

マルチ GPU でスケールする粒子法コードの新展開～地球形成の謎の解明へ～

課題責任者

浅井 光輝 九州大学大学院工学研究院

浅井光輝*¹, 菖蒲迫健介*¹, 岡野翔大*¹, 森川ダニエル*²*¹九州大学大学院工学研究院, *²海洋研究開発機構付加価値情報創生部門数理科学・先端技術研究開発センター

キーワード：GPU, 粒子法, 幾何マルチグリッド, 速度 - 圧力一体型陰解法

1. 研究背景と目的

自然災害の被害予測を対象とするには、水(流体)と土(固体)といった物性の異なる物体の両者を扱うロバストな計算技術が必要である。土と水の特徴を包含した統合化シミュレーション法として、代表者らは粒子法ベースのマルチフェーズ解析技術を独自に開発することで、固体から流体、また両者の相変化が生じる難解な問題を解くツールを整備してきた。また斜面災害から津波災害までを解析対象として扱うため、解析領域が広範になり、これをできるだけ短時間で解析するために、ノードを跨ぐ多数の GPU 上でスケールする粒子法技術を構築してきた。

粒子法はこうした相変化を含むダイナミックな現象の数値解析において効果を発揮する解析手法である一方、解析精度についての議論は少ない。そこで、粒子法の中でも Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) 法に関して、計算精度を低下する要因解明に長年試み、前年度課題において、世界ではじめて 2 次収束の精度を有する粒子法の開発に成功した。

令和 5 年度の課題では、計算精度を担保するため陰解法の選択し、同時に計算速度の向上を図るため、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）の開発した。粒子法では、計算効率の観点から、計算精度の低い陽解法を選択してきた。提案した陰解法ソルバーにより、従来の陰解法の欠点を克服でき、より高精度な解が期待できる。令和 6 年度の継続課題では、津波遡上問題をさらに高詳細・広域に解析するために、MPI 並列による多数 GPU を使った陰解法技術へと発展させると同時に、陰解法のメリットを使った高粘性流体解析へと発展させる。今後の長期的なビジョンとして、地球形成過程を知り、生命の誕生と進化の鍵を解明するために、地球規模でのマントル対流の解析を実施する予定である。

2. 粒子法用の幾何マルチグリッドソルバ

前年度から、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ウ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¹⁾の改良を行った（図 1 参照）。まず、細かい格子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、 smoother としては Jacobi 法を採用した。

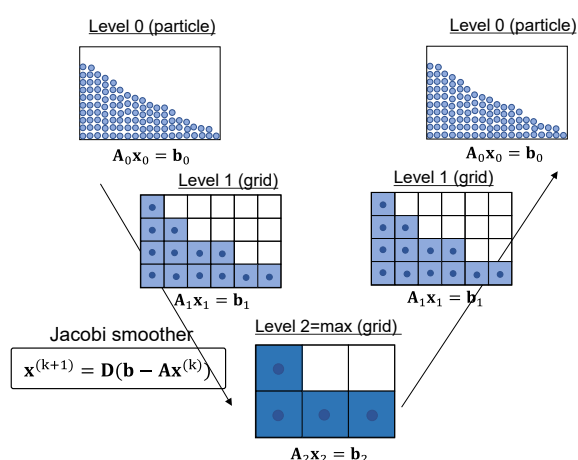
Geometric multigrid preconditioning ($M = D^{-1} + PL_1^{-1}R$)

図 1 バックグラウンドセルを使った幾何マルチグリッドソルバ

3. 速度 - 圧力一体型陰解法

射影法に基づく速度-圧力分離型解法の一つである ISPH 法²⁾では、流体粒子の影響範囲内に異なる複数の境界が存在する場合（図 2）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。

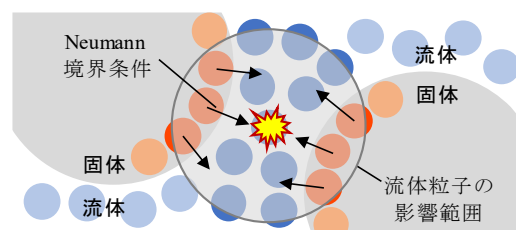


図 2 従来手法で正確な計算ができないケース

本課題では、速度-圧力一体型で陰解法で解く、新しい粒子法の開発に成功した。その内容を概説する

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。

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

$$\rho\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (2)$$

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。

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

ここで、 Δt 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、

$$\begin{aligned} \mathbf{v} &= \bar{\mathbf{v}} + \mathbf{v}' \\ &= \bar{\mathbf{v}} + \tau \left(-\rho \frac{D\bar{\mathbf{v}}}{Dt} - \nabla p + \rho \nu \nabla^2 \bar{\mathbf{v}} + \rho \mathbf{g} \right) \end{aligned} \quad (4)$$

