<並列 AMR における再領域分割タイミングに関する考察>

<A Considerration of the Re-decomposition Timing for the Parallel AMR>

○ 古山 彰一, 富山商船高専, 富山県新湊市海老江練合 1-2, E-mail : shoichi@toyama-cmt.ac.jp
松澤 照男, 北陸先端大, 石川県能美郡辰口旭台 1-1, E-mail : matuzawa@jaist.ac.jp
Sho-ichi FURUYAMA, Toyama National College of Maritime Technology, 1-2, Neriya, Ebie, Shinminato, Toyama, Japan
Teruo MATSUZAWA, Japan Advanced Institute of Science and Technology, 1-1, Asahidai, Tatsunokuchi, Nomi, Ishikawa, Japan

<Abstract> We investigate a suitable timing of re-decomposition for the parallel Adaptive Mesh Refinement(AMR) method. When we choice the AMR method to analize a flow-field on parallel computer, we have to include a dynamic load balancing method to equal a load of each PEs. To realize the effective dynamic load balancing, we consider a re-balancing timing. Using this method, we could get a good perfoemance.

1. はじめに

近年、物体周りの流れ場の検証を行なう為には大型計算機の発達により 3 次元計算が一般的になっている。しかし、複雑形状物体に、精度、効率共に満たされる計算格子を張る事が難しく、計算機の能力が向上したとはいえ、人間が実際に手間をかける場面が少なくなはっていない。そこでここ数年の間に、物体形状に依存する物体適合格子 (BFC:Boundary Fitted Coordinate) ではなく、正方格子もしくは立方体格子を用いる事で精度の高い計算が行なう試みがなされている。これらの手法は、大型計算機を使用する事で多数の計算格子を使用し、立法格子と言えども物体形状を良く捉え、比較的高い精度で計算が可能であることを示している。しかしながら、等体積の立方格子を計算空間全域に適用する為、それほど高い精度の必要ない部分や、物体近傍などの高い精度の要求される部分を同じサイズの格子で解いてしまう事を避けられず、結果として、計算コストが非常に高い手法である事には変わりが無い。この様な問題に対処するために、立方格子を利用しながら、局所的に格子を細分化する適応格子法を用いることが脚光を浴びつつある。適応格子は、物理量の変動に併せて、高精度の必要な領域を予測し、自動的にその領域の格子を細分化する手法である。手法自体は 1980 年代に Berger[3] らによって提案され、当時は乏しい計算資源をどのように有効利用するかという背景から考えられたものであった。近年では、以上のような 3 次元計算の一般化に伴う複雑形状物体周りの格子生成の難しさから見直されつつある手法である。

また、近年、PC クラスタを始めとして並列計算環境をユーザレベルで持つ事が容易となり、この様な計算機上で効果的な数値計算を行なう手法の開発が必要である。適応格子法に関して並列計算を行なう場合、負荷分散の点で注意する必要がある。適応格子法は細分化格子を計算空間内で局所的に、かつ、時間変化に関して動的に生成する為、これまで普通に行なわれている領域分割法を用いた並列計算手法では、各 PE での負荷が一般的には一定ではなくなる。そのため計算効率がかなり悪い。そこで本報では、適応格子法に関する並列計算に際する問題を、動的領域分割法を用いて対処する。適応格子法に関して動的領域分割法を用いて並列計算を行なう場合、特に以下の問題を考慮する必要がある。

1. 各 PE の負担する負荷量の定量化
2. 動的領域分割を行なう際のコストの軽減
3. 動的領域分割を行なうタイミングの検討

1 番目の負荷量の定量化については、これまで著者らが検討を行なってきた LB 値の検討がある[4]。これは、格子サイズによる計算回数の違いを考慮した値で、負荷量を良く表すものであった。また、2 番目の問題については一次元的な領域分割によってこのコスト軽減をはかる[5]。最後の問題について本報では検討を行なう。

