

jh180060-NAH

## 粒子法の基盤理論整備と大規模流体シミュレータへの展開

井元 佑介（京都大学）

SPH 法などの粒子法は、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・収束性のような数値計算手法としての基盤理論の整備が十分でない。本共同研究では、流れ問題に対する粒子法を数値解析学・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流体シミュレータの開発を目的とする。平成 30 年度は、土石流のような高粘性の流れの大規模シミュレーションを行うために、非圧縮性流れ問題に対する陰的粒子法を開発・検証し、大規模流体シミュレータへ追加実装する。さらに、大規模流体シミュレータの GPU 実装を行う。

### 1. 共同研究に関する情報

#### (1) 共同研究を実施した拠点名

名古屋大学

九州大学

#### (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

##### ● 粒子法の基盤理論整備

井元 佑介（京都大学：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の開発と性能評価

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）

荻野 正雄（名古屋大学）

##### ● 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）

大島 聡史（九州大学）

### 2. 研究の目的と意義

**研究の目的：**SPH (Smoothed Particle Hydrodynamics) 法や MPS (Moving Particle Semi-implicit) 法に代表される粒子法は、しばしば格子法と参照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数値計算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。

一方で、誤差評価のような粒子法の数値解析は格子法の数値解析と比較すると十分でなく、精度良いシミュレーションを行うための離散化パラメーターや粒子偏在を回避するための手法の選択を経験則に頼らざるを得なかった。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精度や安定性に関する基盤理論の整備と、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、流れ問題に対する粒子法を数値解析学・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流体シミュレータの開発を目的とする。平成 29 年度は、高精度な津波遡上の大規模シミュレーションを行うために、陽的粒子法を数値解析学の知見を用いて新たに提案し、提案手法を用いた大規模流体シミュレータの開発を行った。さらに、開発した大規模流体シミュレータを津波水槽実験等と比較検証を行うことで、大規模流体シミュレータの妥当性を確認した。

また、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、動的負荷分散手法を用いた大規模並列計算のチューニングと大規模粒子可視化システムの開発を行った。

平成 30 年度は、津波遡上後等に起きうる土石流のような高粘性の流れの大規模シミュレーションを行うために、非圧縮性流れ問題に対する陰的粒子法を開発・検証し、大規模流体シミュレータへ追加実装を行う。特に、陰的粒子法では連立一次方程式を解く必要があるため、連立一次方程式ソルバー等の並列化効率の向上も図る。さらに、次世代の HPC の計算環境に柔軟に対応するために、大規模流体シミュレータおよび可視化システムの GPU 化を図る。

**研究の意義：**東日本大震災や平成 30 年 7 月豪雨といった重大な被害をもたらす災害が近年頻繁に起こっており、災害影響評価や防災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。今後は構造物に対する流体力評価や土石流の発生メカニズムのような、2 次的に発生する災害による影響評価も必要とされているため、それらの現象も扱える流体シミュレータの開発が待たれている。本研究で対象とする土石流の場合、土砂の巻き込みのような、数センチメートル規模で発生する現象を詳細に再現する必要があるため、豊富な計算資源が必要となる。また、不確実な現象であるため、複数のシナリオを解くことが求められることから、CPU スパコンだけでなく、GPU スパコンでも高効率に動作するツールへの発展を図る。土石流を記述する高粘性の流れ問題では、陽的な手法を用いた場合に拡散係数に依存する時間刻みの制約条件が支配的となるため、これまで開発した陽的粒子法では時間増

分を極めて小さな値としなければならず、時間積分として半陰解法あるいは完全陰解法を導入する必要がある。しかし、現状では、陰的な粒子法の大規模での計算事例はほとんどなく、離散化パラメーターの選択方法等は経験則によるものしかないため、大規模計算で安定に精度良く計算できる方法が確立されていない。そこで、我々が行ってきた数値解析学と計算力学の知見を用いた粒子法の検証を陰的な粒子法にも行い、大規模計算にも耐えうる手法を開発する。

以上より、本共同研究の目的が達成されれば、土石流のような複雑な現象を含む大規模流体シミュレーションがヘテロな HPC 環境で実施可能となり、より信頼性の高い災害影響評価への貢献が期待できる。

