

OpenMPによるFDTD法の高速化に関する一検討

愛媛大学大学院 学生員 ○徳永淳一
愛媛大学大学院 正 員 中畑和之

1. はじめに

FDTD法は波動方程式を時間領域と空間領域で差分化し、その差分式を時間ステップごとに逐次計算することで対象領域内の波動場を数値的に求める方法¹⁾である。時間域の解法であるため、波動伝搬シミュレーションに適した手法である。しかしながら、対象領域全体をメッシュに分割する必要がある、メッシュの増加に伴って、計算時間が増加することが欠点として挙げられる。そこで本研究では、OpenMP²⁾をFDTD法に組み込むことによって、計算時間を短縮することを試みる。OpenMPとは、スレッド並列計算を行うための支援ツールであり、共有メモリ型計算機上で機能する。ここでは、SH波が伝搬する弾性波動場を考え、OpenMPを用いた並列計算によって、波動伝搬シミュレーションを行う。また、京都大学学術情報センターのスーパーコンピュータHPC2500を使用して、スレッド数を変化させた場合の計算効率について述べる。

2. 面外波動問題の離散化とOpenMPの導入

x_1 - x_2 平面において、 x_3 軸方向に偏向しながら伝搬するSH波を考える。このとき、 x_3 軸方向の粒子速度を v_3 、応力を τ_{31}, τ_{32} とすれば、SH波は次の波動方程式を満足する。

$$\rho \dot{v}_3(x, t) = \frac{\partial \tau_{31}(x, t)}{\partial x_1} + \frac{\partial \tau_{32}(x, t)}{\partial x_2} \quad (1)$$

また、構成式は次の2つの式で表される。

$$\dot{\tau}_{31}(x, t) = \mu \frac{\partial v_3}{\partial x_1} \quad (2)$$

$$\dot{\tau}_{32}(x, t) = \mu \frac{\partial v_3}{\partial x_2} \quad (3)$$

ここで、 ρ は密度、 μ はせん断弾性係数である。上式の $(\dot{})$ は時間微分 $\frac{d}{dt}$ を表す。

式(1)~(3)を空間領域および時間領域に対して、中心差分で近似し、 $k+1$ 番目の時間ステップの v_3 、および $k+\frac{1}{2}$ 番目の時間ステップの τ_{31}, τ_{32} について整理すると、

$$\begin{aligned} (v_3)_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}}^{k+1} &= \Delta t \frac{(\tau_{31})_{i+1, j+\frac{1}{2}}^{k+\frac{1}{2}} - (\tau_{31})_{i, j+\frac{1}{2}}^{k+\frac{1}{2}}}{\rho h_1} \\ &+ \Delta t \frac{(\tau_{32})_{i+\frac{1}{2}, j+1}^{k+\frac{1}{2}} - (\tau_{32})_{i+\frac{1}{2}, j}^{k+\frac{1}{2}}}{\rho h_2} + (v_3)_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}}^k \end{aligned} \quad (4)$$

$$\begin{aligned} (\tau_{31})_{i, j+\frac{1}{2}}^{k+\frac{1}{2}} &= (\tau_{31})_{i, j+\frac{1}{2}}^{k-\frac{1}{2}} \\ &+ \frac{\mu \Delta t}{h_1} \{ (v_3)_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}}^k - (v_3)_{i-\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}}^k \} \end{aligned} \quad (5)$$

$$\begin{aligned} (\tau_{32})_{i+\frac{1}{2}, j}^{k+\frac{1}{2}} &= (\tau_{32})_{i+\frac{1}{2}, j}^{k-\frac{1}{2}} \\ &+ \frac{\mu \Delta t}{h_2} \{ (v_3)_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}}^k - (v_3)_{i+\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}}^k \} \end{aligned} \quad (6)$$

