

jh200034-NAH

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。2020 年度は、非圧縮性 Navier-Stokes 方程式と Darcy 則の統一方程式に対する安定化 ISPH 法の開発・検証、重心ボロノイ分割探索における最適化問題の効率的数値解法の開発、連成界面の物理量補間計算・通信コストを考慮した動的負荷分散アルゴリズムの開発、大規模粒子データの並列圧縮に関する検討、陽的 ISPH 法コードのマルチ GPU における効率化、などを目的とした。

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

(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), 大島聡史 (名古屋大学)
- ・ 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)
- ・ 可視化用粒子データ圧縮技術開発
小野謙二 (九州大学)

2. 研究の目的と意義

SPH 法・MPS 法などの粒子法は、差分法や有限要素法などの格子法と比べて、領域の変形・分裂・結合を伴う問題を効率よく計算で

きる特徴を持つ。これにより、例えば防災・災害対策分野では津波遡上域や到達時間の高精度予測に役立てられており、今後は防波堤・防潮堤に対する浸透流の影響や高規格道路・高層建造物に対する津波荷重の影響など、より実現象に近いマルチフィジックス現象への展開が期待されている。しかし、密集市街地を高解像度に表現する場合など、その計算モデルが大規模になりやすいことから、計算科学・計算機科学連携とスパコン活用による高性能アプリケーション開発が必要不可欠である。また一方、誤差評価のような粒子法の数値解析は格子法と比べて十分でなく、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選択などを経験則に頼ることが多いことから、数値解析学との連携も非常に重要である。

このような現状から、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。

特に継続課題 4 年目となる 2020 年度は、非圧縮性 Navier-Stokes 方程式と Darcy 則の統一方程式に対する安定化 ISPH 法の開発・検証、重心ボロノイ分割探索における最適化問題の効率的数値解法の開発、連成界面の物理量補間計算・通信コストを考慮した動的負荷分散アルゴリズムの開発、大規模粒子データの並列圧縮に関する検討、陽的 ISPH 法コードのマルチ GPU における効率化、などを目的とする。

次に本研究の意義について述べる。2011 年の東日本大震災以降、数値シミュレーションによる高精度な災害影響評価はその重要性を増している。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、津波浸水域や到達時間の予測に加え、砕波や瓦礫・構造物の流出をより詳細に再現でき、多方面から注目を集めている。しかし、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、効率的な大規模計算や並列計算には高い技術が必要、など様々な課題がある。これに対し本研究では、応募者ら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様々な流体問題や流体構造連成問題にも行い、大規模計算にも耐えうる手法を開発し、高性能計算の知見を用いた効率化まで実施する。これにより、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が可能となり、計算科学・計算機科学の両方において意義のある研究となる。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。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となる。

3. 当拠点公募型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を実用化するためには、工学分野などの具体的な問題に対し、数値解析学による理論基盤を整備しながら、数値計算技術の高度化を行っていく必要がある。また、粒子法はいわゆる格子法と比べて空間解像度に粗密をつけづらいためなどから計算モデルが大規模になりやすく、大規模計算を想定した開発と検証が必要である。さらに、業界標準と言える粒子生成・可視化ツールはなく、大規模粒子データに対応し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、本研究の目的を達成するために、JHPCN の研究者並びに研究環境と連携し、数学(数値解析など)、土木工学(応用力学など)、計算基盤(並列処理・可視化・高性能アプリケーションなど)の研究者が共同で実施した。

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。2019 年度は、ISPH 法における安定化パラメータの最適値推定、固液混相流解析向け選択型デュアル流速 ISPH 法の開発、など流体シミュレータの数値解析学・計算力学的観点から大きな進展が得られた。また、ポリゴン壁境界モデルを含む陽的 MPS 法の動的負荷分散アルゴリズム開発、ノード内マルチ GPU による陽的 ISPH 法の高性能化、など計算科学に関する成果も得られた。

5. 今年度の研究成果の詳細

2020 年度は 3 つのテーマを実施している。テーマごとに進捗状況を示す。

A. [数値解析学・計算力学の観点からの検証 IV] 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

本研究で開発した選択型デュアル流速 ISPH 法について、昨年度までは定性的な評価にとどまっていたため、今年度は従来手法と比較することにより、定量的な評価を行った。本手法は非圧縮性 Navier-Stokes 方程式と Darcy 則の統一方程式を支配方程式とし、物理速度（流速）と位置更新のための輸送速度を区別し、それらに作用する安定化項の安定化パラメータを選択的に設定する手法である。その安定化パラメータは、固液混相流解析における界面付近の粒子密度誤差による精度低下を防ぐために、輸送速度に関しては高い値を設定し、物理速度に関しては非物理的な安定化作用を極力減らすために低い値（あるいは 0）を設定する。昨年度は定性的な検証として、ガラスビーズを用いた浸透流実験の再現解析を行い、概形および先端位置が実験と一致することを示していた。本年度は、同再現解析において従来の安定化 ISPH 法と提案手法の密度誤差の比較を行い、特に固体と液体が混ざり合う領域において提案手法の密度誤差が大幅に改善されることを

