

時間並列計算手法を用いた地下水流動シミュレーションの高速化

大成建設	技術センター	社会基盤技術研究部	正会員	○ 宮城	充宏
大成建設	技術センター	社会基盤技術研究部	正会員	山本	肇
大分大学	理工学部	共創理工学科		高見	利也
九州大学	情報基盤研究開発センター			飯塚	幹夫
九州大学	情報基盤研究開発センター			小野	謙二
東京大学	情報理工学系研究科			中島	研吾

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。このような超並列計算機を効率よく使用するために、各部分領域の計算を複数の 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。これにより、100 億自由度を越える大規模問題を解くことが可能となっている。大規模な数値シミュレーションにおいては、空間領域を CPU 毎に分割し処理する空間領域分割法が多くの場合用いられている。

一方、中～小規模の問題（数 10 万～数 100 万自由度）を多くの時間ステップで解くニーズも存在する。例えば、放射性廃棄物の地層処分や二酸化炭素地中貯留における数千年～数万年にわたる超長期の地下水シミュレーションでは、非線形性の強い大規模なモデルを十分な時空間精度で解くため、多大な計算コストが必要となる場合がある。

このような問題に対しては、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。その中でも、既存アプリケーションへの適用を比較的容易とした Parareal 法(Lions, et al., 2001)が注目されている。しかし、Parareal 法の適用性はアプリケーションに大きく依存することがわかっている。

そこで本報では、時間並列化アルゴリズム Parareal 法を汎用地下水分析コード TOUGH2 に実装し、地下水流動シミュレーションへの適用性を検証した。

2. Parareal 法の概要

Parareal 法は詳細な時間間隔で解を求める厳密な演算と粗い Δt で近似的に解く粗視化演算を組み合わせ、反復計算により求解する手法である。厳密な演

算は複数の CPU を用いて分割された時間領域について並列計算し、粗視化演算は単一の CPU を用いて全時間領域を逐次計算する。

ここでは、全時間領域を $i = 1 \sim n$ に分割して並列に解く問題を例に、Parareal 法の計算方法を簡単に説明する。通常の時間発展計算では、時間領域 $i + 1$ の初期時刻 t_{i+1} における主変数値 $u(t_{i+1})$ を、隣接する時間領域 i の $u(t_i)$ から求める。

$$u(t_{i+1}) = F_i(u(t_i)) \quad t_i \in \Gamma = [0, T] \quad (1)$$

ここで、 t_i : 全時間領域 $\Gamma = [0, T]$ 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 : 並列で厳密な演算子、である。しかし、式(1)は隣接する時間領域の解が依存関係にあることを示しており、各時間領域を並列に計算すると解の不整合が生じる。この問題に対して、Parareal 法は以下の式を用いて、時間領域間の解の不整合を修正する。

$$u(t_{i+1})^{r+1} = F_i(u(t_i)^r) + C_i(u(t_i)^{r+1}) - C_i(u(t_i)^r) \quad (2)$$

ここで、 C : 粗視化演算子、 r : Parareal 法による反復回数、である。反復回数 r の増加に伴い、式(2)により解の不整合が修正されることで、全時間領域における計算が収束する。

3. 動作検証シミュレーション

簡易的な地下水流動シミュレーションを実施して、Parareal 法を実装した TOUGH2 の動作を検証した。解析モデルの形状は半径約 10 km、層厚 45m の放射状モデルとし、水平方向に 60 分割、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、中心の全層に連結する鉛直の井戸から年間約 45 万トンで 50 年間注水する地下水問題を考えた。深度約 1km を想定し、初期の温度と圧力は 45°C 、10MPa とし、モデルの上下面及び側面は不透水境界とした。

Parareal 法の計算フローの実装にあたり、TOUGH2 のソースコードを改変し、その内部において粗視化演算と厳密な演算を行う仕組みとした。厳密な演算の Δt は 12 時間で固定し計算する。粗視化演算では、ある程度の計算誤差を許容し、厳密な演算より大きな Δt で計算する。これら 2 つの演算を用いた反復計算の収束判定については (Miyagi, et al, 2018) を参照されたい。

今回の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の断面図を図 1 に示す。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。

