

jh170051-NAH

粒子法の高精度化と大規模流体シミュレータへの応用

井元 佑介（東北大学）

Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) などの粒子法は、津波遡上のような大規模な流れ問題の数値計算などに利用されているものの、安定性・収束性のような数学的正当化や、離散化パラメータの選択のような数値計算手法としての基盤理論の整備が十分でない。本課題では、粒子法を用いた流れ問題の数値計算を数値解析学・計算力学双方の観点から検証し、得られた知見を用いて流体シミュレータの開発を行う。さらに、次世代 HPC にも有効なアプリケーションとなることを目指し、大規模計算に向けたチューニングと可視化まで行う。

1. 共同研究に関する情報

(1) 共同研究を実施した拠点名

東京大学

名古屋大学

京都大学

(2) 共同研究分野

- 超大規模数値計算系応用分野
- 超大規模データ処理系応用分野
- 超大容量ネットワーク技術分野
- 超大規模情報システム関連研究分野

(3) 参加研究者の役割分担

- 粒子法の高精度化
 - 井元 佑介（東北大学：代表者）
 - 田上 大助（九州大学：副代表者）
 - 渡部 善隆（九州大学）
- 大規模流体シミュレーションへの適用と性能評価
 - 浅井 光輝（九州大学：副代表者）
 - 三目 直登（東京大学）
 - 西浦 泰介（海洋研究開発機構）
- 計算結果の可視化
 - 小野 謙二（九州大学）
 - 野中 丈士（理化学研究所）

2. 研究の目的と意義

研究の目的：SPH (Smoothed Particle Hydrodynamics) や MPS (Moving Particle

Semi-implicit) に代表される粒子法は、しばしば格子法と総称される差分法や有限要素法のようなメッシュを用いる数値シミュレーション手法では困難な、領域の変形・分裂・結合を伴う問題を効率よく計算できるシミュレーション手法として幅広く利用されている。例として、津波遡上のような流れ問題のシミュレーション（図 1）が挙げられるが、その計算モデルが非常に大規模となることから、HPC などの計算資源を有効活用したアプリケーションの開発が期待されている。



図 1 浅井らによる粒子法を用いた津波遡上のシミュレーション

しかしながら、粒子法の数値解析は進みつつあるものの、格子法の数値解析と比較すると十分でない。いくつかの限定された方程式に対しては、離散化パラメータの選択に対

する数値解析の結果も存在する。ところがこれらの結果では、対象となる方程式が現実の津波遡上に対する数理モデルとは大きく異なる、用いる離散化パラメーターの選択は数学的には厳密であるものの実用に適した枠組みで構築されていない、などの問題点がある。さらに現在行われている粒子法を用いたシミュレーションでは、時間積分の進行に伴う粒子の偏在に起因する精度低下や不安定化を避ける必要がある。そのため、精度良いシミュレーションを行うために、離散化パラメーターの選択や粒子偏在の回避に関して経験則に頼らざるを得ない。このような現状から、大規模流体計算を見据えた粒子法の数学的基盤の整備と、それらの知見を用いた粒子法の開発が必要である。

そこで、本共同研究では、粒子法を用いた流れ問題のシミュレーションを数値解析学・計算力学双方の観点から検証し、得られた知見を用いた大規模計算モデル向けの粒子法流体シミュレータの開発を目的とする。さらに、次世代の HPC にも有効なアプリケーションツールとなることを目指し、大規模計算のチューニングと可視化まで行う。

研究の意義：2011 年 3 月 11 日の東日本大震災以降、災害影響評価を目的とした数値シミュレーションはいつそう注目を集めている。その中でも粒子法を用いた津波遡上シミュレーションは砕波や瓦礫・構造物の流出をより詳細に再現し、多方面から注目を集めてきた。一方で、研究の目的でも述べた通り、粒子法の数値解析は不十分であり、流れ問題における高精度・高安定な離散化パラメーターの選択といった数値シミュレーションの現場で必要な情報が未解決である。その結果、現状では離散化パラメーターの選択を経験則に頼るしかなく、数値シミュレーションの際に離散化パラメーターの組み合わせを検討することに時間を費やしてしまう。特に粒子法の場合は、粒子分布、粒子体積、重み関