本報では、以上の背景にともない、適応格子法を並列計算機上でどのように実装するかを検討し、その効率について議論する。

2. 手法

この章では、基礎方程式、流体解析手法、適応格子法、並列計算法について言及する。

2.1 基礎方程式と流体解析手法

3 次元圧縮性流体に関する方程式を基礎方程式とし、数値計算手法として TVD(Total Variation Diminishing) 法[1] を用いる。

$$\frac{\partial \vec{Q}}{\partial t} + \frac{\partial \vec{E}}{\partial x} + \frac{\partial \vec{F}}{\partial y} = 0$$

$$\begin{aligned}
\vec{Q} &= (\rho,\ \rho u,\ \rho v,\ \rho w,\ e)^t \\
\vec{E} &= \left(\rho u,\ \rho u^2 + p,\ \rho uv,\ \rho wu,\ u(e+p)\right)^t \\
\vec{F} &= \left(\rho v,\ \rho uv,\ \rho v^2 + p,\ \rho vw,\ v(e+p)\right)^t \\
\vec{G} &= \left(\rho w,\ \rho wu,\ \rho vw,\ \rho w^2 + p,\ w(e+p)\right)^t
\end{aligned} \tag{1}$$

$u,\ v,\ w$ は各々の方向での速度、ρ は密度、p は圧力である。

2.2 適応格子法

適応格子法 (AMR: Adaptive Mesh Refinement method) は、Berger と Colella[3] によって研究された手法である。これは、物理的な変動の激しい領域や物体近傍などで、局所的に格子を細かくすることで、その領域の物理状態を詳細に示すことができる手法である。この手法は、物理状態に応じて局所的に格子を細分化する手法であることから、非定常の問題に対して非常に有効であり、また、不必要に格子を増やすことをしないために計算コストの点で非常に優れた手法であると言える。本論文では、圧縮性流体を解析する場合に衝撃波等の不連続面を数値的にシャープに捉えるためにこの手法を用いる。この手法を用いることで、衝撃波が現れる領域が予めわからない場合でも、衝撃波が発生する部分に細分化格子が張れることになり、精度が高い効率の良い計算が可能となる。

2.2.1 分割指針について

適合的細分化格子法は、任意の時間に物理量の状態を見る事によって、格子の配置を局所的に変更していく。この場合格子の配置の変更とは、初期条件で使用していた格子を局所的に細分化する事である。格子の細分化の基準はさまざまな方法が考えられるが、本研究では圧縮性流体を扱っている為、この流体の性質に合っている分割指針を用いて、格子配置の変更を行なう。圧縮性流体の性質として、衝撃波などの発生が上げられる。衝撃波の領域は、物理量が不連続にジャンプしている所で、この様子を数値的に精度良く捉えることは困難である。そこで、このような領域をあらかじめ予測しておき、TVD 法を適用する前に、この領域について格子を細分化する事を考える。このような領域を特定する為に、以下のような分割指針を用いる。

$$E_i = \frac{|U_{i-1} - 2U_i + U_{i+1}|}{|U_{i-1} - U_i| + |U_i - U_{i+1}| + c} \tag{2}$$

