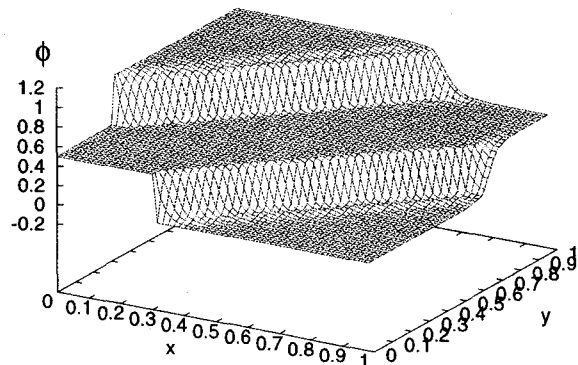
(a) 1次風上差分による計算結果



(b) 3次風上差分による計算結果

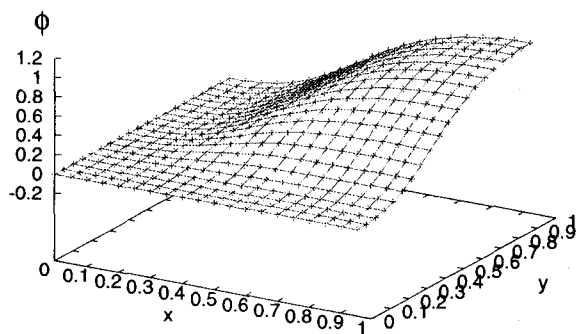


(c) 5次風上差分による計算結果

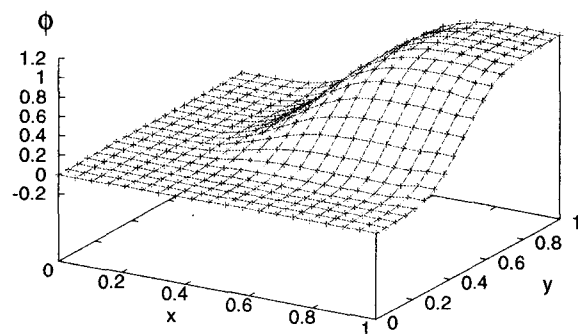


(d) QSI法による計算結果

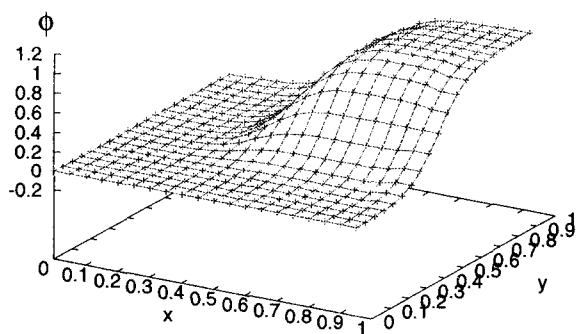
図-6 2次元移流問題の計算結果



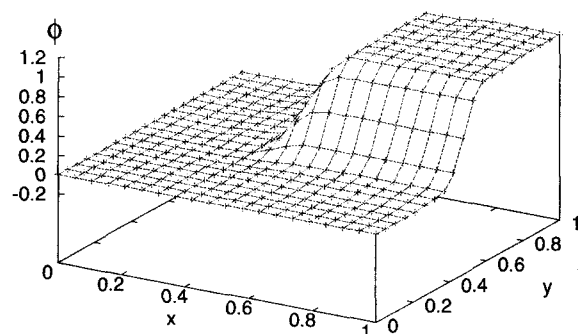
(a) 1次風上差分による計算結果



(b) 3次風上差分による計算結果



(c) 5次風上差分による計算結果



(d) QSI法による計算結果

図-7 3次元移流問題の計算結果

結果である。図9の5次風上差分の結果では、格子点数を増加させると計算誤差の減少は鈍化する傾向にあり、より粗い格子配置におけるQSIスキームの精度には到達していない。

