

jh190011-NAJ

## 粒子法の基盤理論整備とマルチフィジックスシミュレータへの展開

荻野 正雄 (大同大学)

**概要** 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。2019 年度は、解析範囲を拡張するために浸透流問題に対する粒子法の開発・検証および大規模流体シミュレータへの実装、流体構造連成問題に対する粒子法-ポリゴン壁境界モデル-有限要素法の開発および大規模流体構造連成シミュレータへの実装、マルチ GPU 対応による高性能化などを旨とする。

### 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

- ・ 大規模流体構造連成シミュレータの開発
  - 荻野正雄 (大同大学, 代表), 三目直登 (筑波大学)
- ・ 大規模流体シミュレータの開発
  - 浅井光輝 (九州大学, 副代表), 西浦泰介 (海洋研究開発機構)
- ・ 粒子法の高精度化
  - 井元佑介 (京都大学, 副代表), 田上大助 (九州大学), 渡部善隆 (九州大学)
- ・ 可視化システムの開発
  - 小野謙二 (九州大学), 野中丈士 (理化学研究所), 大島聡史 (名古屋大学)

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。特に 2019 年度は、解析範囲を拡張するために浸透流問題に対する粒子法の開発・検証および大規模流体シミュレータへの実装、流体構造連成問題に対する粒子法-ポリゴン壁境界モデル-有限要素法の開発および大規模流体構造連成シ

### 2. 研究の目的と意義

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

ミュレータへの実装，マルチ GPU 対応による高性能化などを旨す。

次に研究の意義について述べる。東日本大震災や 2018 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ない。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。大規模マルチフィジックスシミュレーション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，離散要素法や有限要素法などと組み合わせた場合の効率的な数値計算に関する基盤技術の整備，さらに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マルチフィジックスシミュレータの開発を目的とする。

### 3. 当拠点公募型研究として実施した意義

津波遡上・砕波や瓦礫・構造物の流出の評価など，粒子法を用いた数値シミュレーションによる災害影響評価はその重要性を増している。しかし，粒子法は数値計算の基盤理論整備が不十分，大規模計算においても安定で精度良く計算できる方法が未確立，など様々な課題がある。本共同研究は，数値解析学・計算力学・計算機科学の知見を用いて，高品質かつ高性能な粒子法による大規模流体シミュレーションを可能にするものであり，計算科学・計算機科学の両方において意義のある研究である。

### 4. 前年度までに得られた研究成果の概要

本共同研究は継続課題である。2017 年度は，数値解析学の知見を用いた陽的粒子法の提案，津波水槽実験等との比較検証による妥当性確認，Expanding Slice Grid 法による並列効率改善，大規模可視化向け粒子データ管理ライブラリ開発などの成果が得られた。

2018 年度は，陰的スキームの SPH 法について一意可解性及び安定性を示し，また AGP モデルによる自由表面周りの精度改善や非ニュートン流体への対応など，流体シミュレータとしての機能強化に多くの成果が得られた。さらに，マルチフィジックスシミュレ

ータとしての展開を想定し、有限要素法と粒子法の連成計算技術の開発を進めた。

### 5. 今年度の研究成果の詳細

2019 年度は 3 つのテーマを実施した。テーマごとに研究成果の詳細を示す。

#### A. [数値解析学・計算力学の観点からの検証 III] 浸透流に対する粒子法および流体構造連成手法の開発と検証

非圧縮性流れ問題に対する粒子法の一つである安定化 ISPH 法において、非圧縮性条件と粒子密度一定の条件に関する誤差を数学的に評価し、その評価を最適化（誤差の上限を最小化）する意味で最適な安定化パラメータを推定した。推定した安定化パラメータは 1 より十分小さな正の値で、時間刻みに対して正の相関を持ち、それらの性質は経験則とよく一致している。さらに、急激な速度変化を含む鉛直噴流の問題（図 1）で数値実験