$$c = \delta(|U_{i-1}| + 2|U_i| + |U_{i+1}|) \tag{3}$$

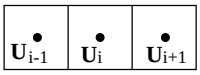

Fig. 1: レルナーの指針値

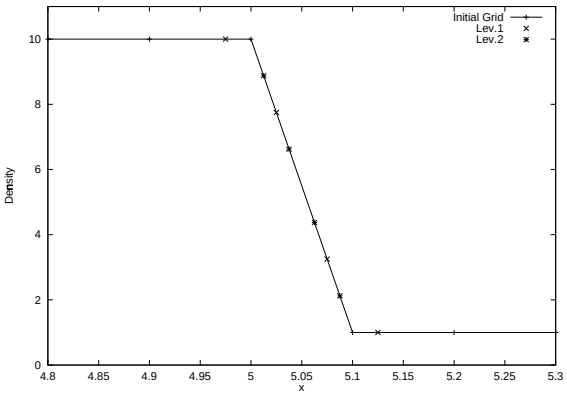

Fig. 2: レルナーの指針値の適用位置

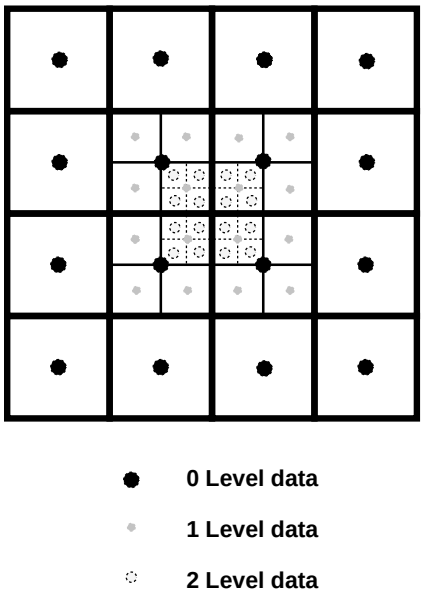

Fig. 3: 格子の配置図（例）

この式は Löhner の指針値[2] と呼ばれるものである。ここで U の値は物理量で、本研究では密度を用いた。δ は任意の数値で、0.05 を用いた。また、下付き文字は、格子番号をあらわしている。この指針値は物理量の勾配が大きな領域で大きな値を取る事になる。つまり、この値がある値よりも大きな領域において、格子の細分化を行なえば良い。 実際に物理量の不連続面にこの指針だてを行なう。図 2は、この式によって分割指標を立てられた位置を示すものである。横軸が格子が配置されている位置を表し、縦軸がある物理量を表している。ここでは、x が 5.0、5.1 のところに物理量が不連続である部分を想定している。図中で×、∗とマーキングされている部分が、この指標の立った位置を示すものである。初期格子の細分化レベルを 0、細分化が進むにつれてレベル 1、レベル 2 と言うようにレベル数が増えるとし、この場合特に、×はこの位置にレベル 1 の格子を生成することを表しており、∗についても同様にレベル 2 の格子を生成することを表している。この図を見ると、不連続面に対してマーキングが行われ、細分化の必要な部分が細分化格子が生成される対象領域になっていることがわかる。

2.2.2　細かい格子のデータについて　適合的細分化格子法は、初期サイズの格子を細分化していく事から、細分化される事で生成された格子のデータを何らかの形で得ることが必要である。本論文では、格子の細分化指針として Löhner の指針値を用いており、これは、物理量が不連続になっている領域で格子を細分化する指針だてを行なうものであった。このことから、細分化によって生成された格子のデータは、物理量の不連続な領域で適切な値を与える事が必要である。しかし実際には、連続領域でありながらも物理量の勾配が大きい領域において Löhner の指針値は格子細分化位置として認識する可能性がある。そのため、より粗い格子のデータをを一次で内挿し細かい格子のデータとする。具体的には、最も近い、左右のより粗い格子を検索しその距離により空間的な一次内挿を行った。

2.2.3　タイムスケジューリングについて　格子の分割指針によって分割された格子により、計算領域には大小の格子が混在する事になる（図 3）。これをどの様に解くかが次なる課題となる。TVD スキームを安定に解く為に、初期格子においてクーラン数を 0.7 にとっている。（クーラン数とは、計算領域での情報伝播速度と物理領域での情報伝播速度の比であり、ここで利用している陽的スキームにおいては、クーラン数を 1 以下にする必要がある）。細分化された格子においても、安定にスキームを解く為に、クーラン数を 0.7 にする必要がある。そのことから、レベル 0 における時間刻みをΔt とした場合に、レベル 1 の格子の時間刻みは $1/2\Delta t$、レベル 3 での時間刻みは $1/4\Delta t$ で解く事になる。これらの事から、図 4のようなスケージューリングで、初期格子における 1 ステップ、つまり Δt を進める。この表から、2 level での適応格子法は 7 ステップを踏むことで Δt 進むことがわかる。また、図の中で矢印が表しているものは異なる格子間でのデータのやりとりを行なうタイミングを表したものであるが、これについては次節で述べる事にする。

	1	2	3	4	5	6	7
Lev 0 (Δt)	●						
Lev 1 (Δt / 2)		●			●▲		
Lev 2 (Δt / 4)			●	●▲		●	●▲

