

jh210037-NAH

粒子法の基盤理論・技術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。2021 年度は、提案する選択型デュアル流速 ISPH 法の流体・地盤・構造連成問題における開発・検証、重心ボロノイ分割による粒子初期分布が計算結果に与える影響評価、マルチ GPU ノードを含んだ並列計算機における効率化、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

・大規模流体シミュレータの開発

荻野正雄（大同大学、代表）、浅井光輝（九州大学、副代表）、西浦泰介（海洋研究開発機構）、三目直登（筑波大学）

・大規模流体シミュレータの高性能化

大島聡史（名古屋大学、副代表）、小野謙二（九州大学）

・粒子法の高精度化

井元佑介（京都大学）、田上大助（九州大学）、渡部善隆（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 5 年目となる 2021 年度は、粒子法による大規模マルチフィジックスシミュレーションに対象を限定することで一層の研究加速を目指した。具体的には、解析対象を流体・地盤・構造の連成問題へと拡張を目指すとともに、マルチ GPU 計算機を含んだ計算環境での高速化を図ることでソルバーの実用性改善を目指した。

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、碎波や瓦礫・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こと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。2020 年度は、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 法に拡張して浸透流の検証問題を用いた有効性検証、重心ボロノイ分割に基づく粒子初期配置向けの効率的な Momentum+法の開発、流体構造連成問題における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と 3 次元解析への適用など、粒子法によるマルチフィジックスシミュレータの開発に関する成果が得られた。

5. 今年度の研究成果の詳細

2021 年度は研究項目 A, B を実施した。

A. [数値解析学・計算力学の観点からの検証]

これまで流体を主な解析対象としてきたが、今年度は特に地盤解析機能を強化した。地盤が流動化し、再堆積するまでの相変化を含む大変形解析を実施するには、粒子法などのメッシュがない解析手法が有効とされている。固体状態として自立している地盤が流動化し、再び安定化した地盤へと変化する相変化を伴う地盤材料の解析として、ビンガム流体あるいはレオロジーモデルなどの非ニュートン型の流体モデルとして簡易化することが多い。しかしながら、この斜面崩壊は余震時には崩壊は発生せず、本震時に発生したことから、発生箇所から発生後の被害までを予測するには固体としての地盤から流体化していく過程をより正確に解析すべきである。そこで、固体としての地盤から流体化していく過程までを再現するために、弾塑性体の SPH 法から非ニュートン流体 SPH 法へと相変化させる新たな粒子法を開発した。単一ノード内の複数 GPU を使い、阿蘇の斜面崩壊現象を 3m 解像度で解析できるコード

を開発し、その結果(図 1 参照)を含む内容が Computers and Geotechnics[1,2]に掲載決定となった。



図 1 固体から高粘性流体へと相変化する粒子モデルによる熊本地震時の阿蘇の斜面崩壊の再現

また偏在する粒子配置は SPH 法の精度低下を引き起こすが、このような状態でも高精度に微分演算できる勾配補正付きの微分演算子モデルを構築している。また修正微分演算導出法は混合微分が必要となる座標変換にも応用ができ、境界適合粒子法へと展開ができた(業績の論文[3]を参照)。

また、粒子初期配置における重心ボロノイ分割(CVT)配置の利用について継続実施した。特に、大規模粒子数における CVT 配置の実現可能性を調べるために、粒子間距離 l_0 を変えながらの数値実験を行った。表 1 に粒子数 n , 反復回数, 計算時間を示す。計算には名大スパコン「不老」Type I サブシステムを用いた。数百万粒子規模から計算時間が膨大となり、実用性が下がることが分かった。

表 1 大規模粒子数の CVT 実験

l_0	n	Iter.	Time [h]
0.016	12,256	538	0.18
0.008	49,050	550	0.66
0.004	196,278	698	3.31
0.002	785,218	838	29.2
0.001	3,141,034	266	20.1

