

異常拡散を考慮した不均質場における物質移行の並列計算手法

東京大学 学生員 THANG Ta Duy

東京大学 正会員 井上 純哉

1. はじめに

岩盤中の水理問題は、放射性廃棄物の地層処分の安全性を評価する際に重要な問題となっている。一般に、高レベル放射性廃棄物の処分問題の安全性評価には、放射性廃棄物が地下水に溶解して人口バリアを通過し、さらに周辺岩盤を浸透流によって移行環境に至るという地下水シナリオが想定される。一般に広く用いられている物質移行解析手法の多くは Fick 拡散方程式に基いたものである。つまり、岩盤の不均質性や移行経路の違いにより生じると考えられる物質の分散を Fick 拡散方程式に含まれる拡散係数で表現しようとしている。しかし、実際の観測や実験から得られたデータは、多孔質地盤・亀裂性岩盤の両方とも必ずしもこの拡散方程式から得られた解と一致するとは限らない事が知られている。

そこで我々の研究では、そもそも地下水を媒体とした物質移行問題は、拡散方程式で表現し得ないと言う立場から、物質移行を表す最も一般的な積分方程式である Continuous Time Random Walk (CTRW) を流線上で解く事を試みている。CTRW を数値積分により正確に解く為には、流線の位置を正確に求めなければならない。流線を求める方法は様々な手法が提案されており、一般には高次形状関数で近似する、あるいはポテンシャル場を導出する為に用いた要素を再分割する方法などが用いられている。これは既存の研究により、低次の要素を用いて流線を記述すると、要素の分割方法によって得られる流線が大きく異なる事が知られている為である。本研究では、有限要素法に代わり、高次の形状関数を簡単に作成でき、節点の関連性も必要としない Element Free Galerkin 法 (EFGM) を導入する事で、より簡便に正確な流線を求める手法を提案する。ただし、この手法においては、問題の規模が大きくなった場合、剛性行列を計算するために必要となる隣接ノードの検索に多大な時間がかかる、さらには FEM と異なり節点の位置を変えても剛性行列を **banded** 行列にする事が容易でないと言う2つの問題が発生する。そこで本研究では、その解決方針として新たに並列計算手法を導入し、効率的に EFGM を用いた解析を行う手法を提案する。そして、提案した手法を用いベンチマークを行い、その効率性の確認計算を行う。

2. EFGM による線形方程式

一般に、非圧縮性流体を考慮した場合、水頭は次式のような Poisson 方程式を支配方程式として境界 Γ で囲まれた領域 Ω において記述される

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\mathbf{k} \frac{\partial \mathbf{h}}{\partial x} \right) = \nabla (\mathbf{k} \nabla \mathbf{h}) = 0 \quad \text{in } \Omega \quad (1)$$

ここで、 $\mathbf{k}$ は透水係数を表す。式(1)の境界条件は以下のようになる：

$$\begin{cases} h = h_1 & \text{in } \Gamma_1 \text{ (Dirichlet)} \\ \mathbf{k} \nabla \mathbf{h} \cdot \mathbf{n} = h_2 & \text{in } \Gamma_2 \text{ (Newmann)} \end{cases} \quad (2)$$

∇ はラプラス演算子であり、 $\mathbf{n}$ は境界 Γ_2 上での単位法泉ベクトルであり、2個目の境界条件は境界 Γ_2 での流量を表す。本研究では EFGM を用いてこの支配方程式を解くこととなる。EFGM により離散化すると、上式は以下のようになる。

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K}_{ij} & \mathbf{N}_{i|\Gamma_1} \\ \mathbf{N}_{j|\Gamma_1} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{h}_j \\ \lambda_j \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{F}_i \\ \mathbf{h}_i \end{bmatrix} \quad (3)$$

