jh240032

# マルチ解像度セル前処理付き粒子法による 圧縮性・非圧縮性流体統一解法への展開

浅井光輝（九州大学）

概要

研究グループに独自に開発してきた高精度・高速化粒子法のさらなる発展を目指し，特に高速化については独自の幾何マルチグリッドソルバを使った陰解法コードの MPI 化の実装し，また高精度化については変分マルチスケール法を世界で初めて粒子法に展開することに成功した．変分マルチスケール法を粒子法に導入することで，未知変数である速度・圧力の同時解法が可能となり，その恩恵を受け，固体境界処理の高精度化，効率化が可能となった．

## 1. 共同研究に関する情報

### (1) 共同利用・共同研究を実施している拠点名

東京大学 情報基盤センター

九州大学 情報基盤研究開発センター

### (2) 課題分野

大規模計算科学課題分野

### (3) 参加研究者一覧と役割分担

藤田航平、市村強、三木洋平・・・

研究項目 A [幾何マルチグリッド粒子法の MPI 並列 化]の開発補助

小野謙二・大島聡史・・・

研究項目 B [圧縮性・非圧縮性流体統一解法への新展開] の開発補助

浅井光輝、森川ダニエル・・・

研究項目 A,B 二人共同で，上記共同研究者の知見を反映させた粒子法コードを実装し，その性能検証を行う．

## 2. 研究の目的と意義

SPH 法・MPS 法などの粒子法は，差分法や有限要素法などの格子法と比べ，対象とする物体の大変形・分裂・結合を伴う形状変化の激しい問題を効率よく計算できる. この利点を活かし, 地 震・津波だけでなく，豪雨災害の被害予測を志向したマルチフィジックス計算を試みている．粒子法は計算精度の観点から均等な粒子間隔で解くことが求められることから，都市全体の広域災害解析は必然的に大規模になる．そこで代表者は，これまで粒子法に関する JHPCN 課題に長く携わる ことで，大規模粒子法コードを整備すると同時 に，SPH 法の高精度化に貢献してきた（成果は 2022 年 2 月に丸善から「明解・粒子法」を単著で出版し，書籍で使用した基礎コードも公開中)．

昨今では GPU などのアクセラレータの性能向上は目まぐるしく，申請者らもこれまで CPU による高並列計算で培った技術をマルチ GPU 環境へ移行している．特に，連立一次方程式ソルバを要しない陽的粒子法においては, GPU1 枚で CPU 計算ノードの 5 ノード（10CPUs）程度以上の性能が得られることを確認してきた．

## 3. 当拠点の公募型共同研究として実施した意義

2024 年度の申請課題では，独自の幾何マルチグリッドソルバを使った陰的粒子法を計算ノードに跨ぐ多数 GPU でも高効率な演算を可能とし(陰解法を MPI 並列に対応・2022 年度と 2023 年度

の成果統合)，さらに非圧縮性流体から圧縮性流体までを統一的に解析可能な陰解法型のソルバへと発展を目指した.

## 4. 前年度までに得られた研究成果の概要

粒子法の近傍粒子探索用に設定するバックグラウンドセルを基本単位としたスライスグリッドによる領域分割法を使用し，計算ノードを跨ぐ多数 GPU で機能する MPI 並列版コードを陽解法に実装した.

2022 年度の成果で示したように，陽解法型の粒子法では，GPU 計算機上で優れたスケーリング性能が容易に獲得できるものの，陰解法を選択する と連立一次方程式ソルバがボトルネックとなり，GPU による高速演算の恩恵が得られない. しかしながら，圧力解法の高精度化，高粘性流体解析などのためには，陰解法の選択は避けられない. そこで，実用的な汎用ソルバを確立するために，粒子法に特化した幾何マルチグリッドソルバ（構造格子を使った前処理）を開発した.