### 3. 当拠点公募型共同研究として実施した意義

粒子法を用いた流体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、大規模計算を想定した開発と検証が必要である。また、本研究で開発した大規模流体シミュレータ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。平成 30 年度は大規模流体シミュレータと可視化システムの GPU 化に向けて、名古屋大学と九州大学の HPC 分野の共同研究者を追加している。

### 4. 前年度までに得られた研究成果の概要

平成 29 年度は本拠点共同研究課題「粒子法の高精度化と大規模流体シミュレータへの応用」として、以下の 3 項目について共同研究を行った。

I. [数値解析学・計算工学の観点からの検証] 流れ問題に対する陽的粒子法の開発と検証

II. [流体シミュレータの開発・検証] 大規模流体シミュレータへの適用および精度評価

III. [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

I [数値解析学・計算工学の観点から検証] では、これまでに実施してきた粒子法に対する数値解析学の知見を用いて、非圧縮性流れ問題に対する陽的粒子法の開発と収束性の検証を行った。用いた陽的粒子法は、非圧縮 Navier-Stokes 方程式に収束するペナルティ問題を支配方程式とし、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、厳密解との誤差を計算することにより、従来手法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事前誤差評価の十分条件として現れる離散化パラメーター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。

II [流体シミュレータの開発・検証]では、粒子法のための動的領域分割ライブラリである大規模並列流体シミュレータに研究 I で開発された陽的粒子法を追加実装し、並列環境での動作確認を行った。さらに、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、圧力分布を比較することで、大規模流体シミュレータの定量的な妥当性を確認した。また、大規模津波シミュレーションに向けた基礎的な検討として、約 3000 万粒子を用いた高知県の津波遡上解析を行い、提案手法である陽解法と従来の高精度手法（陰解法）を比較して、提案手法は計算効率が格段と上がるだけでなく、陰解法と

同等の精度が得られることを定性的に確認した。

III [流体シミュレータの性能強化] では、大規模並列計算の高速化のために、通信と演算のオーバーラップ計算による並列化性能の改善を行った。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、条件分岐を用いずに粒子の判別が可能になるように改良した。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、従来手法と比較してキャッシュヒット率 (ADB hit) が向上し、計算時間もさらに改善された。また、可視化システムの開発では、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た。

## 5. 今年度の研究成果の詳細

本研究では以下の研究項目を実施した。

A. [数値解析学・計算力学の観点からの検証 II] 流れ問題に対する陰的粒子法の開発と検証

B. [流体シミュレータの開発・検証 II] 陰的粒子法の大規模流体シミュレータへの追加実装および妥当性確認

C. [流体シミュレータの GPU 化] 大規模流体シミュレータおよび可視化システムの GPU 実装

A [数値解析学・計算力学の観点からの検証 II]では、まず古典的な非圧縮流れ問題に対する半陰的な粒子法の ISPH (Incompressible SPH) 法および近年開発された完全陰的な粒子法の ISPH 法に対して、一意可解性および安定性を数学的に示した。一意可解性に

現れる接続性の条件 (図 1) は越塚らが経験的にプログラムで用いていた条件と一致している。また, 安定性の定理において, 半陰的な ISPH 法の場合に粘性係数に反比例する時間刻みの成約が要請されるが, 陰的な ISPH 法には不要となることを示している。この時間刻みの条件は経験的に知られている時間刻みの条件に対応していることから, 本定理によりその条件が具体化された。さらに, 浅井らが開発している安定化 ISPH 法の安定化項が粒子分布の一様性を表すある指標と非圧縮性の誤差を表すエネルギーの最小化問題によって導出することで, 安定化 ISPH 法は非圧縮性と粒子分布の一様性を重み付きで満たすように制約を与えた手法であると解釈できることを示した。

