

# 量子渦計算の高速多重極展開法を用いた高速化

齋藤 智和<sup>†</sup> 横田 理央<sup>‡</sup>  
東京工業大学<sup>†</sup> 東京工業大学学術情報国際センター<sup>‡</sup>

## 1 はじめに

量子乱流は多数の渦糸からなる非粘性流体であり、その解析は渦糸を直接モデリングする渦糸近似法が有効である [1]. 流体のある位置における速度は渦度場から計算されるが、計算機上でこれを計算する場合、流体中の渦粒子のそれぞれについて Biot-Savart の法則による相互作用を計算する必要がある。これは  $N$  体問題の一種であり、単純に全ての組について相互作用を計算した場合、流体中の  $N$  個の渦粒子に対して  $O(N^2)$  の時間計算量が必要となる。本研究では高速多重極展開 (FMM) を用いて上記の渦糸の速度計算の計算量を  $O(N)$  に低減する。また、GPU 上で FMM を実装することで更なる高速化を実現する。

## 2 渦法

渦糸近似法では流体を渦糸の集合としてモデリングし、渦糸間の相互作用を計算することで流体運動を解く [2]. 具体的には、以下の速度のポアソン方程式と非粘性の渦度方程式を解くことで解を得る。

$$\nabla^2 \mathbf{u} = -\nabla \times \boldsymbol{\omega}, \quad (1)$$

$$\frac{D\boldsymbol{\omega}}{Dt} = \boldsymbol{\omega} \cdot \nabla \mathbf{u}. \quad (2)$$

ここで、 $\mathbf{u}$  は速度ベクトル、 $\boldsymbol{\omega}$  は渦度ベクトル、 $\nu$  は動粘性係数である。渦糸がある点において誘導する速度は、式 (1) をグリーン関数  $G$  で重み付けして積分することで得られる Biot-Savart

の法則に従う。

$$\mathbf{u}_i = \sum_{j=1}^N \boldsymbol{\alpha}_j g_{ij} \times \nabla G. \quad (3)$$

ここで用いる 3 次元ラプラス方程式のグリーン関数は  $G = 1/4\pi r$  と表される。式 (3) の計算が  $N$  体問題となるため、この部分の計算を FMM で高速化する。また、式 (2) は Biot-Savart の勾配と渦度の内積により計算され、ここにも FMM を適用することができる。

## 3 高速多重極展開法 (FMM)

FMM は  $N$  体問題を  $O(N)$  の時間計算量で解くアルゴリズムである [3]. FMM では粒子が存在する空間を階層的に箱に分割し、末端の箱の粒子数が一定の以下になるまで分割を繰り返す。この木構造を元に近傍の箱同士の相互作用は直接式 (3) を計算し、遠方の箱同士の相互作用は近似的に計算することで計算量を  $O(N)$  に低減する。遠方の箱同士の相互作用は多重極と局所展開を用いるが、その次数を大きくすると精度が高くなる。周期境界条件は空間の一定方向に同じ場が一定の周期で繰り返されるという条件であるが、FMM では木構造の根の多重極を有効に用いることで、その場合でも  $O(N)$  で計算することができる。

## 4 実験

FMM の速度と精度を検証するために、まずは乱数で配置した粒子について実行時間と誤差についての実験を行った。実験で使用した CPU は AMD EPYC 7402 24-Core Processor、GPU は NVIDIA GeForce RTX 3090 である。

### 4.1 粒子数と実行時間

Biot-Savart の法則による渦糸同士の相互作用の計算を、相互作用を直接計算する場合と、FMM を用いた場合の実行時間を計測したとき

Efficient numerical computation of quantum vortex with fast multipole method

<sup>†</sup> Tomokazu Saito, Tokyo Institute of Technology

<sup>‡</sup> Rio Yokota, Tokyo Institute of Technology, Global Scientific Information and Computing Center