を行い、推定した安定化パラメータ付近で十分安定な数値計算結果が得られることを示した（図 2）。

安定化 ISPH 法で固液混相流解析などの密度差を含む流体解析において上記手法を適用した場合、固体表面付近での流体粒子密度誤差が大きくなり、計算が不安定化する問題が残されていた。そこで、非圧縮性流体の支配方程式から直接導出される物理速度と、安定化項を付加することで算出される輸送速度の 2 つの流速を定義し、導かれる 2 つの圧力ポアソン方程式を 2 回解く選択型デュアル流速 ISPH 法を開発した。物理速度はあくまでも支配方程式から直接算出される物理的に正しい流速であり、一方で輸送速度とは粒子法の精度を担保するために重要となる粒子分布を平滑化するための輸送速度である。つまり、速度の更新には物理速度を用い、位置の更新には物理速度ではなく輸送速度を使う選択型の定式化である。これにより、図 3 に示す混相

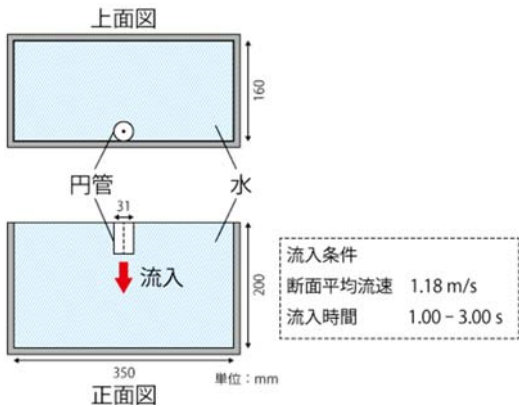


図 1 鉛直噴流の問題設定

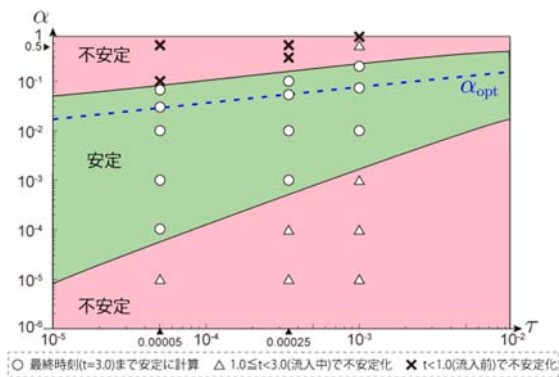


図 2 安定化パラメータと時間刻みに関する状態図

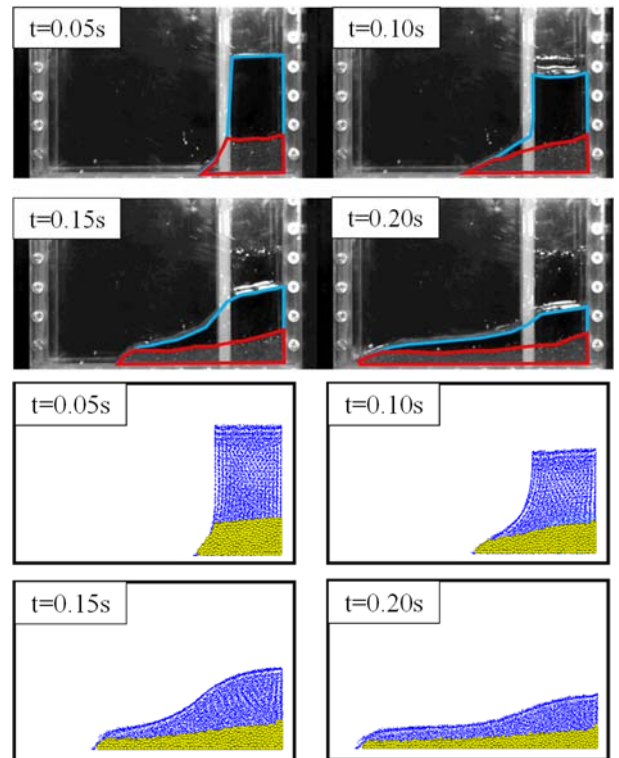
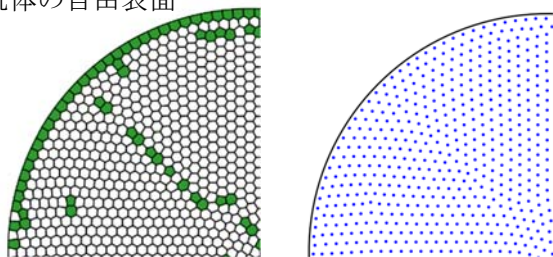