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、 τ は次式で定義される安定化パラメータである。

$$\tau = \frac{1}{\rho} \left(\frac{\tau_{\text{dyn}}}{\Delta t} + \frac{c_2 \|\bar{\mathbf{v}}\|}{h_{\#}} + \frac{c_1 \nu}{h_{\#}^2} \right)^{-1} \quad (5)$$

本研究では、先行研究を参考に $\tau_{\text{dyn}} = 1.0$, $c_1 = 4.0$, $c_2 = 2.0$ 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。

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} \left\{ 1 - \left(1 - \frac{\tau\rho}{\Delta t} \right) \Delta t \nu \nabla^2 \right\} I & \frac{\Delta t}{\rho} \nabla \\ \left(1 - \frac{\tau\rho}{\Delta t} \right) \rho \nabla^T & -\tau \rho \nabla^2 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \bar{\mathbf{v}}^{n+1} \\ p^{n+1} \end{Bmatrix} \\ = \begin{Bmatrix} \bar{\mathbf{v}}^n + \tau \rho \nu \nabla^2 \bar{\mathbf{v}}^n + \Delta t \mathbf{g} \\ -\frac{\tau \rho^2}{\Delta t} \nabla \cdot \bar{\mathbf{v}}^n \end{Bmatrix} \end{aligned} \quad (6)$$

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。

4. 計算例と今後の方針

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/m³, 10^{-6} m²/s に設定した。

図 3 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。なお、本稿ではページ数の制限から説明は割愛するが、MPI 化にも概ね対応ができた。また文献³⁾に示す新たな高精度モデルの開発も別途実施した。今後、大規模問題を通して提案手法の有用性を示していく計画である。

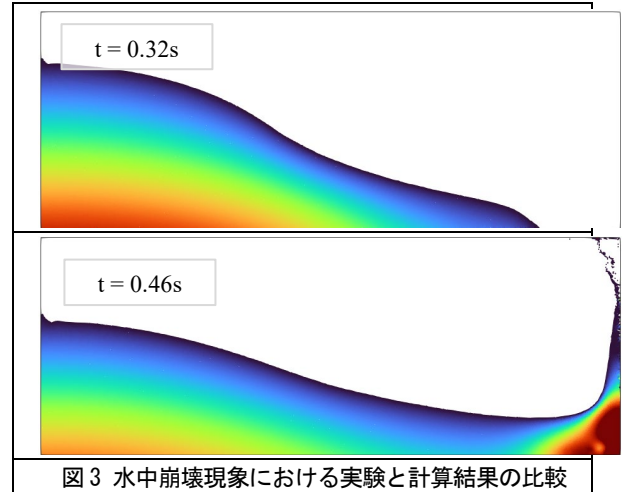
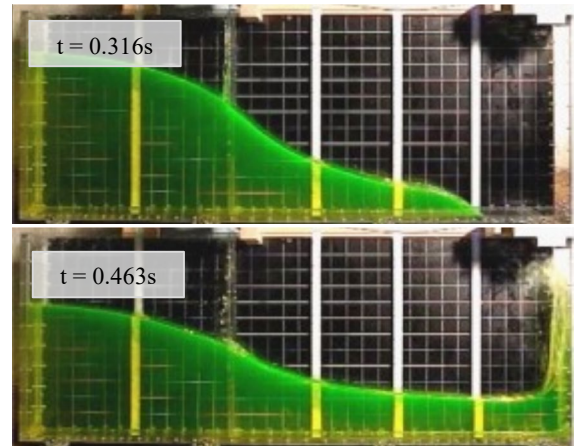


図 3 水中崩壊現象における実験と計算結果の比較

謝辞

本プロジェクトを通して、地球シミュレータに搭載されている最新の GPU(NVIDIA 製 A100)を利用する環境を利用させていただくことで、円滑な開発を進めることができ、多数の計算成果をあげることができました。この場をもって感謝申し上げます。

文献

- 1) Haruki Osaki, Daniel Morikawa, Mitsuteru Asai, “ISPH with a Geometric Multigrid Preconditioning Solver using Background Cells in GPU environment”, Proceeding of Particle 2023, 2023.

- 2) 岡野翔大, 森川ダニエル, 大崎春輝, 浅井光輝, “ $\mu(I)$ レオロジーを用いた流動化地盤解析の陰的 SPH 法による効率化”, 土木学会論文集, 2024.
- 3) Kensuke Shobuzako, Mitsuteru Asai, “A generalized smoothed particle hydrodynamics method based on the moving least squares method and its discretization error estimation, Results in Applied Mathematics (Accepted), 2025