

## 動径基底関数を用いた浅水波モデルの並列化

小笠原宏司 (京都大学大学院 理学研究科)

榎本剛 (京都大学防災研究所)

### 1. はじめに

動径基底関数 (Radial Basis Functions, RBF) は距離のみに依存する関数である。RBF は座標系に依存しないため、幾何学的な構造を持たない球面上の準一様な節点に対して適用可能であり、微分演算子が極において特異とならない。また、実装が簡単で高次元でも複雑にならない。このような RBF の長を活かして、Flyer and Wright (2007) は球面上の移流モデルを構築し、節点数とともに誤差が指数関数的 (スペクトル的に) 収束することを示した。浅水波モデルに対する RBF の適用は Flyer and Wright (2009) で行われている。先行研究では RBF を用いた浅水波モデルはスペクトル精度を有することが示されている。また、球面調和関数や二重フーリエ級数などの現行モデルで使われている手法と比較し、同程度の精度を得るために必要な節点数は RBF を用いた手法が他の手法よりも少ないことを示している。

RBF を用いた浅水波モデルが十分な精度であることが示されたので、次の大気大循環モデルに発展させるためのステップは浅水波モデルの高速化である。

オイラー移流で浅水波モデルを構築する場合には、二つの重い計算を行わなければならない。一つ目の重い計算は空間微分の離散化である。RBF を用いた空間微分の離散化は物理空間の中で関数を離散化する。離散化では次式の連立方程式を解く必要がある。

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{B} \quad (2)$$

係数行列  $\mathbf{A}$  の成分に RBF が含まれている。一般に行列  $\mathbf{A}$  は密行列であり、式(1)を直接法 (LU 分

解法など) で解くために必要な計算量は  $O(N^3)$  である。二つ目は時間積分の際に行う行列ベクトル積であり、計算量は各ステップに  $O(N^2)$  である。これらの二つの計算は大気大循環モデルで用いられるような数十万から百万もの水平節点数に対しては非常に重たい計算になる。

以上のことから本研究の目的は連立方程式の解法と時間積分における行列ベクトル積の高速化の検証である。

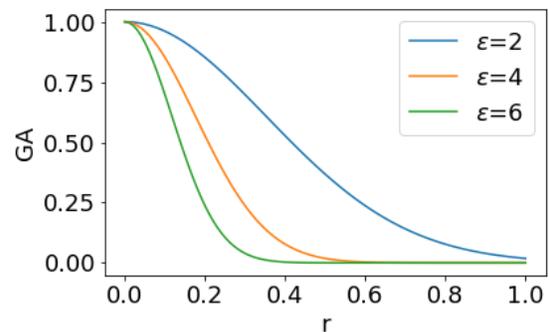


図 1: Gaussian RBF。横軸が距離、縦軸は GA。

### 2. 高速化手法

連立方程式の計算量の削減には非定常反復解法を用いる。これにより  $O(N^3)$  の計算量を  $O(N^2)$  の計算量に削減する。共役勾配法を非定常反復解法として用いた。しかし非定常反復解法を用いる場合は、直接法を用いる場合よりも精度が低下する可能性があり、精度の検証が必要である。時間積分での行列ベクトル積は計算の並列化により高速化する。並列化に際し、浅水波モデルの計算は全て並列化した。

浅水波モデルの並列化には分散メモリ型の並列化手法を用い、並列化にはメッセージ通信インターフェース (Message Passing Interface, MPI) を用いた。連立方程式の計算と行列ベクトル積に用いたライブラリーは PETSc である。PETSc の連立方程式のソルバー群である ksp は反復解法で連立方程式を解く。

### 3. テストケース

並列化反復解法を取り入れた RBF 浅水波モデルの精度と計算速度を Williamson et al. (1992) のケース 2 で検証した。このテストケースは、初期に地衡流を与え、定常状態が維持されるかを試す。浅水波モデルの支配方程式は

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = -\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} - \nabla \Phi - f \mathbf{k} \times \mathbf{u} \quad (3)$$

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} = -\mathbf{u} \cdot \nabla \Phi - \Phi \nabla \mathbf{u} \quad (4)$$

である。初期条件として

$$u = u_0 (\cos \theta \cos \alpha + \cos \lambda \sin \theta \sin \alpha)$$

$$v = u_0 \sin \lambda \sin \alpha$$

$$\Phi_0 = gh_0 - \left( a\Omega u_0 + \frac{u_0^2}{2} \right) (-\cos \lambda \cos \theta \sin \alpha + \sin \theta \cos \alpha)$$

$\theta$  : 緯度、 $\lambda$  : 経度

$\alpha$  : 赤道と風がなす角度

$u_0$  : 傾けていないときの赤道での風速

$h_0 = 1000[\text{m}]$ 、 $g = 9.80616[\text{m/s}^2]$ 、 $\Omega = 7.292 \times 10^{-5}[\text{rad/sec}]$ を与える。これは(2), (3)の定常解である。誤差はジオポテンシャルで計算される。基底関数には IMQ RBF を用いる。本実験では  $\alpha = 0$ 、 $u_0 = 2\pi a/12[\text{day}]$ 、 $a = 6.37122 \times 10^6[\text{m}]$ の設定で行った。

実験は Mac Pro (Late 2013)で行った。プロセッサは 3.5 GHz の 6 コア Intel Xeon E5 である。メモリは 1866 MHz の DDR3 で 32GB 搭載されている。