Fig. 4: タイムスケジューリング

このようなスケジューリングで、サイズの異なる格子上で流れ場を解く。細分化格子での物理量はΔt 進める間に複数回の計算を行う必要があるので、計算バッファを適切に与える必要がある。そのバッファについては、同レベルの細分化格子が隣接している場合はお互いにその値を利用する。一方、粗い格子と接しているような場合は、level 0 の格子を一番始めにΔt 進めるので、t_0 と $t_0 + \Delta t$ の値を用いて、時間について一次の内挿を行い必要データとする。

2.2.4　細かい格子から粗い格子へのデータ転送　より細かい格子からなっている格子の体積は $V = 2^N v$ で求められる。ここで v は
finer cell volume、N は *spatial dimension* である。また境界の長さは、$A = 2^{N-1}a$ で表すことができる。結局セルのエッジの長さは、$D = \frac{V}{A} = 2\frac{v}{a} = 2d$ となる。またタイムステップは $T = 2t$ とする。細かいグリッドで覆われているような粗い格子の物理量は、細かい格子での物理量 (u) の平均値を用いて、与える方法を用いる。

$$U \leftarrow \frac{1}{V}\sum_{i=1}^{2^N} u_i v = \frac{1}{2^N}\sum_{i=1}^{2^N} u_i \equiv \overline{u} \tag{4}$$

格子は、細分化レベル毎にそれぞれ独立に解かれるため、レベルの違う格子が接しているようなところで、流束の不一致が起こることが考えられる。そこで、以下のような補正を加えることによってこの問題を解決する。

$$U \leftarrow U - \frac{1}{V}(TAF(U) - \sum_{n=1}^{2}\sum_{i=1}^{2^N-1} ta f_i^n(u))$$
$$= U - \frac{T}{D}(F(U) - \frac{1}{2^N}\sum_{n=1}^{2}\sum_{i=1}^{2^N-1} f_i^n(u))$$