示した[4]。また、SIMD 機能を用いた提案手法の高効率化についても検討したが、本成果はテーマ B で述べる。さらに、この浸透流に伴う、地盤崩壊解析の妥当性確認を行うため、図 1 に示すケーソン式防波堤の計算を行った。これは堤防前後の水位差により図 2 に示すような浸透流により、堤防背面の地盤が崩壊するパイピング破壊現象である。これを同図に示すように定性的に実験を再現した。またこの剛体解析機能の問題点であった複数剛体の安定した接触解析手法を新たに提案し、複数の国際誌[5][6]（1 つは計算力学分野のトップジャーナル）に掲載されるなど、成果が着実にあがっている。

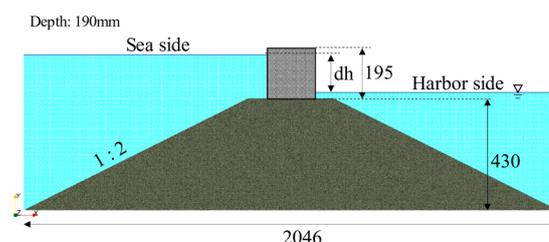


図 1 間隙率に対する平均密度誤差

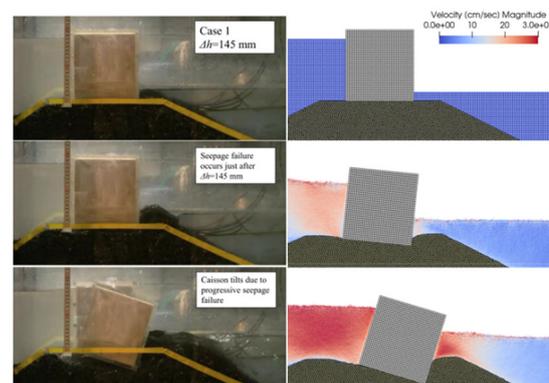


図 2 間隙率に対する平均密度誤差

また、粒子初期分布のための重心ボロノイ分割探索における最適化問題の効率的数値解法の開発を行った。特に、粒子中心位置とボロノイセル重心の距離を目的関数として最適化問題を設定し、その解法として準 Newton 法、非線形共役勾配法、最急降下法、さらには Momentum 法や Adam など機械学習

分野で Optimizer として開発が進む数値解法の適用と性能評価を行った(図 3). 特に, ボロノイセルの面積をステップサイズとして用いる Momentum+法を提案[2]した. 提案手法を用いることで, 固定のステップサイズを用いる場合に比べて頑強であり, かつ, 直線探索を行う場合に比べて高速な必要に重心ボロノイ分割探索を行うことが可能になった. ここで, 提案アルゴリズムは Cython で実装し, 名古屋大学「不老」Type I での実行を検討したが, クロスコンパイラ環境における Cython プログラムのビルドと実行に失敗し, 同環境での数値実験は今後の課題となった.

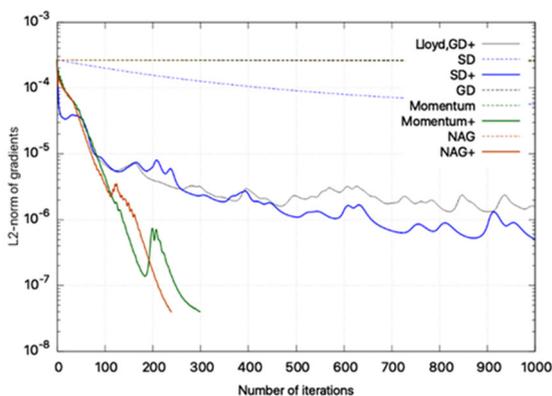


図 3 重心ボロノイ分割探索の最適化問題に対する各数値解法の収束履歴

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用データ圧縮技術開発

テーマ A で開発した選択型デュアル流速 ISPH 法において, 物理速度と輸送速度を求めするための圧力ポアソン方程式の係数行列は同一となるため, SIMD (single instruction, multiple data) 機能を活用した実装法を提案した. SIMD 機能を活用することで計算時間の増加を抑制し, 従来の安定化 ISPH 法と比べ 1.2 倍程度の計算時間で解析できることを確認した (図 4).