数、影響半径、時間刻みといった離散化パラメーターだけでなく、粒子の偏在を避ける手法に現れるチューニングパラメーターも必要となるため、パラメーター選択に費やす時間は比較的多くなる。それが大規模津波シミュレーションで必要とされる数億～数十億粒子規模の計算モデルになれば致命的な時間のロスになる。したがって、本研究によって構成的にパラメーター選択が可能となれば、粒子法を用いた数値計算の精度向上が期待されるだけでなく、計算時間短縮にも貢献できる。さらに、得られた条件を最新の大規模流体シミュレータに適用し、評価・分析することにより、本研究による改良が最新の応用研究でどのように活かされるかを確認することが期待できる。

以上より、本共同研究課題の目的が達成されれば、信頼性の高い流体シミュレーションが実現でき、シミュレーションによる災害影響評価への貢献などが期待できる。さらに、本研究の実施により、基礎研究から応用研究まで一貫した本格的な粒子法に関する共同研究を実現することができる。

3. 当拠点公募型共同研究として実施した意義

粒子法を用いた流れ問題のシミュレーションは、津波遡上シミュレーションのような次世代の HPC の計算資源を有効活用できるアプリケーションとして期待されているため、大規模粒子シミュレーションを想定した開発と評価が必要である。また、本研究で開発した大規模流体シミュレーションが将来的にアプリケーションツールとして利用され続けるためには大規模計算の高速化や可視化ツールといったソフトウェアとしての充実も不可欠である。したがって、JHPCN の枠組みを使い、HPC 分野の研究者と数学、計算力学、可視化の研究者が連携することで初めて、本研究の目的を達成することが可能になる。

4. 前年度までに得られた研究成果の概要

当拠点公募型研究については、本年度より開始した共同研究であるが、個々の研究については、前年度までに以下のような成果が得られている。

【数値解析に関するこれまでの成果】井元、田上によってポアソン方程式および熱方程式に対する粒子法の数値解析を行い、誤差評価を得ている。得られた評価では、従来の粒子法を含むより広い枠組みである一般化粒子法を導入し、事前誤差評価に要求される離散化パラメーターの十分条件である正則条件を明確に与えている。これにより、“良い数値シミュレーション”に必要な空間の離散化パラメーターの選択方法を明らかにした。さらに、利用可能な重み関数の条件も明らかにし、MPS や SPH といった従来の粒子法の重み関数だけでなく、従来は用いられていなかった重み関数も選択できることを明らかにした。

【流体シミュレータ開発に関するこれまでの研究成果】浅井らは 2 次元差分法と 3 次元粒子法を用いたマルチスケールの大規模流体シミュレータを開発し、実際に起こりうる巨大地震を想定した大規模津波シミュレーションを行っている (図 1)。さらに、浅井らは圧力の陰的な求解法を簡易化することにより、精度の低下を最小限に抑える完全陽解法化された粒子法を開発しており、低粘性流体シミュレーションにおける大規模計算の大幅な高速化を図っている。

【流体シミュレータの性能強化に関するこれまでの研究成果】西浦らは大型計算機を有効活用するために粒子法に対する共有メモリ型並列化手法の開発と、動的負荷分散手法を用いた分散メモリ型並列化の開発を行い、京コンピュータや地球シミュレータ上で数億～数十億粒子を用いた大規模粒子並列計算の高効率化を実現している。さらに、三目らは流体解析に粒子法、構造解析に有限要

素法を用いた高精度の流体構造連成シミュレーションを実現するために、構造の形状変化に強いポリゴン壁境界モデルを開発している。小野、野中らは HIVE (Heterogeneously Integrated Visual-analytics Environment) と呼ばれる大規模分散並列シミュレーション結果を可視化する並列可視化システムを既に開発している。HIVE は、スケーラブルな並列レンダリング性能、マルチプラットフォーム対応、マルチシナリオ対応 (ローカル/リモート/コンカレント/In-situ 可視化)、自動処理 (ワークフロー) などの特徴を備えており、京コンピュータ上で格子法を用いた流れ問題の数値シミュレーション結果を、別途用意した可視化用の環境を用いることなく直接並列可視化を行うこと、超大規模計算モデルから得られる計算データを間引くことなく高解像度での可視化を行うこと、などに成功している。