の結果を図1に示す。粒子数  $N$  を増加させた

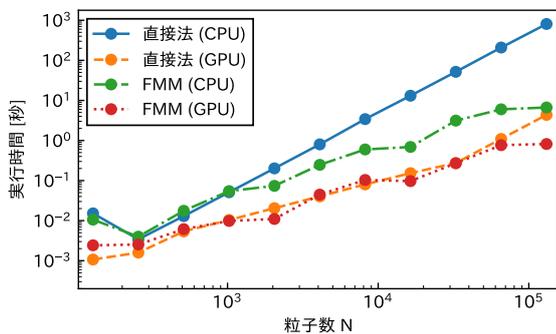


図1 Biot-Savart の法則による渦糸同士の相互作用計算の実行時間

時、全ての組についての相互作用を直接計算した場合には計算時間が  $O(N^2)$  のオーダーで増加しているが、FMMを用いて計算した場合は、計算時間が  $O(N)$  のオーダーで増加していることが確認できる。

#### 4.2 級数展開の次数と誤差

Biot-Savart の法則による渦糸同士の相互作用の計算について、FMMの次数  $P$  を変化させた場合の出力の誤差を計測した時の結果を図2に示す。次数  $P$  の増加に伴い誤差が減少していることがわかる。

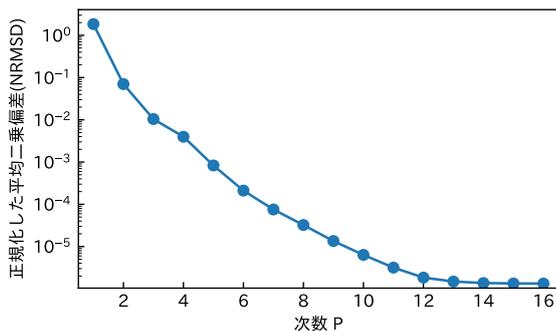


図2 FMMの次数  $P$  と誤差の関係

#### 4.3 周期境界条件の範囲と誤差

周期境界条件下においてFMMで計算した場合と周期境界をフーリエ変換を用いて厳密に計算できるEwald法で計算した場合とのその誤差を計測した結果を図3に示す。FMMの周期鏡像を増やすことで周期境界条件の近似精度が厳密なEwald法に近づいていることが見てと

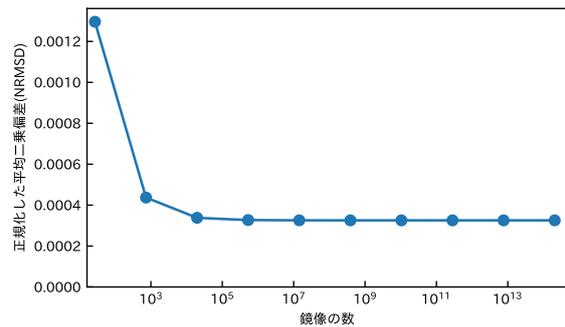


図3 周期境界条件下のFMMの鏡像の数と誤差の関係

れる。

### 5 まとめ

量子渦計算を渦法で計算する場合、渦粒子間の相互作用をBiot-Savartの法則に基づき計算する必要がある。これは  $N$  体問題の一種であり、単純に計算すると  $O(N^2)$  の計算量が必要となるところを、FMMを用いることで  $O(N)$  の計算量できる。本稿ではGPU上でFMMを実行することで、 $N = 2^{17}$  のときには相互作用を同GPUで直接計算した場合よりも5.33倍高速に計算できることが確認できた。

### 謝辞

本研究はJSPS科研費JP22H01403の助成を受けたものである。

### 参考文献

- [1] S. Yui, H. Kobayashi, M. Tsubota, W. Guo, Fully Coupled Two-Fluid Dynamics in Superfluid 4He: Anomalous Anisotropic Velocity Fluctuations in Counterflow, *Physical Review Letters*, Vol.124, 155301 (2020).
- [2] R. YOKOTA and S. OBI, “Vortex Methods for the Simulation of Turbulent Flows: Review,” *Journal of Fluid Science and Technology*, vol. 6, no. 1, pp. 14 – 29, 2011, doi: 10.1299/jfst.6.14.
- [3] L. Greengard and V. Rokhlin, “A fast algorithm for particle simulations,” *Journal of Computational Physics*, vol. 73, no. 2, pp. 325 – 348, Dec. 1987, doi: 10.1016/0021-9991(87)90140-9.