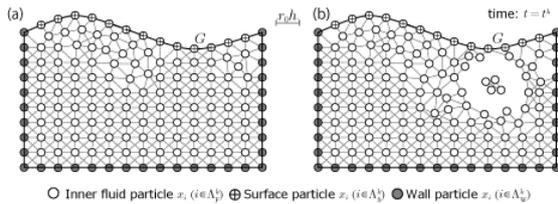


図 1 接続性の条件を満たす粒子分布 (左) と満たさない粒子分布 (右)。

B [流体シミュレータの開発・検証 II]では, Aで安定性を示した陰的な粒子法に自由表面周りの粒子数不足による精度低下を防ぐ Air Ghost Particle (AGP) モデルを追加し, さらに非ニュートン流体にも対応できる陰的スキームを開発し, 検証実験を行った。まず, 静水圧問題において自由表面付近で安定した粒子分布となることを確認した (図 2)。さらに, コイリング現象とよばれる十分に粘性の高い流体を空中から管状に落下させ, 床に接触したときに流体がねじれる現象も数値実験により再現できることを確認した (図 3)。

次に, 昨年度開発した陽的粒子法および今年度開発した陰的粒子法の計算性能を強化するために, 2次元スライスグリッドによる

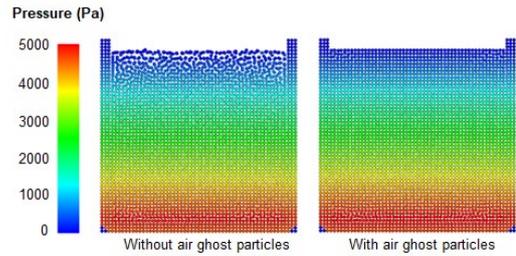


図 2 静水圧の数値実験. 左: AGP モデル無し, 右: AGP モデル有り。



図 3 コイリング現象の数値シミュレーション

分割と動的負荷分散法を基礎技術とし, 津波遡上に併せて解析領域 (壁粒子) を逐次拡張する拡張スライスグリッド法 (Expanding Slice Grid) を開発し, その計算効率の検証を行った。検証問題として, 3次元空間内に水柱と構造物を設置し, 水が 2次元的に非一様に進展する問題を設定した。図 4 は名古屋大学の FX100 の 32 ノード, 256 プロセス並列 4 スレッド並列のハイブリッド並列を用いて 2500 万粒子で計算した計算結果における計算ステップ数と計算時間のグラフである。本計算では水の進展に伴い, 計算に必要な地面や構造物の粒子データのみを用いているため, 相互作用を探索する計算において不要な計算を省くことができる。また, 本検証問題では, 2次元的に水が進展し, その水領域の拡張に応じて計算粒子が増えていくことから, 本来は計算時刻 (計算ステップ) の 2乗のオーダーで計算時間の増大が予想される。しかしながら, 各セルにおいてスライスグリッド法を適用し, 計算時間と通信時間の実時間を均等に作る動的負荷分散を行っている

ため、計算ステップ数と計算時間がほぼ線形な関係になるまで計算効率が改善された。

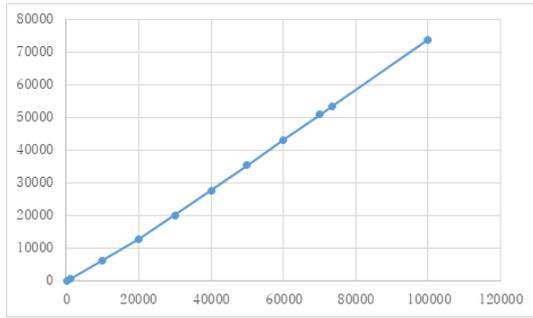


図 4 計算ステップ数と計算時間の関係

さらに、開発手法の適用範囲を拡張するために、漂流物や構造物との流体構造連成解析を目的としたポリゴン壁モデルの追加実装および検証を行った。本共同研究では、将来的に高精度な構造解析を実施するために、流体解析を粒子法、構造解析を有限要素法で行う流体構造連成解析手法の開発することを想定している。この流体構造連成解析ではメッシュベースの境界面（多角形領域）を考慮する必要があるため、陽的粒子法の壁面モデルに三目らが開発したポリゴン壁境界モデルの実装を行い、さらにポリゴンモデルを考慮した動的負荷分散アルゴリズムを追加実装した。図 5 は、開発したハイブリッド並列コードによる 27,648,00 粒子と 32 領域を使用したダムブレイク問題の解析（32 ノード、1,028 コア、名大 FX100 を使用）における圧力分布および動的な領域分割の様子を示している。この解析では、水槽の左側壁面における圧力に関して実験値との比較を行い、数値解析の結果が実験値と良い一致を示すことを確認し、開発コードの妥当性を定量的に示した。また、1 ノード（32 コア）から 64 ノード（2,048 コア）までのスピードアップを測定し、開発コードが良好な並列性能を有していることを確認した。