5. 今年度の研究成果の詳細

本研究では以下の A, B, C について共同研究を行った。

- A [数値解析学・計算工学の観点からの検証] 流れ問題に対する粒子法の数値解析学・計算工学双方の観点からの基盤理論整備
- B [流体シミュレータの開発・検証] 開発した粒子法の大規模流体シミュレータへの適用および妥当性確認
- C [流体シミュレータの性能強化] 大規模並列計算の高速化とオフライン可視化の実装

A [数値解析学・計算工学の観点からの検証] では、数値解析の知見を用いて、非圧縮性流れ問題に対する粒子法スキームの収束性の検証を行った。用いた粒子法スキームは、非圧縮性 Navier-Stokes 方程式にある条件下で厳密に収束するペナルティ問題を基にした完全陽解法であり、空間離散化に我々が提案した一般化粒子法を用いたスキームである。

さらに、本スキームでは、一度圧力を求めたあとに、圧力補間による圧力の修正を加えた。本スキームに対して、Taylor-Green の渦流れの数値実験を行い、厳密解との誤差を計算した (図 2)。

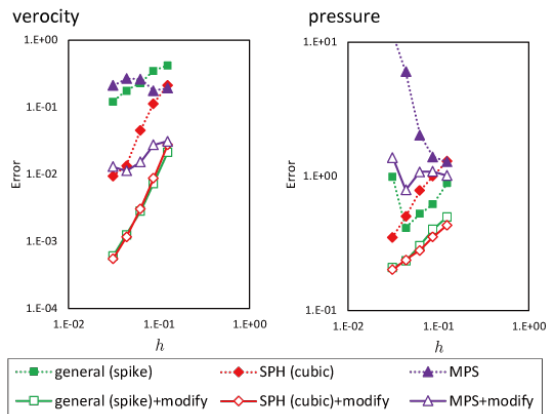


図 2 正則条件を満たす離散化パラメータおよび重み関数の十分条件の下での影響半径に対する誤差のグラフ。

従来手法 (破線) と比較して本スキーム (実線) は圧力の修正により高精度な解が得られること、さらに、我々のポアソン方程式や熱方程式の誤差評価の十分条件として現れる離散化パラメータに対する正則性や重み関数の十分条件を考慮することで、本スキームの数値的な収束性を確認した。これにより、本スキームのパラメータ選択について 1 つの指針を示すことができ、研究 B への大規模計算での検証の足がかりを示すことができた。

B [流体シミュレータの開発・検証] では、研究 A で開発されたスキームの並列流体シミュレータへの実装と妥当性検証を行った。粒子法のための動的領域分割ライブラリである LexADV_EMPS を利用して実装された大規模並列流体シミュレータ HDDM_EMP S に対して、一般化粒子法のスキームと圧力補間による圧力修正を追加実装し、並列環境での動作確認を行った。また、京都大学にある大型津波水槽 HYTOFU を用いた水槽実験の再現解析を行い、研究 A で開発したスキームの妥当性確認を実施した。数値実験結果は実験で観測された波高と良い一致を示し、実

験値とよく一致した圧力履歴が得られた (図 3)。

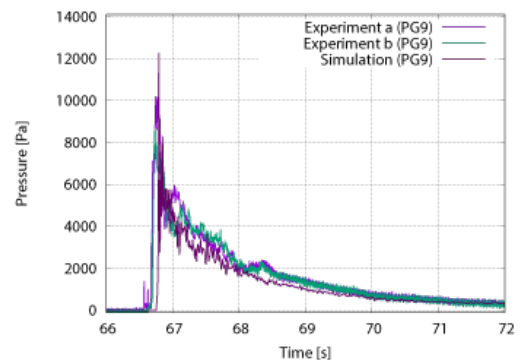


図 3 水槽実験における圧力の時間履歴

さらに、大規模化に向けた基礎検討として、約 3000 万粒子を用いた高知県の津波遡上シミュレーションを行った。開発した陽的粒子法と従来の半陰的粒子法の両手法でほぼ同等の結果が得られることを確認した (図 4)。