となる。ここで、 h_1 と h_2 は、それぞれ x_1 と x_2 方向における格子間隔を示し、下付き文字 i と j はそれぞれ x_1 と x_2 方向における基準位置からの節点番号を示している。また、 Δt は時間間隔であり、解析を安定して実行するには、以下のCourant条件を満足する必要がある。

$$\Delta t \leq \frac{1}{c_T \sqrt{(\frac{1}{h_1})^2 + (\frac{1}{h_2})^2}} \quad (7)$$

ここで、 c_T は対象材料の横波音速である。式(4)~(6)より、ある整数次の時間ステップ k で求めた v_3 を用いて半整数次の時間ステップ $k+\frac{1}{2}$ における τ_{31} と τ_{32} が求まることになり、この作業を交互に実行することで順次解が求まる。

ある時間ステップ k において、要素の数に応じた i と j に関する逐次計算を実行する必要がある。Fortranでは、式(4)~(6)の i と j の演算はDOループ文で記述できる。OpenMPのループ構文³⁾を用いれば、これらの逐次計算は並列に処理できる。

3. FDTD法の精度および高速化の検証

3.1 FDTD法の精度検証

OpenMPにより高速化したFDTD法の精度を検証するために、同じ数値モデルをBEMで解析した結果とFDTD法で解析した結果を比較する。BEMによる解析法についてはNiwaらの論文⁴⁾を参考にしている。図-1に示すようなステンレス鋼($c_T = 3200\text{m/s}$, $\rho = 7850\text{kg/m}^3$)の中央に幅10mm、高さ2mmの矩形空洞が存在するモデルに対して、波動伝搬解析を行う。入射波は中心周波数2MHzのリッカー波を与えている。

探触子中央部の点において観測される波形を図-1に示す。FDTD法とBEMで得られた散乱波形は概ね一致しており、高速化したFDTD法は精度良く計算できることが示されている。

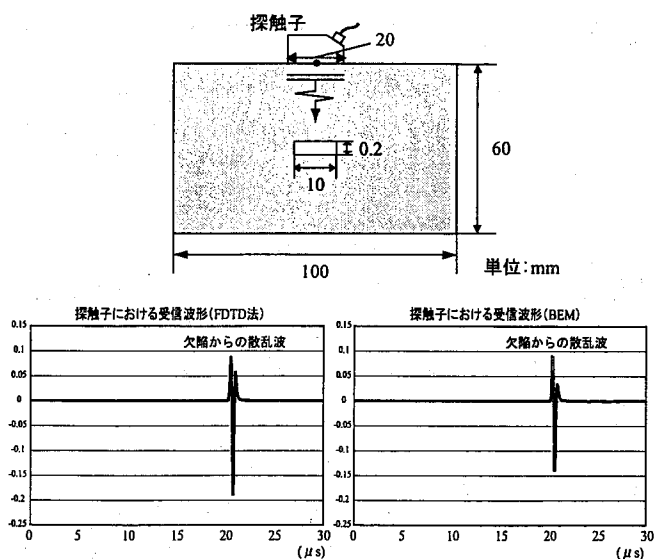


図-1 探触子における受信波形

3.2 並列計算の性能評価

次に、並列計算の性能を検査するために、図-2のような幅 L mm、高さ L mm の被検体 ($c_T = 3000$ m/s, $\rho = 7800$ kg/m³) の中央に幅 0.2 mm、高さ 0.2 mm の矩形空洞欠陥が存在するモデルに対して、波動伝搬シミュレーションを行った。ここでは、要素長を一定 ($h_1 = h_2 = 0.01$ mm) とし、 L の大きさを変化させた場合の並列計算の効率について検討する。設定した L の大きさと、それに要するメッシュ数を表 1 に示す。