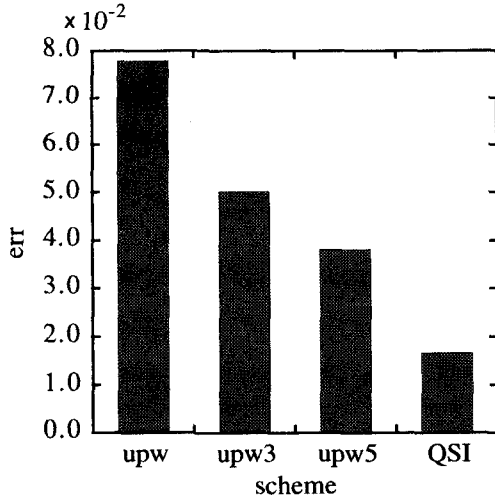


図-8 2次元移流計算の誤差の比較

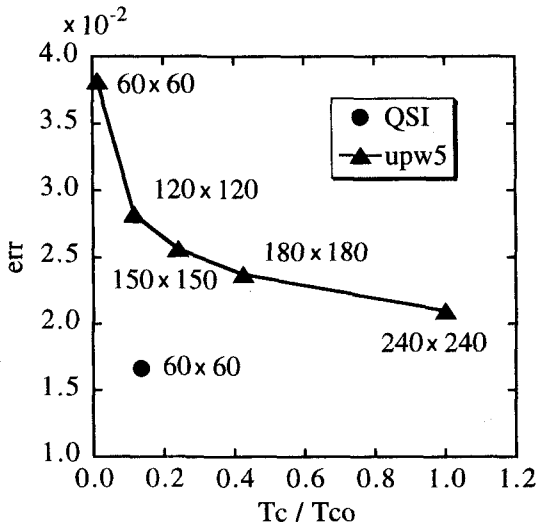


図-9 2次元移流問題の計算時間と精度の比較
(図中の数値 $n \times n$ は全格子点数 N_g)

以上の結果から、1) 移流拡散計算に対してデータパラレル型の並列化を行う領域分割法が適用できること、2) 少ない格子点数でも計算精度が比較的高いQSIスキームに対して、計算時間を短縮化するための方策を適用することが有効であること、が示された。

(3) 並列計算のパフォーマンスに関する考察

データパラレル型の並列計算における計算時間 T_c は、一般に入力の大きさとプロセッサ数の関数であるとされる⁷⁾。1ステップの計算においてメッセージパッシングされる全格子点数(あるいはオーバーラップ全格子点数)を N_m とするとき、多次元の移流拡散問題においては、 N_m がプロセッサ数 p により一意的に定ま

らないため、ここでは計算時間 T_c が N_c , N_m , p に依存すると考える。図5の結果から、分割領域における計算時間は N_c/p にほぼ比例する。また、隣接する分割領域間のメッセージパッシングが計算領域全体でほぼ同時に行われると仮定し、通信のオーバーヘッドが通信量に比例すると考えれば、これは N_m/p の1次関数として近似される。従って、

$$T_c(N_c, N_m, p) = k_1 \frac{N_c}{p} + k_2 \frac{N_m}{p} + k_3$$

$$\approx k_1 \frac{N_c}{p} + k_2 \frac{N_m}{p} \quad (4)$$

(4) 式で k_i は定数であり、簡単のため $k_3 = 0$ とした⁷⁾。(4) 式右辺第1項が移流拡散計算、第2項がメッセージパッシングに要する時間に相当する。このとき、逐次計算に要する計算時間を(4)式の T_c で除した値として定義されるスピードアップ S は次式で表される。

$$S(N_c, N_m, p) = \frac{k_1 N_c}{k_1 N_c/p + k_2 N_m/p}$$

$$= \frac{k_1 \gamma_{cm} p}{k_1 \gamma_{cm} + k_2} \quad (5)$$

ここに、 $\gamma_{cm} = N_c/N_m$ である。

係数 k_1 と k_2 は、使用する計算機環境に依存する。同一のプロセッサにおいては、QSIスキームのように1格子点あたりの計算の負荷が比較的大きい手法では k_1 は大きい値となり、負荷の小さい低次の風上差分では k_1 は小さくなる。また、 k_2 は主として通信性能に依存する。(5) 式より、一般的な傾向として、 γ_{cm} が十分大きくなるとスピードアップは p へ漸近する。また、同一の γ_{cm} においては、 k_1 が大きいスキームのスピードアップは、 k_1 が小さいものより大きく、効率が低いことが予想される。

(4) 並列計算の結果

並列計算に利用した計算機は、CPUがPentiumIII 850MHzであり、OSをLinux 2.2.13とする5台のPCで、スイッチングハブを介して100BaseTXで接続されている。プログラム中には、MPI³⁾ 準拠の通信コマンド等を含んだライブラリを提供するLAM (<http://www.mpi.nd.edu/lam/>) を利用した。

最初に、拡散係数を $\alpha = 0$ とした3次元移流問題を2台のPCを使用して並列計算した。各スキームで計算された $z = 0.5$ における $x-y$ 平面上の ϕ の分布を図7に示す。格子点数は $N_g = 20 \times 20 \times 20$ とし、 x 方向に2領域分割を行った。数値拡散により、計算精度が低いスキームほど ϕ の分布が拡散した結果となる。また、 $\alpha = 0.01$ とした移流拡散問題を逐次計算と並列計算の2方法で解析した結果、各スキームの並列計算の結果は逐次計算の結果と数値的に同一のものと

なった。これより、オーバーラップ格子点の変数の扱いやメッセージパッシングにおける数値精度などに誤りがないことが確認された。

次に、3次元移流拡散問題に対して、 $y-z$ 断面内の格子点数を 20×20 と固定し、 x 方向の格子点数のみを変えることで γ_{cm} を変化させ、QSI スキームと5次風上差分のスピードアップを比較した。プロセッサ数 p を4としたときの結果を図10に示す。計算結果は(5)式で示される傾向に従うものとなっている。なお、実際の計算では、 k_2/k_1 は一定ではなく、その平均値と標準偏差は、QSI スキームで0.45および0.098、また5次風上差分で1.47および0.44という値となった。これは、通信等のオーバーヘッドが厳密には N_m/p の1次関数として表せないこと、また通信量が両端とそれ以外の分割領域では等しくないことなどが原因であると考えられる。図10中の近似曲線 approx-A および B は、それぞれ(5)式の k_2/k_1 に上記の平均値を用いた分布である。