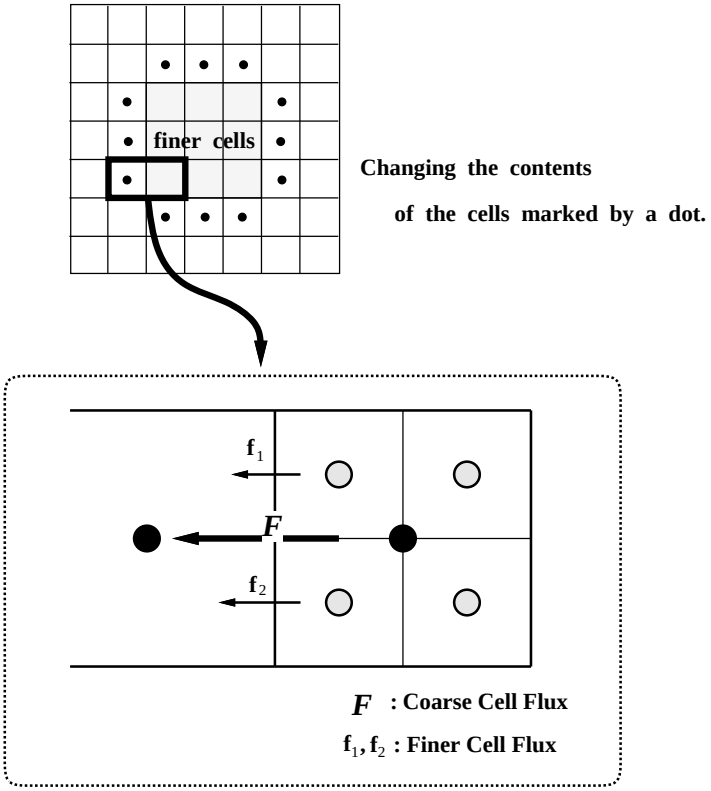

Fig. 5: 流束補正について

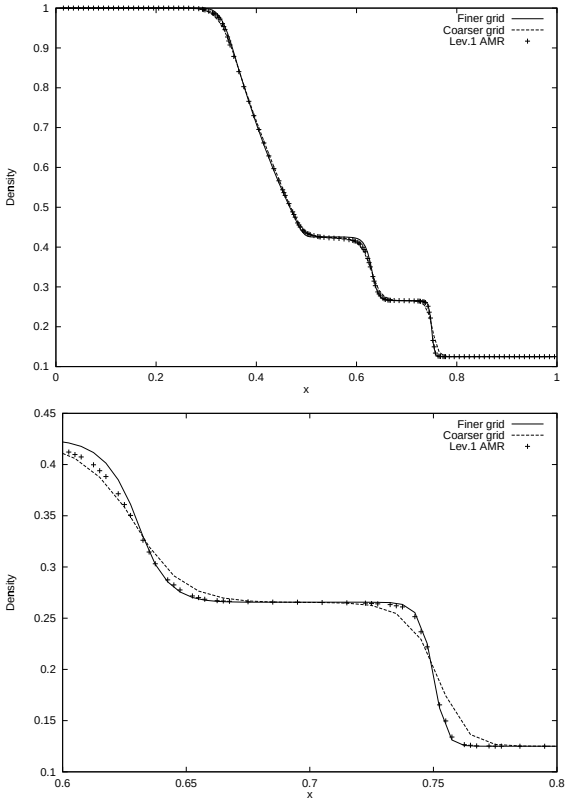

Fig. 7: 衝撃波管問題の結果

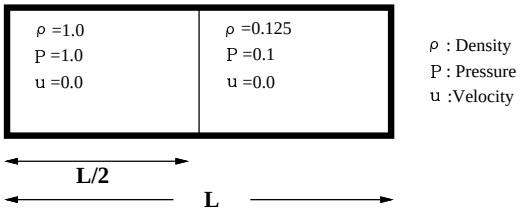

Fig. 6: 衝撃波管問題について

Grid	time (sec)
Coarse grids	0.44
Fine grids	1.75
1 Lev. AMR	1.40

Tab. 1: AMR 法の計算時間

$$= U - \frac{T}{D}(F - \overline{f}) \qquad (5)$$

この流束の補正によって影響を受ける格子は、図 5で、● で示した部分である。これは、より細かい格子に接しているようなより粗い格子である。より細かい方の格子は、粗い格子よりも精度が良いものとして、物理量の更新は行なわないものとする。

2.3 衝撃波管問題について

TVD 法と 1 次元 1 細分化レベルにおける適合的細分化格子法を用いて、その精度評価を行なった。 計算モデルとして衝撃波管問題を取り上げる。この問題は、予め解析解がわかっている為に、スキームの精度評価の際に利用される。初期条件としては、図 6のように与える。時間 $t = 0$ の時に、領域の中間を仕切っていた仕切りをはずし、その後の経過を見るものである。図 7がその結果で、横軸は位置を表し、縦軸は密度を表している。この実験は x 方向に 100 の格子点をとっている。図の中で、実線はレベル 1 の細分化格子で計算領域全体を覆った場合の計算結果を示す。点線はレベル 0 の初期格子のみで計算を行った場合の結果である。＋が 1 レベルの AMR を用いた場合の結果である。また、この時点での物理領域における実時間は $t = 14.154$ である。

下図は x が 0.6 から 0.8 での拡大図であり、特に衝撃波近傍で初期格子のみで解いた時よりも、よりシャープな解が得られている事がわかる。

また表 1に計算コストに関しての結果を載せた。これは上記実験の場合の、計算時間について触れたものである。計算機は Pentium II 233MHz のパーソナルコンピュータである。この表で、Coarse grids は計算領域全体を初期格子のみを用いて計算を行なった場合の結果を示した。Fine grids は、計算領域全体をレベル 1 の細分化格子で覆い計算した場合の結果である。1 Lev. AMR は 1 レベルの適応格子を用いた場合の計算結果である。1 Lev. AMR は、計算ステップを進める毎に格子の細分化、粗化を判定しているため、Coarse grid の場合と比較して付加された時間が大きくなっている。この手続きを適切なタイミングで行なえば、この時間はもっと削減することが可能であると考える。使用メモリについては、現在メモリ利用を動的には行なっておらずどの手法でも同じメモリ量を使用しているが、malloc() などの関数を用いることで、使用メモリ量が削減可能であると考えられる。