また、斜面や曲面を含むような複雑形状の領域を有する問題への拡張を目的として、重心ボロノイ分割 (CVT) に基づく粒子配置手

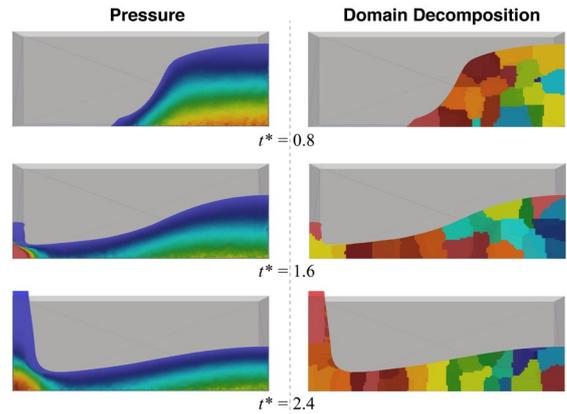


図 5 ダムブレイク問題におけるポリゴン壁境界モデル導入時の圧力分布および領域分割

法を開発し、検証実験を行った。図 6 は 2 次元円領域に対する重心ボロノイ分割の結果である。開発手法ではこのボロノイセルにおける母点を粒子位置として用いる。正方格子状配置に比べて曲線を滑らかに表現することに成功した。この粒子配置を用いた流体計算を進めている。

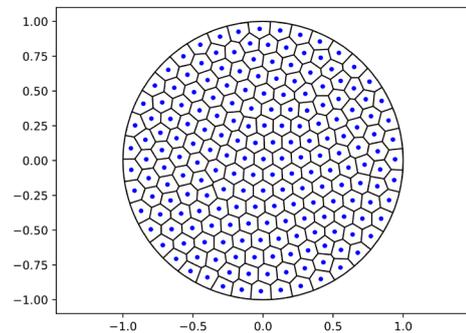


図 6 重心ボロノイ分割による粒子初期配置

C [流体シミュレータの GPU 化] では開発した流体シミュレータの単一 PC での GPU 実装を行い、300 万粒子を用いてコイリング現象のシミュレーション(図 3)を実施し、GPU 環境での開発手法の動作確認を行った。また、本研究で利用しているマルチプラットフォームの HIVE 可視化アプリケーションでは GPU 機能が利用できるように GLSL コンパイラの中間言語 (Intermediate Representation) 出力機能に加え、独自に開発した code-to-code 変換モジュール (IR 言語か

ら C 言語への変換) が実装されている。この機能を用いて図 7 に示される等高線 (コンターライン) を表現できる効果的な可視化・解析向けシェーダの研究開発を行った。また、広く普及している OpenGL グラフィックスライブラリを用いたレンダリングエンジンも利用可能にするための機能拡張も行った。