図 3 ビーズと水の混相流問題の DEM-SPH 連成解析と実験との比較

流問題における水粒子の密度誤差が従来法では 50%程度まで増大していたが、本手法では 5%程度以下に抑えられた。また圧力ポアソン方程式を 2 回解くことによる計算コストの増加がデメリットになり得るが、SIMD を有効活用することで従来法とは同程度の計算時間で処理した。

また、任意の境界形状に対する粒子初期配置方法として重心ボロノイ分割(CVT)に基づく粒子配置(図 4)を提案した。2次元領域では CVT によってボロノイセル形状が正六角形に漸近するため、曲線に沿った等間隔な粒子分布が期待できる手法である。図 4 左で白色のボロノイセルは六角形のものであり、図 4 右はボロノイセル母点を粒子の中心位置とした粒子分布である。さらに、CVT 探索問題のソルバとして k-means 法に基づく Lloyd 法、並びに、エネルギー最小化問題として定式化した上での準 Newton 法の 2 種類を実装し、境界を区分線形近似した凸領域または非凸領域に対する CVT 粒子分布を行うシステムとして整備した。

流体の自由表面



ボロノイセル

粒子分布

図 4 CVT による閉曲線内への粒子充填

B. [流体構造連成シミュレータへの展開]  
大規模流体シミュレータへの追加実装および可視化システムの拡張

粒子法と有限要素法との連成解析に先立って、Explicit MPS 法にポリゴン壁境界モデルを導入した並列コードに対し、動的負荷分散アルゴリズムの高度化を行なった。従来のコードでは領域分割における各領域の計算負荷を領域内総粒子数に基づいて評価していたが、改良手法では各粒子に対して実測

した計算時間の和で評価を行っている。図 5 は公開されている Stanford Bunny のポリゴンデータ (69,451 ポリゴン) を用いた 100 万粒子・8 領域 (名大 FX100, 8 ノード使用) の解析であるが、境界形状が複雑でポリゴン数が多い場合でも、並列解析が行えることを示した。

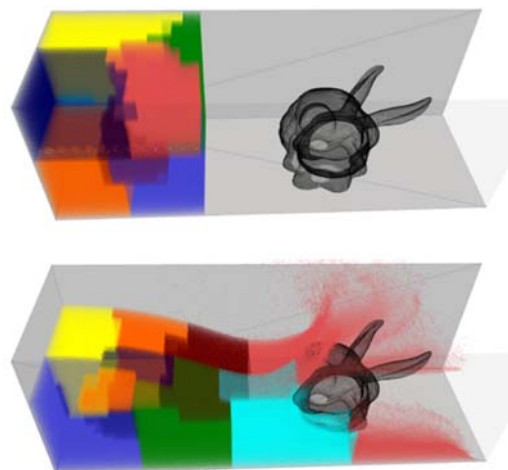


図 5 Stanford Bunny 解析における動的領域分割

可視化システムの開発ではレイトレーシング手法を用いた SURFACE ライブラリを主に利用してきたが、可視化機能を柔軟に拡張可能にする目的で従来のラスタライジング手法を用いた可視化ライブラリも動的に利用できるようなプラグイン機能を開発した。レンダリング機能拡張向けに京都大学・神戸大学で開発されている KVS (Kyoto Visualization System) ライブラリの CPU/GPU レンダリング機能の一部を RenderPluginKVS モジュールとして利用可能にした。また、GPU レンダリング処理を容易にする目的で粒子データのボクセルデータ化機能の開発を行った。図 6 は粒子データからサンプリングして得られたボクセルデータ (流速ベクトル) と建物の粒子データをオーバーレイした可視化結果である。