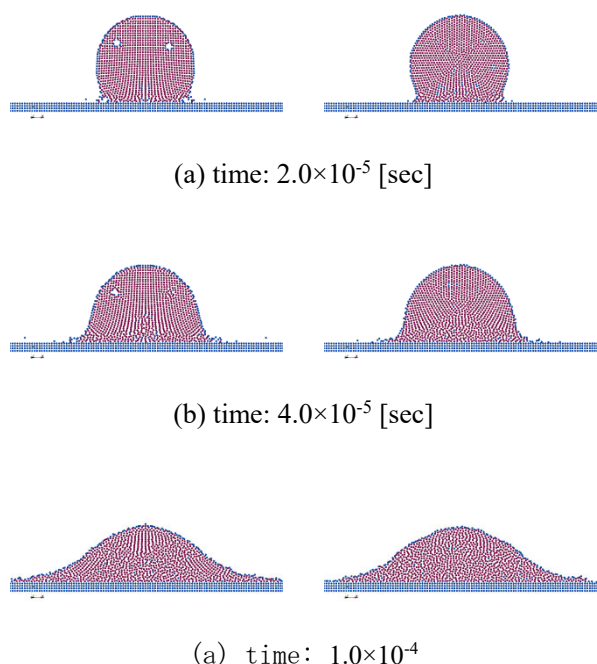


図 2 液滴落下問題における粒子初期配置の影響評価 (左：直交格子, 右：CVT)

そのため共有メモリ並列計算の適用を検討したが, Cython コードである開発システムで採用するデータ構造が Cython+OpenMP に適さず, 大幅な改修が必要になることが分かった. さらに, ログインノードと計算ノードでアーキテクチャが異なるクロスコンパイラ環境である「不老」Type I サブシステムでは, Python 標準機能以外のモジュールを利用する Cython コードのクロスコンパイルそのものが困難であることも分かった. そこで, Python 標準機能である ctypes を用いた Python コードと C コードの連携について調査し, 有効性を確認できた. この場合も開発システムの大幅な改修は必要になるが, より高い可搬性を持つ Python コードの開発指針が得られた. また, 一般的な直交格子配置と CVT 配置が流れ解析に与える影響の評価を行った. 図 2 は液膜なしの床に対する液滴落下問題解析における計算初期の粒子分布である. 表面張力項は粒子間ポテンシャルで計算している. 図では表面と流体内部で粒子を色分けしているが, 直交格子配置では計算初期に流体

内部で表面誤判定が生じた. 一方, CVT 配置では誤判定が起きていないことが分かる. ただし, ある程度時間発展させて観察すると, 今回の計算初期における表面誤判定が計算結果に与える影響はほぼなかった.

B. [流体シミュレータの高性能化]

これまでに開発した大規模流体シミュレータを GPU 計算機に実装する. 2020 年度までにノード内マルチ GPU を利用した数億粒子規模の流体シミュレーションに成功している. そこでマルチ GPU 計算に関する研究を継続実施し, 特に複数ノードへの対応に新たに取り組んだ. コードの設計は, これまで CPU スパコンで培ったスライスグリッドによる領域分割と通信時間を含む実計算時間の計測に基づく動的負荷分散法をベースとして, GPU 用にアレンジしている. また CUDA-Aware MPI を使い, メインメモリとデバイスメモリ間の不要なデータコピーを削減し, 複数ノードに跨ぐマルチ GPU の通信性能を高めた.

単純な水柱崩壊の解析を通して, マルチ GPU に関する Weak および Strong スケーリングの計測を行い, それぞれ図 3 と 4 に示す結果が得られた. 図 3 に示す Weak スケーリング計測では, 半陰解法のメモリ制約から 1GPU あたりの粒子数を 256 万粒子に固定し, 16GPU では 4059 万粒子まで増加させた. 陽解法では 95.8%, 半陰解法では 64% と良好なスケーリング性能を示した. また半陰解法については, 問題規模の増加に伴い, 計算時間の大半を占める連立一次方程式に対する共役勾配法の反復回数が増加しているため, 演算数に対するスケーリングを計測すれば, 64%(時間)から 93.8%(演算数)へとなり, 良好なスケーリング性能を示した.

