

第II部門 重合格子点を有する領域分割法を用いた移流拡散方程式の並列計算

京都大学大学院 正会員 牛島 省
 京都大学大学院 フェロー 瀬津 家久
 京都大学工学部 学生員 ○奥山 洋平

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は大規模な計算が行われることが多い。この大規模な計算に並列計算手法を導入することは、計算時間の短縮だけでなく計算精度の向上にもつながると考えられる。本報では重合格子点（オーバーラップ格子点）を有する領域分割法に基づき、MPI¹⁾を利用した移流拡散方程式の並列計算手法について考察する。

2. 領域分割法による移流拡散方程式の並列計算手法

スカラー量 ϕ の移流拡散方程式は次式で与えられる。

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

ここで、 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、適当な初期条件と境界条件を与え、ある時刻のスカラー分布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交換により受け渡す方法がとられる。1次元場において(1)式を離散化した式が次式のように表されるとする。

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

(2) 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。QSI スキーム²⁾では $m=3$ である。この時には、図1に示すように、各分割領域に3点ずつオーバーラップ格子点を設定する。図1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、計算領域内（●の格子点）の ϕ^{n+1} の値が求まる。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。

3. 並列計算による計算時間とスピードアップに関する考察

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³⁾。計算領域に設定された格子点中の境界面上の格子点を除いた格子点数（実際に計算される格子点数）を N_c 、全オーバーラップ格子点数を N_m 、またプロセッサ数 p をとおく。逐次計算の結果、図2に示すように N_c と計算時間 T_c はほぼ比例するので、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、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、通信時間が通信量に比例すると考えれば、通信時間は N_m/p の一次関数として近似できる。従って、 T_c は次式で表される。

$$T_c(N_c, N_m, p) = k_1 \frac{N_c}{p} + k_2 \frac{N_m}{p} + k_3 \approx k_1 \frac{N_c}{p} + k_2 \frac{N_m}{p} \quad (3)$$

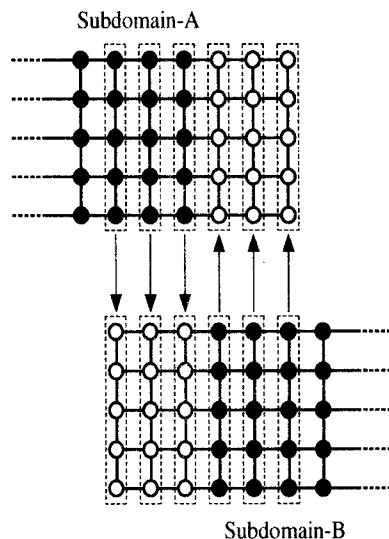


図1 2次元場におけるデータ列の交換（オーバーラップ格子点3個の場合）

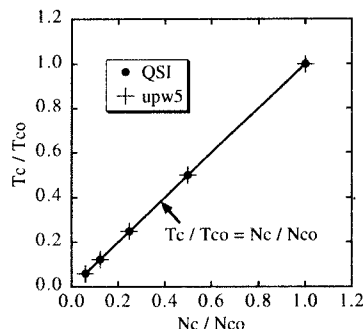


図2 計算時間と格子点数の関係（逐次計算の結果）

この時、逐次計算に要する計算時間を (3) 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。

$$S(N_c, N_m, p) = \frac{k_1 N_c}{k_1 N_c / p + k_2 N_m / p} = \frac{\gamma_{cm} p}{\gamma_{cm} + k_2 / k_1} \quad (4)$$

ここで、 $\gamma_{cm} = N_c / N_m$ である。係数 k_1 は 1 格子点あたりの計算負荷、係数 k_2 は通信性能にそれぞれ依存している。(4) 式より、 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ほうがスピードアップ S は大きく、効率が高いことが予想できる。

4. 並列計算の結果とモデル式の比較

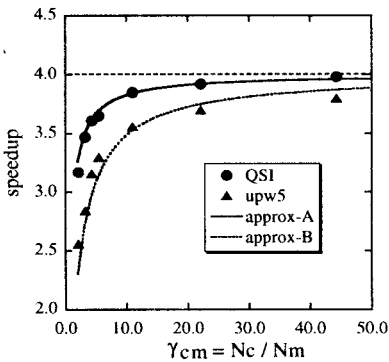


図3 スピードアップと N_c / N_m の関係 ($p = 4$ の場合)

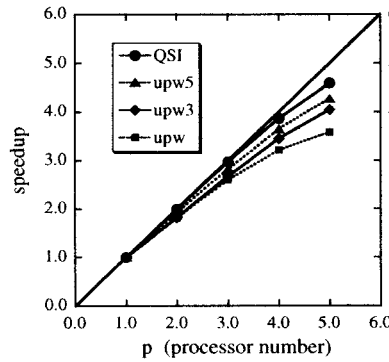


図4 スピードアップとプロセッサ数の関係 ($\gamma_{cm} = 13.2$ の場合)

並列計算に利用した計算機は、CPU が PentiumIII850MHz 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、MPI 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。

まず、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 に固定し、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 とした時の結果を図 3 に示す。計算結果は (4) 式の傾向に従うものになっている。図 3 の近似曲線 approx は実際の計算での k_2 / k_1 の平均値を用いて、(4) 式の関係を示したものである。

次に、 $\gamma_{cm} = 13.2$ 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 4 に示す。1 格子点あたりの計算負荷が比較的大きい高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。これは (4) 式の傾向と一致している。以上より、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 (4) 式で近似できることが示された。また、並列計算法は QSI スキームなどの高精度スキームを用いた移流拡散計算に対して有効である。

5. おわりに

本報ではオーバーラップ格子点を有する領域分割法による移流拡散方程式の並列計算法を示し、スピードアップに関するモデル式を提案した。このモデル式は実際の計算結果と概ね一致することが示された。

参考文献

- 1) T.Kawamura and K.Kuwahara. Computation of high Reynolds number flow around a circular cylinder with surface roughness. *AIAA Paper*, Vol.84-0340,1984.
- 2) 牛島 省, 棚津 家久, 山上 路生, 坂根 由希子. 5 次スプライン関数を用いた移流項の高精度解析手法 (QSI) の提案. 水工学論文集, Vol.45, pp. 571-576,2001.
- 3) Peter S.Pacheco. *Parallel programming with MPI*. Morgan Kaufmann Publishers,1997.