## 5. 今年度の研究成果の詳細

### 研究項目 A. 幾何マルチグリッド粒子法の MPI 並列化

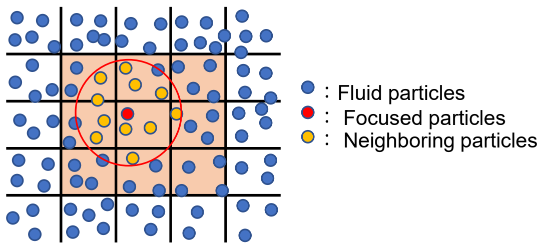


図 1 粒子法におけるバックグランドセル

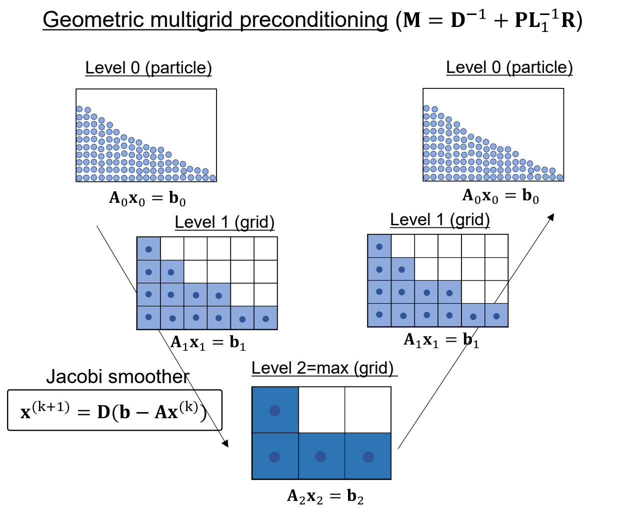


図 2 バックグランドセルを使った幾何マルチグリッドソルバ

前年度から、図 1 に示す粒子法において近傍粒子探索用として利用するバックグランドセルを共役勾配法の前処理として利用する，マルチグリッドソルバ（図 2 参照）の改良を行った. まず，細かい格子上である程度 解くスムージング（Pre-smoothing）を行い，減衰できなかった残差を細かい格子へ制限する（Restriction）. それを基に粗い格子上で解を修正し（Coarse grid correction），細かい格子へ延長し（Prolongation）， 最後にまた細かい格子上でスムージングを行う（Post smoothing）. また，各 Grid 階層で数回の反復を行う V サイクルにより計算を行い，スムーサーとしては Jacobi 法を採用した.

図 3 に示す津波氾濫解析（1GPU を使用，約 1 千万粒子)がこれまで 2 日以上費やしていたが，以上の幾何マルチグリッド粒子法を使い，同じ精度のまま 14 時間程度で解析が実行できることを確認した(トータル計算時間で 3 倍以上の高速化).

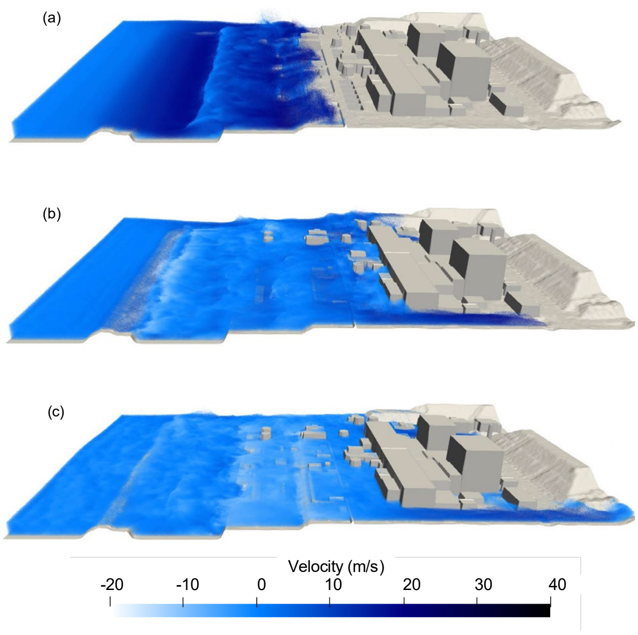


図 3 津波遡上問題における高速化の検証

次のステップとして，MPI 化の前に代表者が 2023 年に提案した高精度粒子法 SPH(2)（業績の招待講演 3 件がこの内容に関連）への対応を図るため，非対称行列のソルバである BiCGStab 法への対応を行った．非対称ソルバにおいても前処理が十分に効果を発揮することを確認した。以上の研究成果は既に今年度の国際会議等で多数の発表を行い，現在はジャーナルへの投稿準備をしている．当初予定通り、MPI 化を 2024 年度内に実装することで、複数 GPU を使った大規模問題への対応を可能とした．