ここで、 N_i, h_i はそれぞれ任意の地点 $\mathbf{x}$ での形状関数及び水頭である。 F_i, K_{ij} は下記のように定まる

$$\begin{cases} \mathbf{K}_{ij} = \int_{\Omega} \nabla N_i \cdot \mathbf{k} \cdot \nabla N_j dV \\ \mathbf{F}_i = \int_{\partial\Omega} N_i \cdot \mathbf{k} \nabla \mathbf{h} \cdot \mathbf{n} d\Gamma = \int_{\partial\Omega} N_i \lambda d\Gamma \end{cases} \quad (4)$$

3. 並列計算

本研究で用いた PC クラスタは、1 台あたり 2 つの CPU を持つ PC8 台をネットワーク結合して構築した並列計算機である。各ノードが独立したメモリと CPU を持つため、これらを統一的に扱うには、プログラムを同時に実行させる仕組みが必要である(図1)。本研究では様々な環境において広く用いられている MPI ライブラリの一つである MPICH (Version 1.2.6) を用いた。

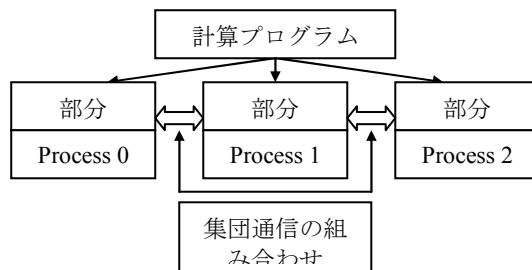


図1. 並列計算の仕組み

4. 並列計算アルゴリズム

4.1 ガウス積分による剛性行列の導出

EFGM における全体剛性行列導出のために必要な処理は以下のようになる

キーワード： EFGM, 並列計算, 異常拡散,

連絡先： 〒113-8656 東京都文京区本郷 7-3-1 TEL 03-5841-7455 FAX 03-5841-7496

- ・ 均一な GRID 網を作成し、各 CPU に対応付け
- ・ GRID 中のガウス点ごとに隣接する節点を検索
- ・ 形状関数を作成ガウス点毎のローカルな剛性行列の計算
- ・ ローカルな剛性行列の総和としての全体剛性行列の導出

本研究では、EFGM の性格上ガウス積分が必要となる、仮想的な要素 (GRID) を個々の CPU に対応させることで、並列化を行った (図 2) . その結果、最終的な剛性行列の算出まで各ノードが完全に独立した処理を行うことが可能になり、並列計算におけるボトルネックとなるノード間の通信量を大幅に減らすことに成功した.

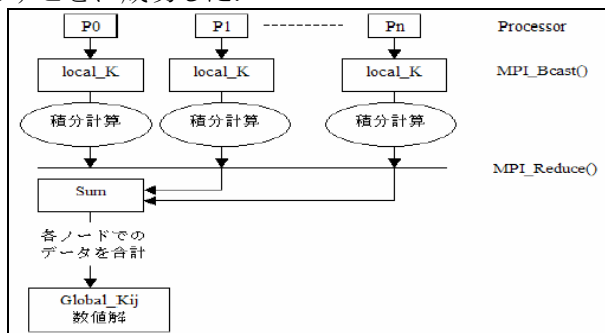


図 2. Gaussian Quadrature

4.2. 線形一次方程式の解法

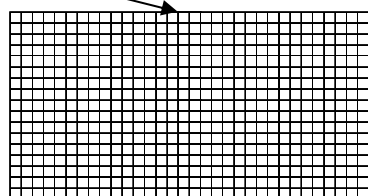
上述する式(3)を解く方法には、様々な手法が存在する。その中でも最も良く利用されているものには Gauss Elimination, Jacobi method, Gauss-Seidel Method, Conjugate Gradient method などがある。本研究では、Poisson 式に対して優良な収束性を持つ手法である Conjugate Gradient Method を用いた。