4. Parareal 法の適用性評価

まず、Parareal 法の収束過程を確認し、計算結果の妥当性を示す。図 2 には、注入井戸から約 2m 地点の圧力の時間変化を示す。同図中、緑色のプロットが粗視化演算、青色が厳密な演算結果である。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いる。Parareal を用いた計算結果と比較するため、全時間領域を単一 CPU で計算した厳密計算結果（正確な計算結果）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、各時間領域で圧力値の不整合が確認される。加えて、注水開始から 25 年以降で、Parareal 法を用いた計算結果が単一 CPU での計算結果と大きく異なっていることがわかる。しかし、反復回数の増加に伴い、各時間領域の解が修正され、最終的に、7 回の反復回数 ($r = 7$) で収束した。図 2 では、Parareal 法を適用した時間並列計算の収束結果が正確な計算結果に漸近していることがわかる。

図 3 は時間領域の分割数を 1、4、8、16、32、64 としたケースについて、並列数と計算時間の関係を示している。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 倍高速化できることがわかった。

5. まとめ

時間並列化アルゴリズムである Parareal 法を汎用地下流体シミュレーター TOUGH2 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、今回の例題に対しては、Parareal 法を適用した時間並列計算により、正確な計算結果が得られ、計算時間も最大約 10 倍高速化できることが分かった。

今後は、時間並列計算手法を空間並列計算手法と

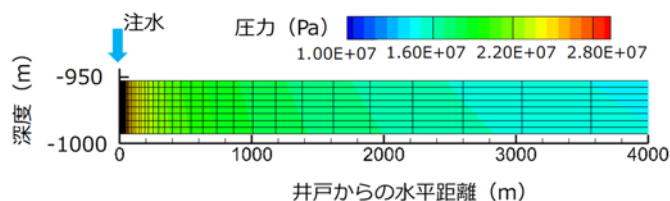
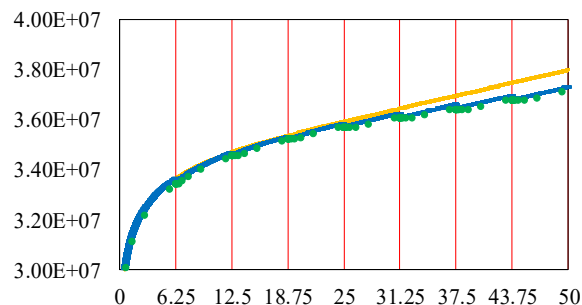
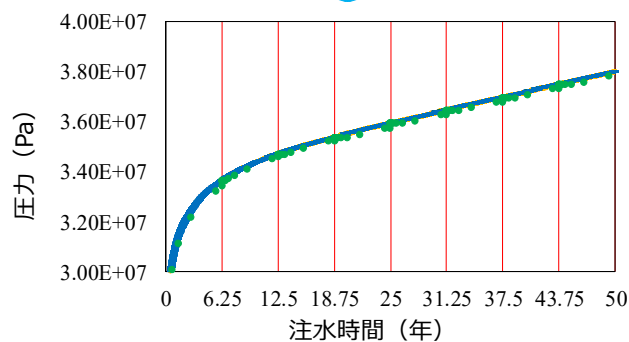


図 1 地下水流動シミュレーションの圧力分布 (放射状モデル)

$r=1$ (Parareal法の反復回数)



$r=7$



● 粗視化演算結果 — 厳密な演算結果 — 正確な計算結果

図 2 Parareal 法の反復計算によって修正される地下水流動シミュレーションの圧力分布

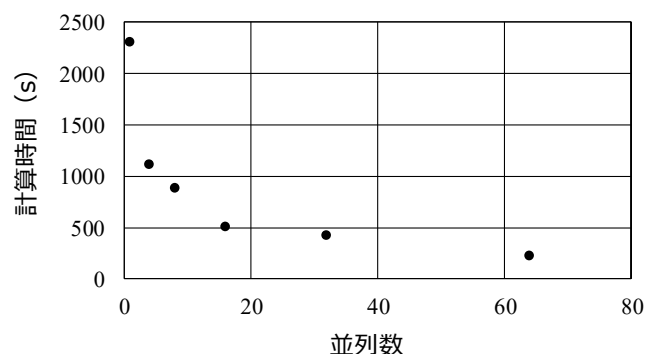


図 3 並列数と計算時間の関係

組み合わせて、時空間並列化手法として統合し、より実用的で高速なシミュレータを開発したい。

参考文献

- 1) 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.
- 2) Miyagi, A., Yamamoto, H., Takami, T., Iizuka, M., Kenji, O. and Kengo, N. Parallel in Time Integration Algorithm to Groundwater Simulation. Report of Taisei Technology Center, No.51, 2018