3. 並列計算

数値計算分野における並列計算手法では、領域分割法が一般的に用いられる。これは、計算領域を利用 PE 数、もしくはそれ以上の領域に分割し、各々の領域を PE に割り当てて計算を行なう手法である。本法では、一次元方向に PE の受け持つ領域を伸縮させ動的に負荷分散を行なう。図 8で、実際の領域分割について図示した。上の段では、計算領域を等面積で分割し、それぞれの領域について各 PE が担当し計算を行なっており、一般的な領域分割法を用いた並列計算の様子を図示している。しかしながら、適応格子格子を用いた場合は、格子の密集地域が出てくるため、計算領域を単純に等面積で分けた場合には負荷量の不均一化が生じる。そのため、下段で格子の密集地域を受け持つ PE の計算領域の受け持ち面積を狭くし、各 PE における負荷量の均一化を図る事を考える[5]。

実際の並列計算は図 9の流れで行なう。まずはじめに流れ場に関する各種初期条件を設定する。次に各領域の境界条件を設定する。境界条件は、計算に必要となるバッファ領域を隣合う PE 間でデータ通信を行ない設定する。次に適応格子法を用いて

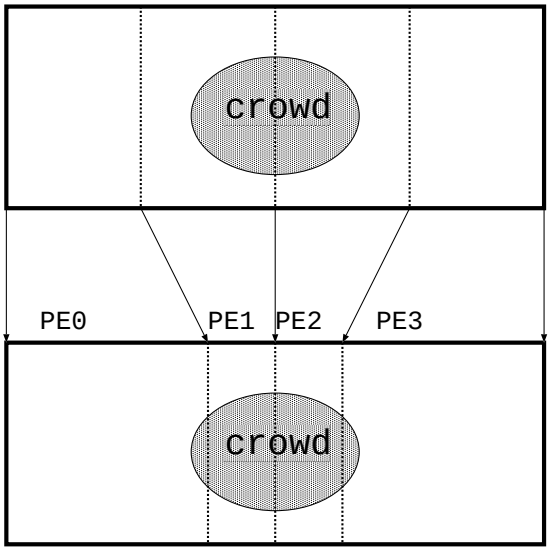

Fig. 8: 領域分割法。PE 数が 4 の場合

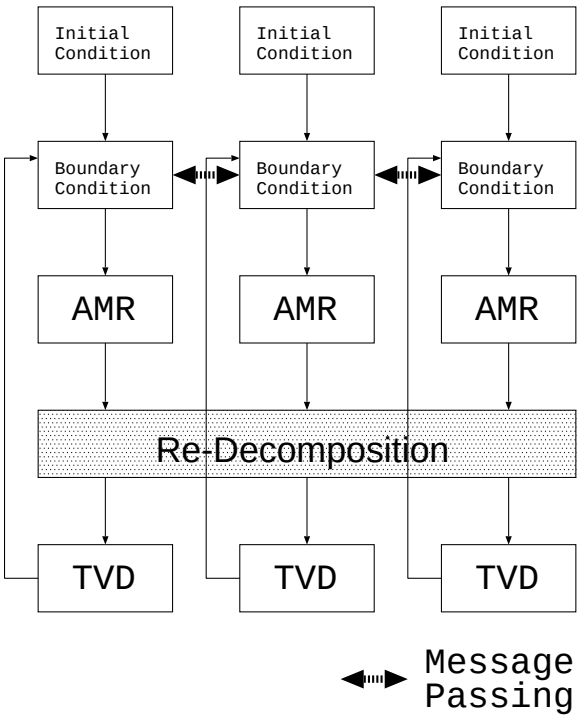

Fig. 9: 並列計算

流れ場の計算を行なうステップに入る。AMR と書いたこのプロセスでは、レルナーの指針値による細分化格子の生成、物理量の内挿を行なう。その後、'Re-decomposition' のところで、生成された格子数により、各 PE の計算負荷量が同じになるように、各 PE の受け持ち領域を伸縮させる。最後に、これらの格子を用いて TVD 法と適応格子法を適用し、一ステップの計算とする。