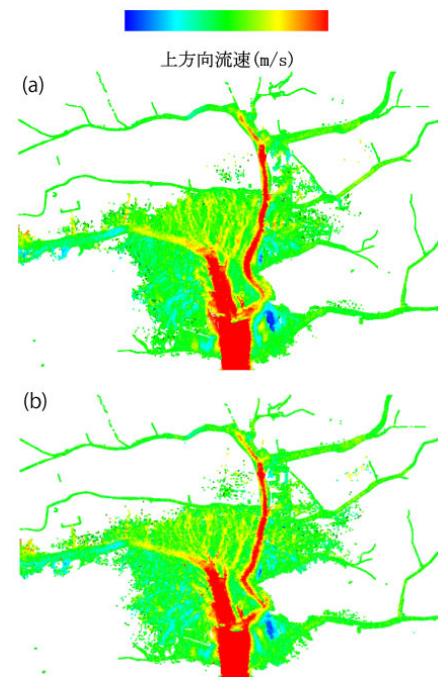


図 4 (a) 陽的粒子法と (b) 半陰的粒子法の流速分布の比較

C [流体シミュレータの性能強化] では、通信と演算のオーバーラップを実装し、並列化性能の改善を図った。通信と演算のオーバーラップは、まず始めに通信領域に存在する粒子の相互作用力計算を行い、次に残りの領域の粒子間相互作用計算を行うと同時に先に計算しておいた通信領域の粒子について通信を

行うことで実施する。この時、通信領域とそれ以外の領域に存在する粒子を判別する作業が必要になる。本研究では、通信領域とそれ以外の領域で粒子番号が連続になるようにソートし、IF 文を用いずに通信対象の粒子を判別可能にした。さらに、通信領域以外の粒子については空間充填曲線を用いて粒子番号を並び替えることで、キャッシュ効率の改善も試みた。図 5 に地球シミュレータ (ES) および「京」コンピュータ (K) 上で性能測定を行った結果を示す。

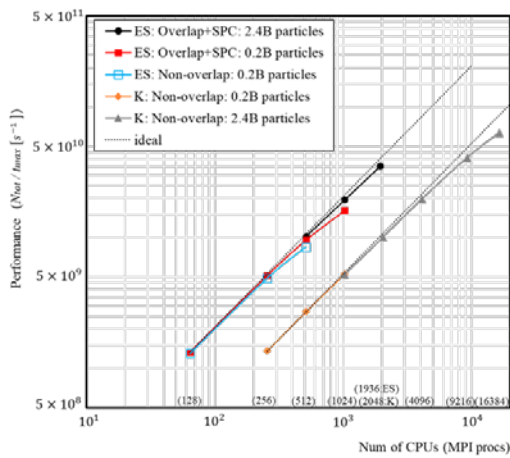


図 5 通信と演算のオーバーラップの効果

通信と演算のオーバーラップを行ったことで、ES では並列化性能が改善された。しかし、K では整数の演算性能が劣るためにソートによるコストが大きく、オーバーラップによる恩恵は得られなかった。つぎに、FX100 に対する本粒子法コードのスケール性能を調べた結果を図 6 に示す。SPH 粒子の初期配置は、水平で均一 (Uniform) な分布と山型で不均一 (Nonuniform) な分布の二つを用意した。FX100 においても K や ES と同様に概ね良い並列化性能を得ることができた。特に、不均一な粒子分布であっても負荷バランスが良くとれていることが確認できた。