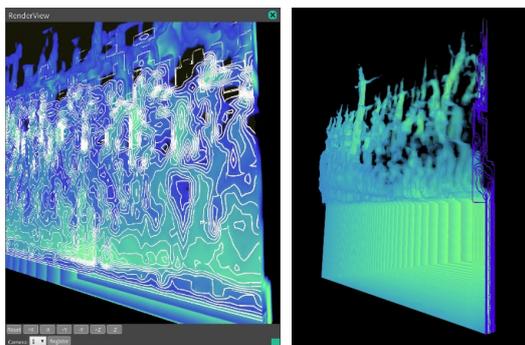


図 7 等高線 (コンターライン) を表現するシェーダの例

## 6. 今年度の進捗状況と今後の展望

研究 A では数学的安定性や安定化項の理論的導出を行うことで高粘性流体の解析を可能にする陰的粒子法の開発を行った。研究 B では静水圧問題やダムブレイク問題のようなベンチマーク問題で検証を行い、コイリング現象のような現実的な問題設定で開発手法の妥当性を確認した。さらに、開発手法の性能の強化および適用範囲の拡張を目的として、拡張スライスグリッド法、ポリゴン壁モデル、重心ボロノイ分割を用いたような粒子分布の生成手法の追加実装を行い、計算効率や精度の向上などを確認した。研究 C では開発手法の GPU 化を行い、さらに可視化システムにも GPU コンピューティングが活用できる機能の追加実装を行った。平成 29 年度および平成 30 年度における本研究成果の概略図を図 8 に示す。

以上より、全ての研究項目で十分な成果が得られ、本共同研究の目標とした土石流のような高粘性流れの大規模シミュレーションを行うための非圧縮性流れ問題に対する陰

的粒子法の開発・検証、大規模流体シミュレータおよび可視化システムの GPU 機能の実装を達成できた。

今後は、津波の地下流や構造物への影響評価を行うために、浸透流解析や流体構造連成解析に開発手法を拡張し、同時にその基盤理論を確立する。さらに、今年度実装した GPU 環境をマルチ GPU 環境に実装することで計算環境の充実も図る。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。

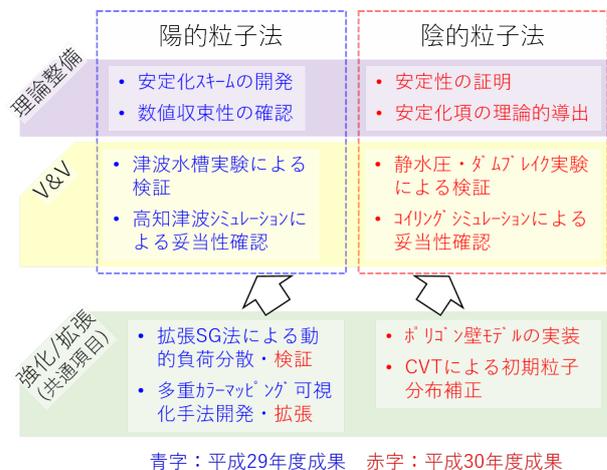


図 8 平成 29 年度・平成 30 年度の研究成果の概略図

## 7. 研究成果リスト

### (1) 学術論文

1. D. Nishiura, H. Sakai, A. Aikawa, S. Tsuzuki, H. Sakaguchi. Novel discrete element modeling coupled with finite element method for investigating ballasted railway track dynamics. COMPUTERS AND GEOTECHNICS, 96, pp. 40–54, April 2018.
2. M. Ogino, T. Iwama, M. Asai, Development of a Partitioned Coupling Analysis System for Fluid-Structure Interactions Using an In-House ISPH Code and the Adventure System, Int. J. Comput. Mech., Vol. 15, No. 1, 1843009 (13 pages), April 2018.
3. M. Furuichi, D. Nishiura, O. Kuwano, A. Bauville, T. Hori, H. Sakaguchi. Arcuat