### 4. 実験結果

節点数  $N = [784, 1764, 3136, 4096, 5184]$ における正規化誤差を図3に示す。節点数 742 から

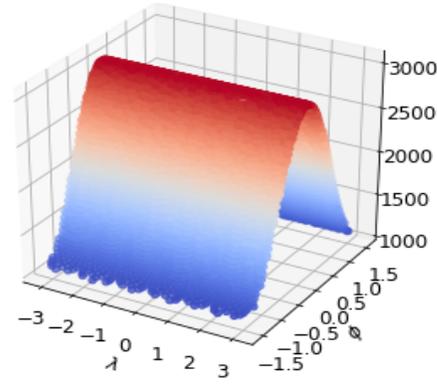


図 2 : ジオポテンシャルの初期値

5184 にかけて正規化 2 乗平均平方根誤差は  $3.7 \times 10^{-5}$  から  $1.8 \times 10^{-8}$  まで減少する。誤差は指数関数的に収束しており、高精度である。

次に  $N = 1800$ 、 $\varepsilon = 7$ 、 $dt = 30[\text{min}]$  にパラメーターを固定して実験を行い、連立方程式の計算時間と時間積分の計算時間をプロセス数ごとに図4に示す。連立方程式の計算時間はプロセス4まで増やすことで計算時間が短縮される。それ以降は遅くなる。時間積分はプロセス数を増やすに従って計算時間が増えていった。プロセス数の増加に合わせて時間が増えた計算は行列ベクトル積であった。

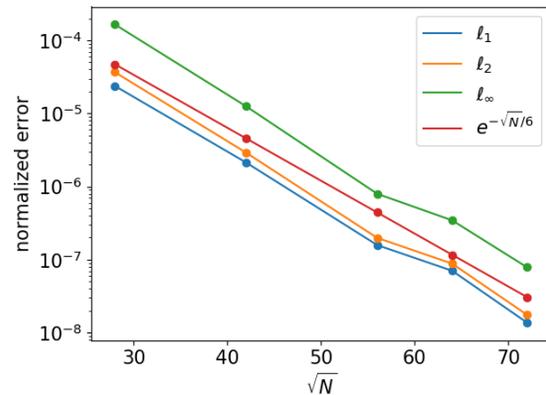


図 3: 誤差の収束性。横軸は節点数の平方根、縦軸は正規化誤差(対数)。 $l_1$ 、 $l_2$ 、 $l_\infty$ はそれぞれ正規化絶対誤差、正規化二乗平均平方根誤差、正規化最大誤差である。赤線は  $e^{-\sqrt{N}/6}$  の誤差の収束率を示す。

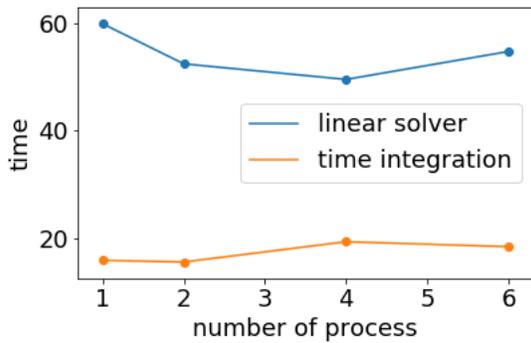


図 4: wall-clock time とプロセス数。横軸はプロセス数、縦軸は計算時間[sec]。青線は連立方程式の計算時間、オレンジ線は時間積分の計算時間。

## 5. まとめ

RBF を用いた浅水波モデルの並列化を行った。浅水波モデルは Flyer and Wright (2009) に基づいて構築した。並列化には MPI を用いた。並列反復解法には PETSc の連立方程式のソルバー群である ksp を用いた。精度及び計算時間の検証には Williamson et al. (1992) のケース 2 を用いた。

精度検証では正規化絶対誤差、正規化 2 乗平均平方根誤差、正規化最大誤差においてスペクトル精度が確認され、十分な精度が示された。計算時間は連立方程式の計算が最も大きな割合を占めた。連立方程式の計算時間が大きい原因は行列  $\mathbf{A}$  が密行列だからである。ksp は疎行列に対する連立方程式のソルバーであるため、密行列を対象としていない。計算時間はプロセス 4 までは計算時間が少なくなり、それ以降は計算時間が増えていく結果となった。並列化により計算時間は減少しているが、スケーラビリティは得られていない。次に時間積分の計算時間を計測した。結果はプロセス数が増えていくにつれて遅くなっていく結果になった。遅くなっている原因は行列ベクトル積であった。これは 1 本のベクトルをプロセスごとに分割してデータを持っているため通信が発生し、遅延が起きているためだと考えられる。

今後の研究ではさらなる計算時間の高速化のために係数行列  $\mathbf{A}$  の疎行列化とベクトルのデータ格納法の変更が必要である。

## 参考文献

- Flyer, N., and G. B. Wright, 2007: Transport schemes on a sphere using radial basis functions. *J. Comput. Phys.*, **226**, 1059–1084.
- Flyer, N., and G. B. Wright, 2009: A radial basis function method for the shallow water equations on a sphere. *Proc. R. Soc. Lond. Ser. A: Math, Phys. Engineering Sciences*, **465**, 1949–1976.
- Williamson, D. L., J. B. Drake, J. J. Hack, R. Jakob, and P. N. Swarztrauber, 1992: A standard test set for numerical approximations to the shallow water equations in spherical geometry. *J. Comput. Phys.*, **102**, 211–224.