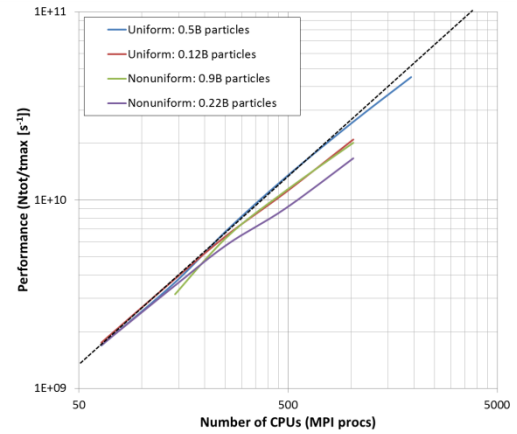


図 6 FX100 における粒子法のスケール性能

また、粒子法による津波遡上シミュレーションでは、水域のみ計算負荷がかかる。そこで、解析領域全体に存在する壁粒子を各小領域 (タイル) に分割して管理し、水粒子が存在する壁粒子のタイルのみを有効とし、水域の発達とあわせて壁粒子も増加させていく “Expanding Slice Grid 法” を開発した (図 7)。Expanding Slice Grid 法の並列化効率を計測するために、海底域、陸地、構造物を含む水柱崩壊のテストモデルを作成し、小規模モデルでは 4096 コア、大規模モデルでは 20480 コアを使用した計測において、92% の弱スケール性能を達成することができた。

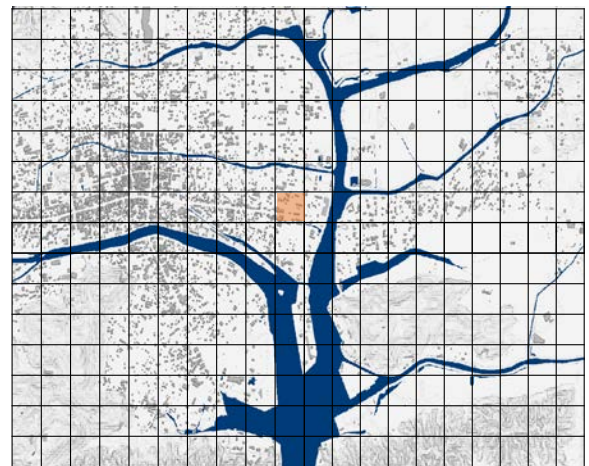


図 7 Expanding Slice Grid 法の概略図。水領域 (青) を含むタイルのみを計算領域とする。

さらに、並列可視化処理を行う際に利用するノード数と出力されたシミュレーション結果のファイル数と一致しないケースが考

えられるため、ファイル数が一致しなくても読み書き可能な、柔軟なファイル I/O を実現できる機能を粒子データ管理ライブラリ (PDMlib) に適用した。さらに、粒子データの表現機能強化の一環として建物自体も粒子データで表現し物理量 (圧力) をカラーマッピングする手法を開発し、津波の粒子データ群を直交等間隔でサンプリングし最外面をポリゴンデータとして抽出し半透明データとして重ね合わせる描画方法を開発した (図 8)。

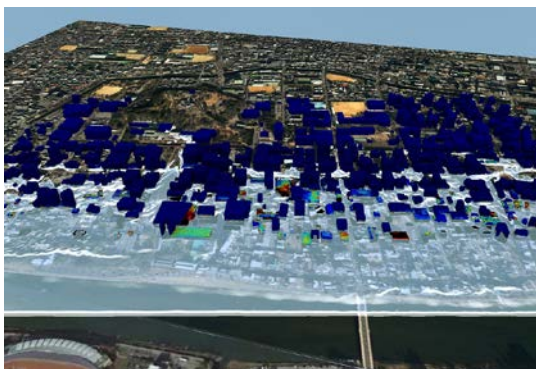


図 8 圧力のカラーマッピングを用いた可視化

6. 今年度の進捗状況と今後の展望

研究 A では、数値解析学・計算工学の双方の知見を用いて、流れ問題に対する陽的粒子法のスキームを開発し、本スキームの収束性における離散化パラメーターの十分条件を数値的に明らかにした。研究 B では、数百万～数千万の粒子を用いて、津波水槽実験や従来の陽的粒子法や半陰的粒子法と比較することにより、本スキームの大規模計算での妥当性を示した。研究 C では、さらなる大規模計算に向けて、ターゲットマシンでの高効率な並列粒子計算を実現している。さらに、津波遡上シミュレーションの防災・減災への応用を視野に入れた可視化技術の開発にも成功している。

以上より、全ての研究項目で目標を達成することができ、本共同研究課題の目標である、数値解析学・計算力学双方の観点から検証された流体シミュレータの開発・検証、および

実問題への応用に向けた大規模並列計算の高速化と可視化技術の開発を達成できた。

今後は、本課題で得られた知見を陰的粒子法にも適用することで、土石流などを考慮した高粘性流れ問題へと解析対象を拡張し、さらに、ヘテロな計算環境下でも本シミュレータを運用できるように、本シミュレータの GPU 化なども図る。これらは当拠点公募型共同研究の継続課題として実施する予定である。