- e stress state in accretionary prisms from real-scale numerical sandbox experiments. *Scientific reports* 8.1 (2018): 8685, June 2018.
4. M. Ogino, T. Iwama, M. Asai, Development of an ISPH-FEM Weak Coupling Analysis System for 3-Dimensional Fluid-Structure Interaction Problems, *Theor. Appl. Mech. Japan*, No. 64, pp. 143–153, August 2018.
  5. Y. Mizuno, N. Mitsume, T. Yamada, S. Yoshimura. Fluid-Rigid Body Interaction Analysis for Mesh-Free Particle Method with Polygon Boundary Representation. *Theoretical and Applied Mechanics Japan*, Col. 64, pp. 133–142, January 2019.
  6. 井元佑介, 浅井光輝. 安定化 ISPH 法の理論的解釈 - エネルギー最小化問題からの安定化項の導出 -. *土木学会論文集 A2(応用力学)*, 74 巻 2 号, pp. 159-166, 2019 年 1 月.
  7. Y. Imoto. Unique solvability and stability of a generalized particle method for a Poisson equation in discrete Sobolev norms. *Applications of Mathematics*, Vol. 64 (1), pp. 33–43, February 2019.
  8. D. Morikawa, M. Asai, N. Idris, Y. Imoto, M. Isshiki. Improvements in highly viscous fluid simulation using a fully implicit SPH method. *Computational Particle Mechanics*, 16 pages, March 2019.
  9. Y. Imoto. Unique solvability and stability analysis for incompressible smoothed particle hydrodynamics method. *Computational Particle Mechanics*, Vol. 6 (2), pp. 297–309, March 2019.
  10. 荻野正雄, 長谷川颯, 重心ボロノイ分割に基づく粒子法向け粒子初期配置, *日本計算工学会論文集*, 2019 巻 p. 20190002 (8 pages), 2019 年 3 月.
  11. Y. Imoto, S. Tsuzuki, D. Nishiura. Convergence study and optimal weight functions of an explicit particle method for the incompressible Navier–Stokes equations, 27 pages, *submitted*.
  12. N. Mitsume, T. Yamada, S. Yoshimura. Parallel Analysis System for Free-Surface Flow Using MPS Method with Explicitly Represented Polygon Wall Boundary Model, 10 pages, *submitted*.
  13. Y. Mizuno, N. Mitsume, T. Yamada, S. Yoshimura. Time-based dynamic load balancing algorithm for domain decomposition with particle method adopting three-dimensional polygon-wall boundary model, 16 pages, *submitted*.
- (2) 国際会議プロシーディングス
14. D. Nishiura, H. Sakaguchi, S. Yamamoto. Multibillion particle DEM to simulate centrifuge model tests of geomaterials. *Proceedings of the 9th International Conference on Physical Modelling in Geotechnics 2018*, 2018 Vol. 1, pp. 227–232
- (3) 国際会議発表
15. M. Asai. Natural disaster simulation by a multi-physics particle simulation, *COD E2018*, April 2018, Changwon, Korea. (**P lenary 講演**)
  16. D. Nishiura. Application of a particle simulation for engineering problems. *8th Japan-Korea Workshop on Computational Mechanics*, Nagoya, June 2018.
  17. M. Asai, N. Nakaya, R. Agata, T. Hori, T. Baba, A physical simulation based earthquake scenario and a multi-scale tsunami simulation, *WCCM2018*, New York, July, 2018.
  18. D. Morikawa, M. Asai, Improvements on Highly Viscous Fluid Simulation using a Particle Method and its Application to Landslide Problems, *WCCM2018*, New Y

ork, July, 2018.

19. K. Ono, J. Nonaka, Y. Morie, T. Nanri, T. Kawanabe. Design of an In Transit Framework with Staging Buffer for Flexible Data Processing and Visualization of Time-Varying Data, ISC Workshop on In Situ Visualization 2018 (WOIV 2018).
20. J. Nonaka, K. Ono, N. Sakamoto, Kengo Hayashi, Tomohiro Kawanabe, Fumiyoshi Shoji, Masahiro Fujita, K. Oku, K. Hatta. HIVE: A Cross-Platform, Modular Visualization Ecosystem for Heterogeneous Computational Environments. The International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage, and Analysis (SC18) Poster.
21. J. Nonaka, K. Ono, N. Sakamoto, K. Hayashi, M. Matsuda, F. Shoji, K. Oku, M. Fujita, K. Hatta. A Large Data Visualization Framework for SPARC64 fx HPC Systems - Case Study: K Computer Operational Environment -. IEEE Large Data Analysis and Visualization (LDAV 2018) Poster.

他 2 件

(4) 国内会議発表

(一部抜粋)

22. 西浦泰介, 古市幹人. High performance computing of particle simulation method and its application for geophysical problems. 地球惑星物理学セミナー, 名古屋大学, 2018 年 7 月 10 日 (招待講演)
23. 西浦泰介. 粒子系シミュレーションの高速化と地盤力学問題への応用, KOBE HPC サマースクール, 神戸大学, 2018 年 8 月 6 日 (招待講演)

(5) その他 (特許, プレス発表, 著書等)

特に無し