5. ベンチマークテスト

提案した手法の効率性を確認するためこの節でベンチマークを行う。ベンチマークとして用いた問題を設定は以下の通りである。

- ・ 節点は均一な配置とする
- ・ 吸い込み点が周辺の中央にある

吸い込み点 (1,1)



$$\begin{aligned} \text{GE} \nabla(k \nabla u) &= 0 \\ \text{BC} \begin{cases} u = 0.0 & \in (1,1) \\ \frac{\partial u}{\partial \phi} = 0.0 & \in \text{その他} \end{cases} \end{aligned}$$

(0,0) 図 3. ベンチマークに用いる領域と BC

まず、本研究で用いた手法の収束性について考察を行った。この図 4 において、横軸は収束計算の繰り返し回数で、縦軸は誤差を表す。同図から、節点が 1 万個程度の場合に対しても、10 回程度の収束計算により誤差は十分に小さくなったことが見て取れる。

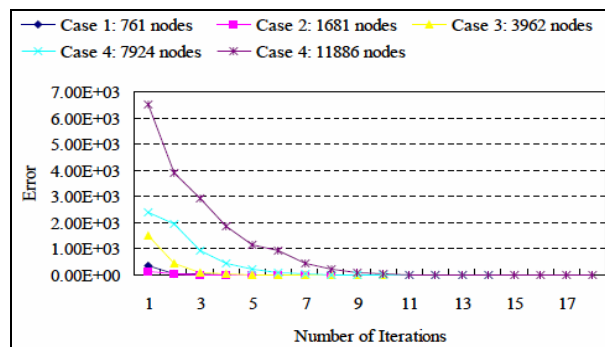


図 4. 収束計算の繰り返し回数と誤差

次に、提案した手法の効率性を評価する為、プロセッサの数を徐々に増やし、計算時間の変化を調査した。図 5 は横軸がプロセッサの数、縦軸は全体の計算時間を表している。結果は、8 つの CPU (ノード) を用いた場合の計算時間は 1 つのノードを用いた場合の計算時間の 1/8 程度になっており、本手法の効率性の高さを示している。本研究では、節点数が 1 万個程度の中規模の計算であった為、多くの時間は EFGM の弱点である全体剛性行列の導出に費やされているが、大規模な問題においては、要素剛性行列導出方法の効率性の高さは一次方程式の解法に勝っている為、多くの時間は線形一次方程式の解法に費やされる事になると予想でき、有限要素法と同等のパフォーマンスが期待できる。

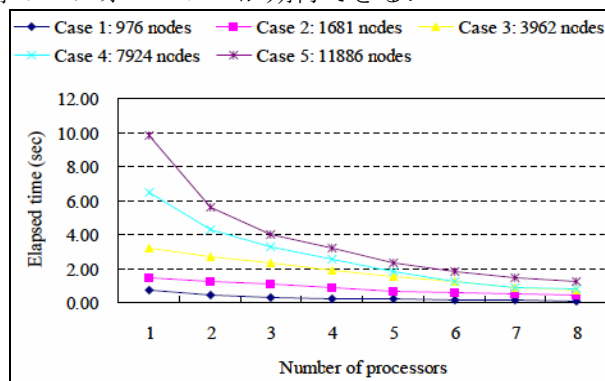


図 5. 流れ場の計算時間対プロセッサの数

6. 結論

本研究ではより正確な流線を簡便に算出できる EFGM の効率的な並列計算法を提案した。大きな規模の流れ場を考慮する場合においても、プロセッサの数を増やすことにより簡便に流線の計算が可能になると考えられる。今後の課題としては、吸着や科学反応などの影響を組み込むこと等が考えられる。

7. 参考文献

- [1] Belytschko, T., Lu, Y.Y. and Gu., L., 1994. Element-free Galerkin methods, International Journal of Numerical Methods in Engineering, 37:229-256
- [2] 井上純哉・金亨穆, 2003. 材料の不確定性を考慮した エレメントフリーガラーキン法の拡張, 土木学会論文集, No.579, I-67
- [3] P. Pacheco, 1997, Parallel programming with MPI, Morgan Kaufmann