この流れの中で、再領域分割に関する記述があるが、これは、次の手順で行なう。

1. 各 PE で負荷量の計算（定量化）を行なう。
2. PE0 にその値を集める。
3. PE0 で平均負荷量を求め、それぞれの PE の担当領域がどの程度の大きさにするかを決定し、各 PE へその結果を知らせる。
4. 上記の結果に従い、必要データの通信。

負荷量の定量化については、次の LB 値(Load Balancing value) を導入して行なう。

$$LB_{PE} = \sum_{level=0}^{LEV} 2^{level} N_{level,PE} \quad . \tag{6}$$

ここで、LB_{PE}は、プロセッサ番号 PEの LBの値、LEVは適応格子法における最大細分化レベル、$N_{level,PE}$は PE 番号が PEでの細分化レベルが $level$である格子の数を表している。具体的に、例えば PE 番号が 1 で、最大細分化レベルが 2 レベルの場合には、以下の式で LBの値を求める。

$$LB_1 = N_{0,1} + 2 \times N_{1,1} + 4 \times N_{2,1} \quad . \tag{7}$$

この値が各プロセッサで平均化されれば、負荷量が平均化されパフォーマンスの向上につながると考えられる。

各 PE での、この負荷量を平均化するために、本法では動的領域分割法を用いるが、動的領域分割を行なう際に必要とされる、実際のデータ配列を通信する事が、非常にコストが高価な部分になると考えられる。そのため、この部分をどういったタイミングで、または、どの程度の頻度で行なうかが、パフォーマンス決定の大きな要因になると考えられる。

まずはじめに、決まった間隔で動的領域分割を行なう事を考える。これは、「タイムステップが偶数の場合に領域分割を行なう」などのように定期的に行なうもので、非常に簡単である。しかしながら、この手法では、実際に領域分割が必要だと思われるタイミングや、さらに、領域分割が必要無いタイミングであるにもかかわらず、非常にコストの高い処理を行なってしまう事が一般的には考えられるため、あまり効率の良い手法だとは言えない。そこで、効率の良いタイミングをどのように見つけるかを考える。並列計算において最も高いパフォーマンスが得られるのは、PE 間での負荷量が一定の場合、つまり、各 PE が他の PE の処理時間で待ち時間が無い場合である。この背景から、最大負荷量を持つ PE と最小負荷量を持つ PE の負荷量の比を見ることにする。

$$\frac{LB_{max.}}{LB_{min.}} \tag{8}$$

この値が、ある閾値以上になった場合、再領域分割を行なう事とする。この値がを考慮する事で、負荷量のばらつきが大きい時に再領域分割を行なうこととなる。

4. 結果

4.1 流れ場

段差付き管内流れについて計算を行なった (図 10)。格子数は 120×40、時間ステップ数は 100 とし、実時間で $t = 0.5$ の計算である。この状態は、段差付近に強い衝撃波が発生し、細分化格子が多数生成される状態である。

4.2 並列計算、パフォーマンス

定期的に再領域分割を行なった場合について結果を載せる。図 11では、各 PE の受け持つ領域を等面積でありかつ時間によらず一定とした場合の速度向上に関する結果を Static DDM とし、LB により負荷量を見積り、その値により各 PE の受け持つ領域を変動させた場合の速度向上に関する結果を、２、２５、４９ times として表した。ここで、２、２５、４９ times の意味は、100 ステップ中に、２、２５、４９回の再領域分割を行なった事を表している。それぞれ 8 PE 使用時に、3.3、3.4、2.5 倍の結果が得られている。