7. 研究成果リスト

(1) 学術論文

1. Y. Imoto, D. Tagami. Truncation error estimates of approximate differential operators of a particle method based on the Voronoi decomposition. *JSIAM Letters*, Vol. 9, 69-72, 2017(査読有).
2. M. Furuichi, D. Nishiura. Iterative load-balancing method with multigrid level relaxation for particle simulation with short-range interactions. *Computer Physics Communications*, 219, 135-148, 2017(査読有).
3. T. Kinoshita, Y. Watanabe, M. T. Nakao. Validated constructive error estimations for biharmonic problems, *Reliable Computing*, vol. 25 pp. 168-177, 2017(査読有).
4. Y. Watanabe, M. T. Nakao, K. Nagatou. On the compactness of a nonlinear operator related to stream function-vorticity formulation for the Naviere–Stokes equations, *JSIAM Letters*, vol. 9, pp. 77-80, 2017(査読有).
5. N. Mitsume, A. S. Donahue, J. J. Westrink, S. Yoshimura, Coupling methods between finite element-based Boussinesq-type wave and particle-based free-surface flow models (投稿中).
6. J. Nonaka, Eduardo. C. Inacio, K. Ono, Y. Kawashima, T. Kawanabe, F. Shoji. D

- ata I/O management approach for the post-hoc visualization of big simulation data results. *International Journal of Modeling, Simulation, and Scientific Computing*. Vol. 9, No. 3(査読有).
7. 一色正晴, 浅井光輝, 江口史門, 宮川欣也, 津波防災に向けた大規模粒子解析のオンライン・オンデマンド可視化システム, 電気学会論文誌 C (電子・情報・システム部門誌) IEJ Transactions on Electronics, Information and Systems, Vol. 137 No.10, pp. 1422-1428, 2017(査読有).
 8. 小笠原圭太, 浅井光輝, 古市幹人, 西浦泰介. 大規模津波遡上解析に向けた安定化 ISPH 法の陽的時間積分スキーム. 土木学会論文集 A2(応用力学)特集号, Vol.73, 2018 年(査読有).
 9. 原崎健輔, 浅井光輝, 合田哲朗, 笠間清伸, 西浦泰介. SPH-DEM カップリング解析による防波堤マウンドのパイピング破壊解析. 土木学会論文集 A2(応用力学)特集号, Vol.73, 2018(査読有).
 10. 仲矢直樹, 浅井光輝, 馬場俊孝, 正垣翔太, 2 次元差分法による津波遡上解析における建築物・堤防高のモデル化忠実度が与える差異, 地震工学講演会論文集 (土木学会論文集 A1 特集号), 2018(査読有).
 11. 原崎健輔, 浅井光輝, SPH-DEM による固液混相流解析の妥当性確認と粗視化粒子モデルによる洗掘現象解析, 日本計算工学論文集, 2018 巻, p.20182001, 2018(査読有).
 12. Y. Li, M. Asai, Fluid-rigid body interaction simulation based on a stabilized ISPH method incorporated with the impulse-based rigid body dynamics, 日本計算工学論文集, 2018 巻, p.20182010, 2018(査読有).
- (2) 国際会議プロシーディングス
13. D. Tagami, Mathematical analysis of characteristic generalized particle methods for convection-diffusion equations, Proceedings of the 12th International SPHERIC Workshop, Spain, June, 2017.
- (3) 会議発表
- 国際会議 (一部抜粋)
14. Y. Watanabe. Some computer-assisted proofs for the Naviere–Stokes equations, Rigorous Numerics for Infinite Dimensional Nonlinear Dynamics, Banff International Research Station for Mathematical Innovation and Discovery, Banff, Canada, May 2017 (invited).
 15. D. Nishiura, M. Furuichi, S. Tsuzuki, H. Sakaguchi. Applications of a particle element modeling for engineering problems. 1st Workshop on Large-Scale DEM-LBM, UK, July 2017
 16. N. Mitsume, T. Yamada, S. Yoshimura. Analysis of Free-Surface Flow Interacting with an Elastic Beam Using Mesh-free Particle Method and Finite Element Method, 14th US National Congress on Computational Mechanics (USNCCM14), Montreal, Canada, July 2017.
 17. Y. Imoto, D. Tagami. An error estimate of particle methods for Poisson equation with Neumann boundary conditions. International Conference on Mathematical Analysis of Continuum Mechanics (CoMFO S2017), OIST (Japan), September 2017 (invited).
 18. K. Ogasawara, M. Asai, Mikito Furuichi, D. Nishiura, Effective and fast large scaled Tsunami run-up analysis using explicit ISPH method, V-th International Conference on Particle-based Methods. Fundamentals and Applications (Particle2017), Hannover, Germany, September 2017
 19. M. Asai, I. N. Ain. Multi-scale and -physics tsunami disaster simulation for disaster prevention and mitigation, V-th International Conference on Particle-based M