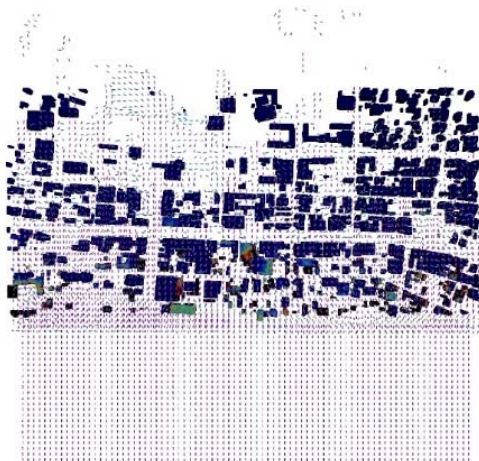


図6 ボクセルと粒子データの  
オーバーレイ表示

C. [流体シミュレータの高性能化] 大規模  
流体シミュレータのマルチ GPU 実装

GPU で粒子法を実装する際、限られたデバイスメモリ内で計算すべてを実行できるように省メモリ化を図ることが高速化実現のために必要である。昨年度までは、特に高粘性流体を扱うことに主眼をあてていたことから、圧力のみならず速度までを陰的に解く完全陰解法を GPU に実装した。しかしながら、メモリ制約上 1GPU100 万粒子程度しか解析できず、GPU の持つパフォーマンスを十分に活かすことはできていなかった。そこで ISPH 法（圧力のみを陰的に解く半陰解法版 SPH 法）を改良した陽的 ISPH 法（以降 EISPH と略）に変更することで、ノード内のマルチ GPU であれば、P2P 通信により高速かつ大規模な粒子法解析を実現した。具体的には 1GPU (V100, デバイスメモリ 8GB 使用) あたり 2000 万粒子から 3000 万粒子程度までは計算できる。例えば、初期粒子数は約 800 万粒子程度を使い、福島原発周辺の津波遡上解析を 4GPU の計算機にて解析した (図 7 参照)。なお、流入後の最終的な粒子数は 1 億 5000 万粒子まで増大している。現在では 4GPU 程度までの領域に分割することまでしかサポートしていないため、領域分割は 1 方向分割のみを実施して

いる。今後 MPI 通信も使いマルチノード GPU 計算を実現する際には、サブ課題 B で実施している領域分割等の導入などの改良が必要となる。

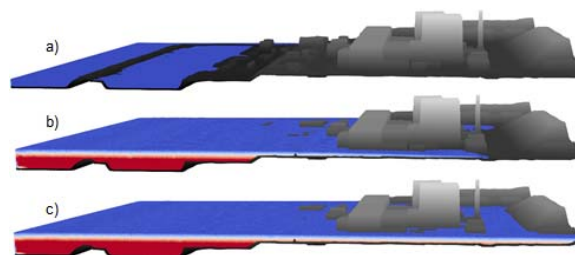


図7 1.5 億粒子モデルによる津波遡上解析

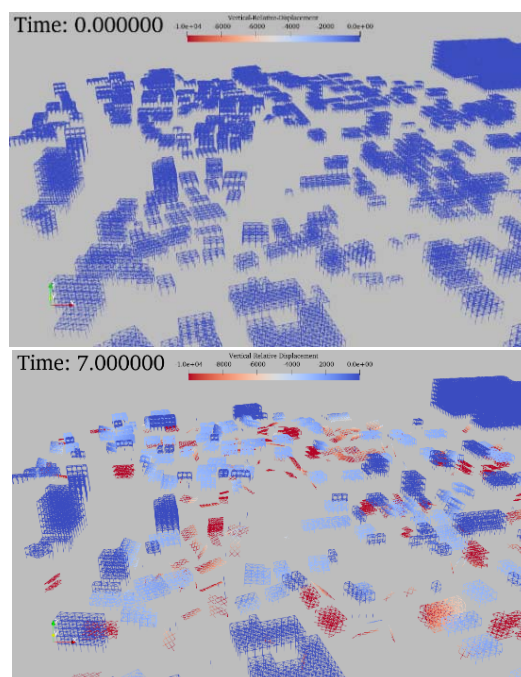


図8 ASI-Gauss 法による地震時の  
木造家屋倒壊解析 (0 秒, 7 秒)