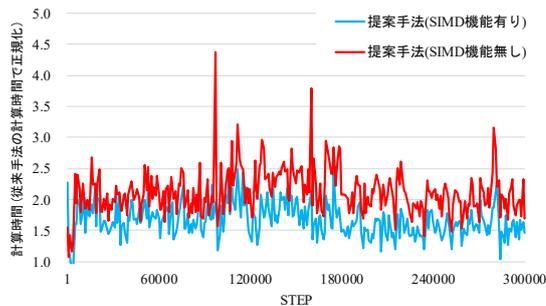


図 4 各時刻ステップにおける圧力ポアソン方程式の計算時間

また, 2019 年度成果である陽的 MPS 法とポリゴン壁境界モデルの動的負荷分散アルゴリズムの開発を継続実施し, 構造物変形に伴う移動境界や連成界面の物理量補間計算・送受信コストを考慮した動的負荷分散アルゴリズムの効率化を行っている. 連成界面における解析の精緻化のために, 従来の壁粒子やポリゴン壁とは異なる方法, 有限要素法の積分点を EMPS 法の壁境界として用いる手法 (ghost cell boundary 法)の開発と, 3次元連成解析への適用を実施した. また, 弾性体障害物付きダムブレイク問題を解析し, 他の解析手法による結果と比較することで妥当性を検証した(図 5).

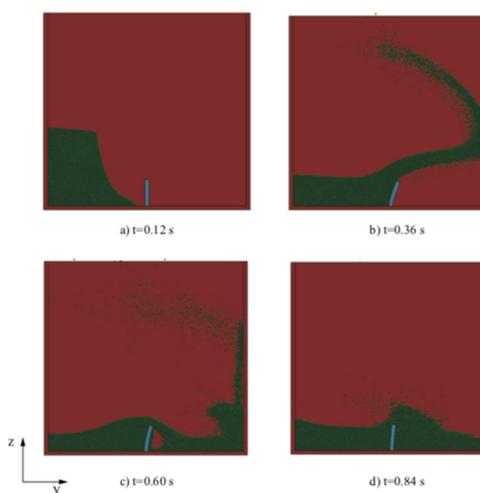


図 5 弾性体障害物付きダムブレイク問題の 3次元解析

上記の EMPS と有限要素法との流体構造連成解析とは別に、同様な陽的 ISPH 法 (EISPH) と Total Lagrange 型の SPH 法による大変形固体用ソルバーを実装することで流体構造連成解析を実施した。この成果は計算力学のトップジャーナルに掲載予定である。

また、可視化システムとして、大規模データの精度を落とさずにデータサイズを削減する方法として、大規模粒子データの並列圧縮の開発を行っており、現在は基礎的検討の段階である。

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

陽的 ISPH 法コードのマルチ GPU 実装として、マルチノード環境への対応について検討を進めており、現在はアルゴリズム検討の段階である。現時点では AOS 形式で定義した多次元配列を SOA 形式に変更し、並列化効率の向上を確認し、さらにマルチノード環境へ向けた基礎検討までは実施した。まずは流体解析機能に限定して、大規模シミュレーションの実施を進めており、現在は数値実験の準備段階である。

また、当初計画には含めていなかったが、連成解析全体の高性能化に向けて有限要素法コードのマルチノードかつマルチ GPU 実装も検討した。マルチコア並列計算のための領域分割データ構造を利用し、サブ領域単位で GPU への計算オフロード、かつ、ノード内のマルチコア CPU とマルチ GPU で OpenMP 動的スケジューリングによる動的負荷分散を実現した。現状では同一計算機の GPU 利用なしに比べて 3 割程度の計算時間削減であるが、連成解析時の計算資源有効活用につながるものである。

6. 今年度の進捗状況と今後の展望

(テーマ A)

安定化パラメータの最適化理論を、非圧縮

性 Navier-Stokes 方程式と Darcy 則の統一方程式に対する安定化 ISPH 法に拡張し、浸透流の検証問題を用いて導出した安定化パラメータの有効性を検証した。

重心ボロノイ分割に基づく粒子初期配置については、効率的な Momentum+法の開発に成功した。一方、3次元問題への拡張は検討に留まった。

テーマ A 全体として進捗状況はほぼ計画通りであった。

(テーマ B)

構造物変形に伴う移動境界面の取り扱いについて、粒子法の壁境界として有限要素法側の要素積分点を用いる方法の開発や3次元流体構造連成解析への適用などを行った。一方で、負荷分散機構や連成解析向け MPMD 型並列計算の効率化は検討に留まった。また、可視化システムは計画に沿って計画実施したが、並列 SVD による大規模粒子データ圧縮は検討中である。

テーマ B 全体として進捗状況は 6 割程度であった。コロナ禍による年度頭の立ち上げ遅れがそのまま響いた結果となった。

(テーマ C)