**研究項目 B. 圧縮性・非圧縮性流体統一解法への新展開**

射影法に基づく速度-圧力分離型解法の一つであるISPH法では、流体粒子の影響範囲内に異なる複数の壁境界が存在する場合（**図4**）に複数の異なるNeumann境界条件を同時に満たす必要が生じ，非物理的な結果が計算される．例えば，土中の間隙水のミクロな流れや間隙水圧，土粒子との相互作用を精緻に計算する上でこの課題は大きな技術的制約となる．

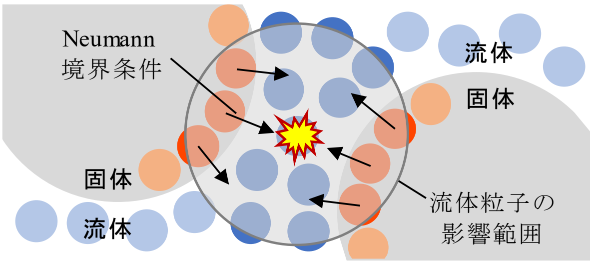


**図4 従来手法で正確な計算ができないケース**

当初予定では、圧縮性・非圧縮性流体の統一解法を開発する予定であったものの、上記の境界条件処理に対して、**速度–圧力一体型解法**で対応できることがわかり、境界条件処理法の改善へと方針転換した（中間報告時でも説明した通りである）.

非圧縮性流体の支配方程式は，次式に示すNavier-Stokes方程式と連続の式で表される．

$$\frac{D\mathbf{v}}{Dt} = -\frac{1}{\rho}\nabla p + \nu\nabla^2\mathbf{v} + \mathbf{g} \tag{1}$$

$$\rho\nabla\cdot\mathbf{v} = 0 \tag{2}$$

ここで，$D/Dt, \mathbf{v}, \rho, p, \nu, \mathbf{g}$ はそれぞれ物質時間微分，速度，密度，圧力，動粘度，外力（ここでは重力）である．式(1)，(2)を陰的Euler法により時間離散近似し整理すると，以下のブロック行列が得られる．

$$\begin{bmatrix} (1-\Delta t\nu\nabla^2)\boldsymbol{I} & \frac{\Delta t}{\rho}\nabla \\ \rho\nabla^{\mathrm{T}} & 0 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{v}^{n+1} \\ p^{n+1} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \mathbf{v}^n + \Delta t\mathbf{g} \\ 0 \end{Bmatrix} \tag{3}$$

ここで，$\Delta t$ は時間増分，上付き文字は時間ステップを表す．

このとき，式(3)の行列は対角成分にゼロを含んでおり，それに起因しLBB（Ladyzhenskaya–Babuška–Brezzi）安定性条件を満たしておらず，線形ソルバーの収束性が著しく低下する．そこで本研究では，流れのFEM解析で実績のある変分マルチスケール法（VMS: Variational Multiscale）による安定化を導入した．代数的サブグリッドスケールに基づくVMSにより速度場を分解すると，

$$\mathbf{v} = \bar{\mathbf{v}} + \mathbf{v}' \tag{4}$$

$$= \bar{\mathbf{v}} + \tau\left(-\rho\frac{D\bar{\mathbf{v}}}{Dt} - \nabla p + \rho\nu\nabla^2\bar{\mathbf{v}} + \rho\mathbf{g}\right) \tag{5}$$

ここで，$\bar{\mathbf{v}}, \mathbf{v}'$ はそれぞれ速度の解像可能成分，サブスケール成分であり，$\tau$は次式で定義される安定化パラメータである．

$$\tau = \frac{1}{\rho}\left(\frac{\tau_{\mathrm{dyn}}}{\Delta t} + \frac{c_2\|\bar{\mathbf{v}}\|}{h_\#} + \frac{c_1\nu}{h_\#^2}\right)^{-1} \tag{6}$$

本研究では，先行研究を参考に$\tau_{\mathrm{dyn}} = 1.0$, $c_1 = 4.0$, $c_2 = 2.0$ に設定した．$h_\#$はバックグラウンドセルと等しい面積の円の直径，あるいは等しい体積の球の直径を表す．