また津波時の木造家屋崩壊の解析に向けて、崩壊解析に実績のある ASI-Gauss 法のスレッド並列化+領域分割を実施することで、街区全体の木造家屋崩壊解析を可能とした (図 8 参照)。現時点では、地震動による家屋崩壊解析を実施したが、今後 SPH 粒子法との連成を図り、津波時に瓦礫化する木造家屋の再現を実施する計画である。今年度は、その準備が整った。

## 6. 今年度の進捗状況と今後の展望

研究計画 A では、高精度・高安定な浸透流に対する粒子法の開発、浸透流問題における理論解や水槽実験結果との比較、などを実施することにより本手法の検証、高精度・高安定な流体構造連成手法を開発、SPHERIC ベンチマーク問題を使用した実験結果との比較、を目指した。実験結果と比較しながらの粒子法による数値シミュレーションに関する理論的検討は順調に進捗し、論文発表の業績も得られており、継続して進めていく予定である。また、粒子法の高精度化に向けて CVT に基づく粒子初期分布を提案し、国際会議発表 2 件などの業績が得られている。今後は、CVT 探索問題向け効率的ソルバの検討、Cython モジュールを用いた C 言語化による高性能化や OpenMP 並列化、3 次元化の検討を進めていく。

研究計画 B では、研究計画 A の開発手法を大規模流体シミュレータへ追加実装、流体構造間物理量受け渡しの並列化、移動壁に対応したポリゴン壁境界モデルの動的負荷分散、連成界面での通信・計算コストを考慮した Expanding Slice Grid 法の検討、粒子可視化システムの粒子データ・有限要素法データ混在への対応、を目指した。特に、構造物の崩壊を考慮すること、また粒子法との相性から、崩壊解析に実績のある骨組み有限要素法である ASI-Gauss 法を選択し、この大規模化を図った。また、粒子法ポリゴン壁境界モデルの動的負荷分散により、並列環境下において、有限要素の表面を粒子法流れ解析の壁境界として直接的に扱うことができる理論的基盤ができあがったため、今後はこれを拡張し、並列流体構造連成解析システムの構築を目指す。

研究計画 C では、マルチ GPU への実装、浸透流問題の大規模流体シミュレーションを目指した。現時点では、MPI 通信はせずに、4 枚の GPU までに限定し、その性能向上に努めた。今後は、MPI 化によりさらなる大規模

化を検討していく。

## 7. 研究業績一覧（発表予定も含む）

### (1) 学術論文（査読あり）

- [1] 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, Journal of Advanced Simulation in Science and Engineering, Vol. 6, No. 2, pp. 282-297, 2019.
- [2] N. Mitsume, T. Yamada, S. Yoshimura, Parallel Analysis System for Free-Surface Flow Using MPS with Explicitly Represented Polygon Wall Boundary Model, Computational Particle Mechanics, Vol. 7, No. 2, pp. 279-290, 2020.
- [3] D.S. Morikawa, M. Asai, N. Idris, Y. Imoto, M. Isshiki. Improvements in highly viscous fluid simulation using a fully implicit SPH method. Computational Particle Mechanics, Vol. 6 (4), pp. 529-544, September 18, 2019.
- [4] Y. Imoto, S. Tsuzuki, D. Nishiura. Convergence study and optimal weight functions of an explicit particle method for the incompressible Navier-Stokes equations, Computational Particle Mechanics, Vol. 6 (4), pp. 671-694, September 18, 2019.
- [5] 井元佑介, 浅井光輝, 藤井孟大安定化 ISPH 法の理論的解釈 II -誤差評価に基づく安定化係数の最適化-, 土木学会論文集 A2(応用力学), 75 巻 2 号, pp. 187-194, 2020 年 2 月 6 日.
- [6] Y. Imoto, Truncation error estimates of approximate operators in a gener

alized particle method, Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics, Vol. 37, pp. 565-598, February 3, 2020.