流体シミュレータのマルチ GPU 計算を継続実施し、進展はあるが、計画していた大規模粒子シミュレーションは準備に留まった。一方で、当初計画にない有限要素法による構造シミュレータのマルチノードかつマルチ GPU 計算も実施し、一定の成果が得られた。

テーマ C 全体として進捗状況は 5 割程度であった。今後は研究体制の見直しを行い、GPU 計算に関する研究を進めていく予定である。

7. 研究業績一覧

(1) 学術論文 (査読あり)

- [1] D.S. Morikawa, H. Senadheera, M. Asai, 'Explicit Incompressible Smoothed Particle Hydrodynamics in a multi-GPU environment

- for large scale simulations', Computational Particle Mechanics, 2020
<https://doi.org/10.1007/s40571-020-00347-0>
- [2] T. Kinoshita, Y. Watanabe, M.T. Nakao, 'Some lower bound estimates for resolvents of a compact operator on an infinite-dimensional Hilbert space', Journal of Computational and Applied Mathematics (369), p. 112561, 2020
- [3] Y. Watanabe, T. Kinoshita, M.T. Nakao, 'Some improvements of invertibility verifications for second-order linear elliptic operators', Applied Numerical Mathematics (154), pp. 36 - 46, 2020
- [4] 荻野正雄, '粒子の重心ボロノイ分割配置に対する最適化アルゴリズム', Transaction of JSCES (2020), p. 20201002, 2020
- [5] Z. Zheng, G. Duan, N. Mitsume, S. Chen, S. Yoshimura, 'An Explicit MPS/FEM Coupling Algorithm for Three-Dimensional Fluid-Structure Interaction Analysis', Engineering Analysis with Boundary Elements (121), pp. 192 - 206, 2020.
- [6] 藤井孟大, 浅井光輝, 井元佑介, '物理速度と輸送速度を区別した選択型デュアル流速 ISPH 法を用いた混相流解析', 土木学会論文集 A2 (76-2), pp. I_247 - I_257, 2020
- [7] L. Yi, M. Asai, B. Chandra, M. Isshiki, 'Energy-tracking impulse method for particle-discretized rigid-body simulations with frictional contact', Journal of Computational Particle Mechanics (8), pp. 237 - 258, 2021
- [8] M. Asai, Y. Li, B. Chandra, S. Takase, 'Fluid-rigid body interaction simulations and validations using a coupled stabilized ISPH-DEM incorporated with the energy tracking impulse method for multiple body contacts', Computer Method in Applied Mechanics and Engineering (377), 113681, 2021
<https://doi.org/10.1016/j.cma.2021.113681>
- (2) 国際会議プロシーディングス (査読あり)
 該当ありません。
- (3) 国際会議発表 (査読なし)
- [9] B. Liu, M. Ogino, M. Asai, T. Katagiri, S. Ohshima, 'Large-scale numerical simulation of fluid-rigid interactions simulation based on a stabilized ISPH method with Chebyshev basis CG solver', 3rd COMPSAFE, December, 2020
- [10] K. Tsuji, M. Asai, 'Comparison of Spherical and Non-Spherical DEM in Reproducing Arch-Effect Characteristic of Ground Collapse Phenomenon', 3rd COMPSAFE, December, 2020
- [11] T. Fujii, M. Asai, Y. Imoto, 'Fluid-solid multiphase analysis using a selective dual velocity ISPH method dividing into physical and transport velocity', 3rd COMPSAFE, December, 2020
- [12] M. Ogino, 'Study on particle setup methods with machine learning for particle methods', 14th WCCM, January, 2021
- [13] M. Asai, Y. Li, 'Simulations of free-surface flow interacting with multiple rigid bodies using coupled ISPH-DEM incorporated with an energy-tracking impulse method', 14th WCCM, January, 2021
- [14] D.S. Morikawa, M. Asai, 'Non-Newtonian fluid simulation using a particle method for landslide simulations', 14th WCCM, January, 2021
- (4) 国内会議発表 (査読なし)
- [15] 藤井孟大, 浅井光輝, 井元佑介, '物理速度と輸送速度を区別した選択型デュアル

- 流速 ISPH 法を用いた混相流解析', 第 23 回応用力学シンポジウム, 2020 年 5 月
- [16] 荻野正雄, '粒子充填における深層強化学習の応用に関する検討', 第 25 回計算工学講演会論文集, 2020 年 6 月
- [17] 辻勲平, 浅井光輝, 'SPH-DEM 連成による地盤陥没現象の再現解析における球形・非球形 DEM の比較', 第 23 回応用力学シンポジウム, 2020 年 5 月

(5) 公開したライブラリなど

該当ありません.

(6) その他(特許, プレスリリース, 著書等)

該当ありません.