表 2では、LB 値の比により再領域分割のタイミングを決定した場合の結果である。

負荷量の差が 2 倍未満で再領域分割を行なった場合に、定期的な再領域分割を行なった場合の最大パフォーマンスに近い結果が得られた。

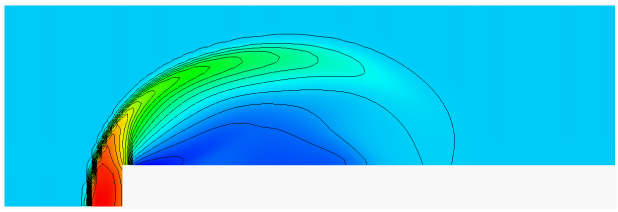

Fig. 10: 流れ場の様子（等密度線）。t=0.5。

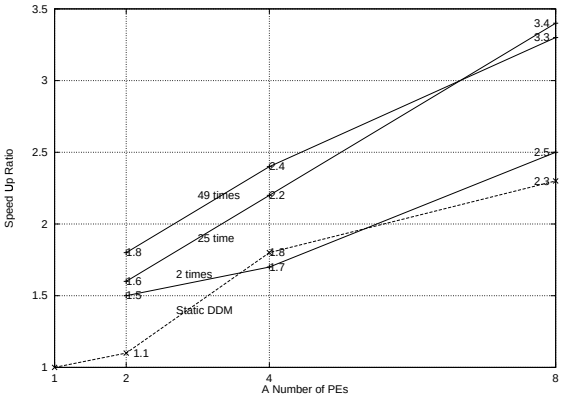

Fig. 11: 再領域分割タイミングと速度向上の関係

負荷量の差	S.Up Rat.(8PEs)
1.1 倍	3.4
1.2 倍	3.3
1.3 倍	3.4
1.4 倍	3.3
1.5 倍	3.3
2.0 倍	3.1
3.0 倍	3.0
4.0 倍	2.8

Tab. 2: 最大負荷量と最小負荷量の差と速度向上比

5. 議論

今回対象とした流れ場は、衝撃波に伴う細分化格子が生成される領域がかなり局所的であった。そのため、再領域分割にかかるコストを抑える事よりも、少々コストが高い再領域分割を頻繁に行なった方がパフォーマンスの向上が見られた。これは、局所的な負荷量の増加、すなわち、ある PE のみへの負荷量の増加がパフォーマンスの低下に大きく影響を及ぼしていることを示している。このことはつまり、負荷量を均等にすることを常に考えないといけない事を示唆している。

今後の課題としては、局所的な領域に対して細分化格子が集中する場合のみではなく、各所で細分化格子が生成される場合の流れ場についての再領域分割の最適タイミングを割出すパラメータを検討することがあげられる。現在は、最大負荷量と最小負荷量の比のみで検討を行なっているが、負荷量の差が比較的少ない状況で負荷分散を行なう事を考えた場合に、安定した高いパフォーマンスが期待できるとは限らない。そのため、計算領域全体で細分化格子が生成されるような流れ場に対しては、負荷量の比を考慮する事に加えて、再領域分割のコスト、つまり、再領域分割自体にかかるコスト、または、再領域分割した後のパフォーマンス予測等が必要であると考えられる。また、３次元問題の場合は今後必須であり、早急な検討が必要であると考えられる。

6. おわりに

適応格子法に対する並列計算に関して、動的領域分割を行なうタイミングについて検討を行なった。今後はより一般的な問題について検討を行なう事と、現在開発中の 3 次元問題[6]に対しての応用を試みる。

参考文献

1. Ami Harten,
   “High Resolution Schemes for Hyperbolic Conservation Laws.”
   Journal of Comput. Phys. 49,357-393(1983)

2. Löhner R,
   “An Adaptive Finite Element Schemes for Transient Problems in CFD.”
   Compt. Meths. Appl. Mech. Engrg 61, 323-338(1987)

3. M.J.Berger and P.Collela, “Local Adaptive Mesh Refinement for Shock Hydrodynamics.” J.of Comp.Phys. 82, pp64-84(1989)

4. 古山彰一, 松澤照男:動的負荷分散を用いた適応格子法の並列計算, 情報処理学会論文誌第 38 巻第 9 号, pp1869-1877(1997)

5. Sho-ichi FURUYAMA, Teruo MATSUZAWA, ”A Suitable Domain Decomposition for the Adaptive Mesh Refinement Method”, High Performance Computing, ISHPC’99, Lecture Notes in Computer Science Vol.1615, Springer-Verlag(1999),pp363-372

6. 山北光博、古山彰一、松澤照男「適応格子法を用いた衝撃波を伴う 3 次元管内流れの並列計算」第 13 回数値流体力学シンポジウム (東京) 講演論文集、1999 年 12 月