- ethods. Fundamentals and Applications (Particle 2017), Hannover, Germany, September 2017.
20. D. Tagami. Numerical Analysis of a Generalized Particle-Based Method for Convection-Diffusion Equations and its Application. European Conference on Numerical Mathematics and Advanced Applications (ENUMATH 2017), Voss, Norway, September 2017.
 21. M. Asai. Multi-scale and -physics tsunami disaster simulation for disaster prevention and mitigation, The 2nd International Conference on Computational Engineering and Science for Safety and Environmental Problems (COMPSAFE 2017), China, October 2017 (**Semi-Plenary Lecture**).
 22. N. Mitsume, T. Tomiczek, Y. Imoto, A. S. Donahue, J. J. Westerink, T. Yamada, S. Yoshimura. Numerical analysis of tsunami open flume experiment using parallel solver of 2D-3D coupled wave model. The 2nd International Conference on Computational Engineering and Science for Safety and Environmental Problems (COMPSAFE 2017), China, October 2017.
 23. D. Nishiura, M. Furuichi, H. Sakaguchi, HPC applications of a coupled DEM and SPH simulation for tsunami disaster. The 2nd International Conference on Computational Engineering and Science for Safety and Environmental Problems (COMPSAFE 2017), China, October 2017.
 24. M. Ogino, M. Asai, T. Iwama. A study on parallel fluid-structure interaction simulations using a SPH code and the Adventure through REVOCAP_Coupler. The 2nd International Conference on Computational Engineering and Science for Safety and Environmental Problems (COMPSAFE 2017), China, October 2017.
 25. D. Tagami. Some Remarks on a Time-Explicit Particle Methods for Flow Problems. ANZIAM Conference 2018, Hobart, TAS, Australia, January 2018.
 26. M. Asai. Natural disaster simulation by a multi-physics particle simulation, The 4th International Conference on Computational Design in Engineering (CODE2018), 2018 (**Semi-Plenary Lecture**).
国内会議（一部抜粋）
 27. 西浦泰介. 動的負荷分散手法による SPH と DEM の大規模並列化技術とその適用例. 九州大学情報基盤研究開発センターフォーラム, 2017 年 8 月 (**招待講演**)
 28. 三目直登, Tomiczek Tori, 井元佑介, Westerink Joannes J., 山田知典, 吉村忍. 2D-3D 片方向連成波モデルによる津波再現水槽実験の並列解析. 第 30 回 計算力学講演会, 近畿大学, 2017 年 9 月.
 29. 小笠原圭太, 浅井光揮, 古市幹人, 西浦泰介. 陽的 ISPH 法を用いた大規模津波遡上解析. 第 22 回計算工学講演会, 2017 年 6 月.
 30. 井元佑介, 田上大助. 非圧縮粘性流れ問題に対するある一般化粒子法の数値的収束性. 第 31 回数値流体力学シンポジウム, 京都工芸繊維大学, 2017 年 12 月.
 31. 井元佑介. 粒子法における不等式評価の現状と課題. 数学と現象 in 清里, 明治大学清里セミナーハウス, 2018 年 2 月 (**招待講演**).
- (4) その他（特許，プレス発表，著書等）
特になし