ここで、計算効率を表すスピードアップ S を定義する。

$$S = \frac{\text{逐次計算に要する計算時間}}{\text{並列計算に要する計算時間}} \quad (8)$$

ここでは、スレッド数を変化させた場合の逐次計算と並列計算に要する時間を計測し、スピードアップ S を求めた。この結果をメッシュ数ごとにプロットしたものを図-2 に示す。図-2 において、理想値はスピードアップ S とスレッド数が一致する点であり、このとき並列計算の効率が最も高くなる。図-2 によれば、スレッド数の増加に従い S が大きくなっており、逐次計算と比較して計算時間が大幅に短縮されていることが分かる。しかし、HPC2500 において並列計算を行う場合、スレッド数がおおよそ 64 を超えると S が低下している。これはスレッド作成時のメモリ振り分け、お

表 1 メッシュ数と被検体サイズの関係

メッシュ数	L (単位: mm)
1万	1
5万	2.23
10万	3.16
50万	7.07
100万	10
500万	22.36
1000万	31.62
5000万	70.71

よびスレッド終了時のメモリ同期にタイムロスを生じているのが原因の1つと考えられる。また、メッシュ数が少ない（おおよそ 10 万要素以下）場合、スレッド数が増加しても S に変化が見られない。メッシュ数が少ない場合には、並列計算による時間短縮よりも、スレッド作成・終了時のタイムロスの方が大きく、並列化の効果がほとんど表れないといえる。

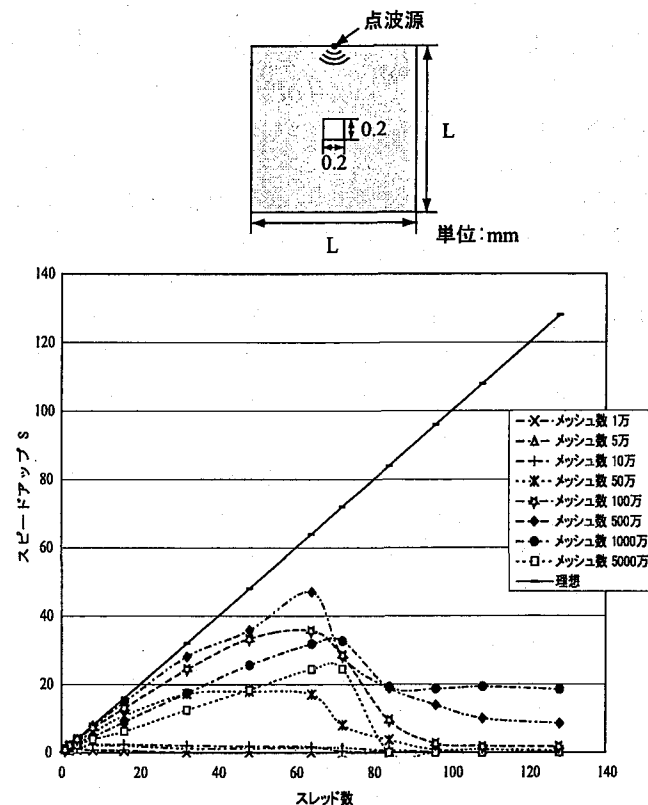


図-2 メッシュ数を変化させた場合のスピードアップ

4. 結論

本研究では、コンピュータ演算時にスレッド並列方式の計算を行う OpenMP を FDTD 法のプログラムに組み込むことによって、弾性波動問題を高速に解析することを試みた。シミュレーション結果から、並列計算の導入により FDTD 法の計算時間が大幅に短縮できることが示された。今後の課題として、FDTD 法は非均質材料問題にも適用が容易であることから、コンクリート内の波動伝播解析を行っていきたいと考えている。

参考文献

- 1) 橋本修: 実践 FDTD 時間領域差分法, 森北出版, 2006.
- 2) <http://www.openmp.org/>
- 3) 牛島省: OpenMP による並列プログラミングと数値計算法, 丸善, 2006.
- 4) Niwa, Y., Kitahara, M. and Ikeda, H.: The BIE approach to transient wave propagation problems around elastic inclusions. *Theor. appl. Mech.*, Vol.32, pp.183-198, 1984.