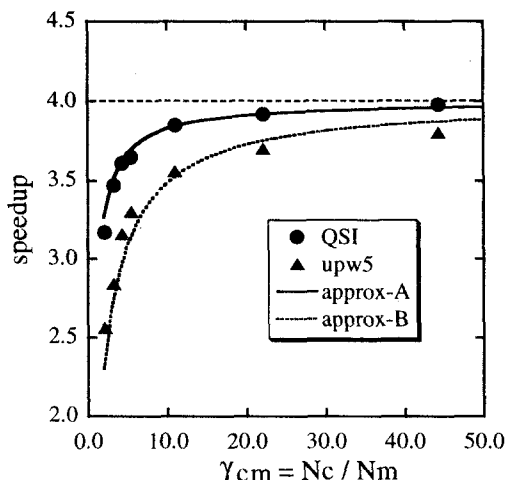


図-10 スピードアップと N_c/N_m の関係 (プロセッサ数4の場合)

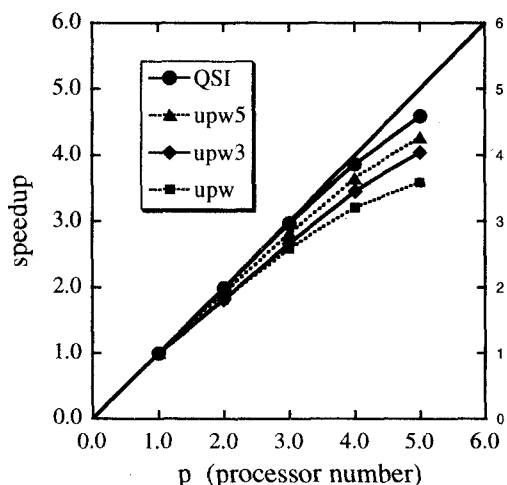


図-11 3次元計算におけるスピードアップとプロセッサ数の関係 ($\gamma_{cm} = 13.2$ の場合)

$\gamma_{cm} = 13.2$ としたときの各スキームにおけるプロセッサ数とスピードアップの関係を図11に示す。1格子点あたりの計算負荷が比較的大きい高次精度のスキームにおいてスピードアップが高い結果となった。この結果は、(5)式の傾向と一致する。

以上の結果から、領域分割法に基づく移流拡散問題の並列計算におけるスピードアップは(5)式で近似できることが示された。また、スピードアップの傾向を考慮すると、この並列計算法は、QSI スキームを用いた移流拡散計算に対して特に有効である。

4. おわりに

本報では、有限差分法により離散化された移流拡散方程式に対して、格子点がオーバーラップする領域分割法に基づく並列計算法を作成するとともに、計算時間とスピードアップに関するモデル式を示し、プロセッサ数や格子点数の比 γ_{cm} の影響を考察した。並列計算法を移流拡散問題に適用した結果、スピードアップに対する γ_{cm} および計算負荷などの影響が、モデル式により適切に表現されることが示された。この並列計算法は、QSI スキームを用いた移流拡散計算に対して有効である。今後は、非圧縮性流体の圧力計算を含めた並列化について検討を進める予定である。

参考文献

- 1) A. Quarteroni and A. Valli. *Domain decomposition methods for partial differential equations*. Oxford Science Publications, 1999.
- 2) 牛島省, 瀬津家久, 山上路生, 坂根由季子. 5次スプライン関数を用いた移流項の高次精度解析手法 (QSI法) の提案. 水工学論文集, Vol. 45, pp. 571-576, 2001.
- 3) W. Gropp, E. Lusk and A. Skjellum. *Using MPI*. The MIT Press, 1994.
- 4) T. Kawamura and K. Kuwahara. Computation of high Reynolds number flow around a circular cylinder with surface roughness. *AIAA Paper*, Vol. 84-0340, , 1984.
- 5) 本田逸郎, 丹野雅之, 大庭英樹. 高次精度差分スキームを用いた二次元キャビティー流れの数値解析. 日本機械学会論文集 (B 編), Vol. 60, No. 578, pp. 3287-3291, 1994.
- 6) S. Koshizuka, Y. Oka, S. Kondo, and Y. Togo. Interpolating matrix method: A finite difference method for arbitrary arrangement of mesh points. *J. Comput. Phys.*, Vol. 75, pp. 444-468, 1988.
- 7) Peter S. Pacheco. *Parallel programming with MPI*. Morgan Kaufmann Publishers, 1997.

(2001. 10. 1受付)