Quasi-static subscales formulationに基づき式(3)に式(4)を代入し，計算コスト削減のため3次以上の高次微分項を省略すると以下に示す行列が得られる．

$$\begin{bmatrix} \left\{1 - \left(1 - \frac{\tau\rho}{\Delta t}\right)\Delta t\nu\nabla^2\right\}\boldsymbol{I} & \frac{\Delta t}{\rho}\nabla \\ \left(1 - \frac{\tau\rho}{\Delta t}\right)\rho\nabla^{\mathsf{T}} & -\tau\rho\nabla^2 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \bar{\mathbf{v}}^{n+1} \\ p^{n+1} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \bar{\mathbf{v}}^n + \tau\rho\nu\nabla^2\bar{\mathbf{v}}^n + \Delta t\mathbf{g} \\ -\frac{\tau\rho^2}{\Delta t}\nabla\cdot\bar{\mathbf{v}}^n \end{Bmatrix} \tag{7}$$

以上の操作によりLBB安定性条件が満たされるので，解像可能スケールにおいて式(1)，式(2)を同時に満たすような速度場と圧力場の求解が可能となる．

最後に，式(6)にSPH空間離散近似を適用しBi-CGSTAB法等の反復解法を用いて方程式を解き，式(7)により粒子位置$\mathbf{x}$を更新する．

$$\mathbf{x}^{n+1} = \mathbf{x}^n + \Delta t\mathbf{v}^{n+1} \tag{8}$$

なお，壁境界についてはDirichlet境界条件に基づき物理量を直接代入すればよいため，提案手法では従来手法（ISPH法）で必須であった圧力Neumann条件を必要としない．そのため，任意形状の壁境界への適用が可能となる．

**狭窄部を有するモデル**

提案手法の優位性を検討するため，狭窄部を有する解析モデルで数値計算を実施した．**図5**には計算開始から100ステップ経過時点での静水圧力分布を，**図6**に理論値との比較結果を示す．得られた計算値は理論値と良く一致しており，相対二乗誤差（RSE）は0.47%であった．これらの結果から，本手法により圧力を良好な精度で計算できることを確認した．

提案手法では新しい境界処理手法により**図4**に示すような狭窄部を含む形状での流体解析を精度よく計算できることを確認した．また，提案手法では，壁表面の1層の壁粒子を設置するだけでよく，また壁の法線ベクトルの設定が不要となった．

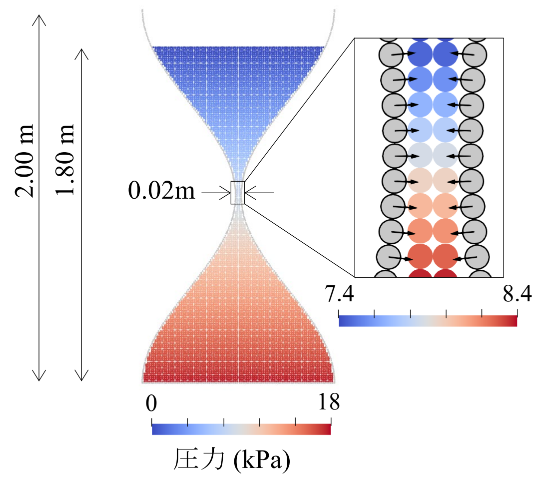


**図5 狭窄部を有する問題での圧力分布**

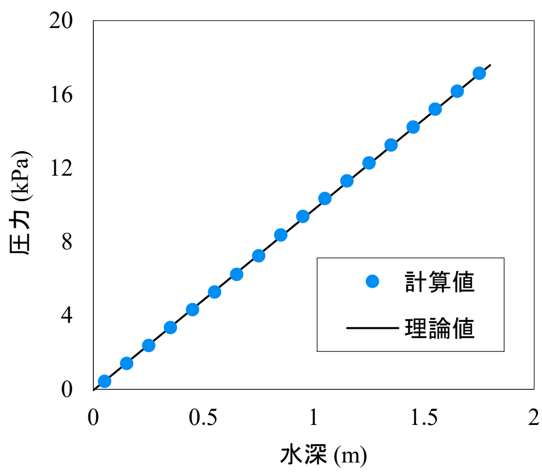


**図6 圧力の計算値と理論値の比較**

**自由表面流れ問題**

動的自由表面流れに対する提案手法の有用性の検討を行った．対象問題としてLobovskýらによるダムブレイクの実験を選択し，SPH粒子径，時間増分，密度，動粘度はそれぞれ0.0025 m，$10^{-4}$ s，1000 kg/m$^3$，$10^{-6}$ m$^2$/sに設定した．