(2) 国際会議プロシーディングス (査読あり)

- [1] D.S. Morikawa, M. Asai, Y. Imoto, M. Isshiki, Bingham flow model by fully implicit SPH and its application to reinforce underground caves, Proceedings of the 2019 Rock Dynamics Summit (RDS 2019), 299-304, May, 2019.

(3) 国際会議発表 (査読なし)

- [1] D.S. Morikawa, M. Asai, Y. Imoto, M. Isshiki, Bingham flow model by fully implicit SPH and its application to reinforce underground caves. 2019 Rock Dynamics Summit, Okinawa, Japan, May 2019.
- [2] N. Mitsume, T. Yamada, S. Yoshimura, Parallel tsunami analysis based on MPS method with ERP wall boundary model, COMPDYN2019, Crete Island, Greece, June 2019. (Keynote lecture)
- [3] M. Ogino, H. Hasegawa, Y. Imoto, Initial Particle Placement Based on the Centroidal Voronoi Tessellation for Two-dimensional Flow Simulation by the Particle Method, ICCM2019, Singapore, July 2019.
- [4] M. Asai, M. Furuichi, D. Nishiura, Dynamic Load Balanced Expanding Slice Grid Method for Large-scaled High Fidelity Tsunami Run-up Simulation using an Explicit SPH, 6<sup>th</sup> International Conference on Particle-based Method - Fundamentals and Applications PARTICLES 2019

- [5] L. Yi, M. Asai, B. Chandra, Simulation of Free-surface Flow Interacting with Multiple Rigid Bodies using Coupled ISPH-DEM incorporated with Energy Tracking Impulse Contact, 6<sup>th</sup> International Conference on Particle-based Method - Fundamentals and Applications PARTICLES 2019

- [6] D. Morikawa, M. Asai, M. Isshiki, Verification and Validation in Highly Viscous Fluid Simulation using a Fully Implicit SPH Method, 6th International Conference on Particle-based Method - Fundamentals and Applications PARTICLES 2019

- [7] H. Hasegawa, M. Ogino, T. Katagiri, Initial particle distribution based on the centroidal Voronoi tessellation for two-dimensional particle method, APCOM2019, Taipei, December 2019.

- [8] N. Mitsume, T. Yamada, S. Yoshimura, Validation of parallel fluid-structure interaction analysis system with consistent-interface model, APCOM2019, Taipei, December 2019. (Keynote lecture)

(4) 国内会議発表 (査読なし)

- [1] 長谷川颯, 荻野正雄, 重心ボロノイ分割初期位置を利用した粒子法による流体解析, 第24回計算工学講演会, 大宮ソニックシティ, 2019年5月30日.
- [2] 槇野泰河, 浅井光輝, 大規模津波遡上解析の効率化に向けた楕円粒子法の開発と堤防越流問題での有効性検証, 第24回計算工学講演会, 大宮ソニックシティ, 2019年5月30日.
- [3] 井元佑介, 浅井光輝, 安定化 ISPH 法の理論的解釈 II - 誤差評価に基づく安定化

係数の最適化-, 第 65 回理論応用力学講演会・第 22 回土木学会応用力学シンポジウム, 北海道大学, 2019 年 6 月 28 日.

- [4] 井元佑介, 浅井光輝, 非圧縮性 Navier-Stokes 方程式に対する粒子法における安定化項の考察, 日本応用数理学会 2019 年度年会, 東京大学 駒場キャンパス I, 2019 年 9 月 5 日.
- [5] 荻野正雄, 長谷川颯, 大島伊織, 粒子初期配置のための重心ボロノイ分割の効率化, 第 32 回計算力学講演会, 東洋大学, 2019 年 9 月 16 日.
- [6] 榎野泰河, 浅井光輝, 古市幹人, 西浦泰介, 粒子法による津波発生から陸地への遡上までのマルチスケール津波解析, 第 32 回計算力学講演会, 東洋大学, 2019 年 9 月 16 日.

- (5) その他(特許, プレスリリース, 著書等)  
該当なし