**図7**，**図8**に実験と数値計算での水面形状を示す．これらの結果から，動的自由表面流れ問題に対しても，提案手法が実際の現象とおおむね整合した結果を得られることを確認した．

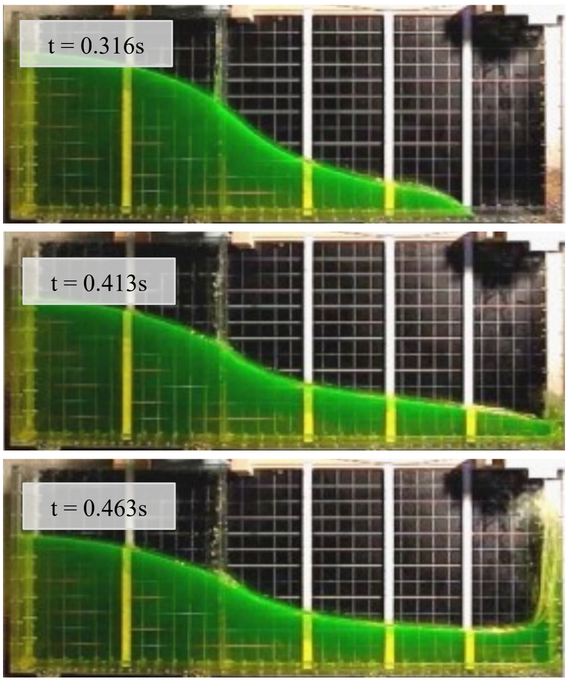


**図7 実験での水面形状**

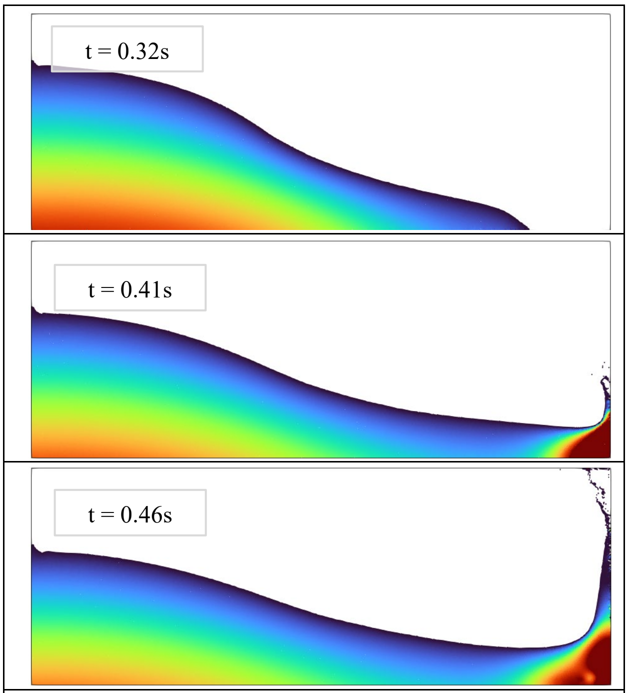


**図8 数値計算での水面形状**

## 6.　進捗状況の自己評価と今後の展望

粒子法のさらなる発展のため，高速化に関する**研究項目 A.** と高精度化に関する**研究項目 B** の 2 つの問題設定を掲げ，研究を遂行した．

**研究項目 A** については，独自の粒子法用のマルチグリッドソルバの MPI 化を達成することができた．開発が中心となり，具体的なスケーリング性能などは 2025 年度の継続課題にて実施予定である．

**研究項目 B** については，当初予定では，圧縮性・非圧縮性流体用の統一解法を提案する計画であった．しかし，変分マルチスケール法を粒子法へと展開するアイデアの実装に成功したため，方向転換し，境界条件処理の精度，計算の高速化を実現した．これは，速度・圧力の同時陰解法になり，未知数の増加が懸念される．しかし，**研究項目Ａ**のマルチグリッドソルバを対応させれば，ソルバに要する計算時間の短縮は実現できることを想定している．このため，2025 年度の継続課題へと発展させることができた．

以上，当初予定以上の進展がみられ，論文，学会発表などの多数の成果があげられた．