図 4 には半陰解法による Strong スケーリング計測時のプロファイラを示す. この図からも半陰解法では連立一次方程式ソルバーの計算時間が支配的であることが一目瞭然

であり、また使用する GPU の数が 4, 8, 16 と増加するにつれ、この計算時間が単調に減少している。今後、自由度の増加に対して反復回数が増加しない前処理方法の開発が必要となるものと考えている。

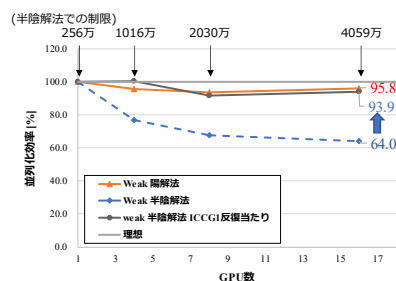


図3 Weak スケーリング計測結果

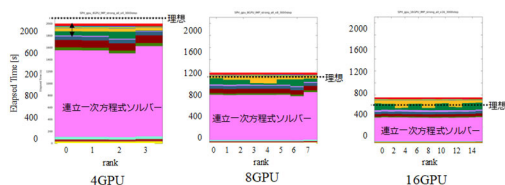


図4 Strong スケーリング計測時 (256 万粒子) のプロファイラ

6. 今年度の進捗状況と今後の展望

(テーマ A)

今年度は、これまで流体を主な解析対象としてきたが、特に地盤解析機能を強化した。地盤斜面崩壊の崩壊プロセスの全貌を解くため、固体としての地盤から流体化していく過程までを弾塑性体の SPH 法から非ニュートン流体 SPH 法へと相変化としてモデル化し、単一ノード内の複数 GPU を使い、阿蘇の斜面崩壊現象を 3m 解像度で解析できるコードを開発した。

また、CVT 配置による粒子初期分布について、水柱崩壊問題と液滴落下問題を用いて初期分布が計算結果に与える影響を評価した。CVT 配置によって計算初期の粒子偏在やそれに伴う表面誤判定を軽減できる結果が得られた。多くのケースで時間発展する過程でその影響はなくなっていたが、Hele-Shaw 流れ問題など表面誤判定が重大な影響を与え

る場合には提案する CVT 配置が有用である。なお、申請時は 3 次元問題への適用を計画していたが、新たに追加した表面張力項の妥当性評価に時間を要したため、2 次元問題に限定する方針に変更した。一方で、クロスコンパイラ環境における Python, Cython, 並びに C の連携について有用な知見が得られたのは当初計画にない進捗であった。

テーマ A 全体として進捗状況は 9 割程度であった。

(テーマ B)

単純な水柱崩壊の解析を通して、マルチ GPU に関する Weak および Strong スケーリングの計測を行い、16GPU を使い 4059 万粒子まで増加させた。特に陽解法の Weak スケーリングは 95.8% と良好な結果を得た。

テーマ B 全体として進捗状況は 9 割程度であった。

7. 研究業績一覧

(1) 学術論文 (査読あり)

- [1] D. S. Morikawa, M. Asai, 'A phase-change approach to landslide simulations: Coupling finite strain elastoplastic TLSPH with non-Newtonian IISPH', Computers and Geotechnics (148), 104815, 2022
- [2] D. S. Morikawa, M. Asai, 'Soil-water strong coupled ISPH based on u - w - p formulation for large deformation problems', Computers and Geotechnics (142), 104570, 2022
- [3] 松本久也, 井元佑介, 浅井光輝, 三目直登, '底面境界適合型 MPS 法の開発', 日本計算工学会論文集 (2021), pp. 20210017, 2021
- [4] 大村浩之, 三目直登, 浅井光輝, 磯部大吾郎, '壁領域の角を考慮したポリゴン壁境界モデルの開発およびその ISPH 法への適用', 日本計算工学論文集 (2021), pp. 20210011, 2021
- [5] D. S. Morikawa, M. Asai, 'Coupling total Lagrangian SPH-EISPH for fluid-structure

- interaction with large deformed hyperelastic solid bodies', Computer Method in Applied Mechanics and Engineering (381), 113832, 2021
- [6] Y Imoto, 'Difference between smoothed particle hydrodynamics and moving particle semi-implicit operators', Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering (395), 115012, 2022
- (2) 国際会議プロシーディングス (査読あり)
- (3) 国際会議発表 (査読なし)
- [1] M. Ogino, 'Machine-learning-enhanced random close packing for particle simulations', MMLDT-CSET2021, September, 2021
- [2] M. Ogino, Y. Ogisu, 'Performance evaluation of centroidal Voronoi tessellation for initial particle distribution of particle methods', ICCM2021, July, 2021 (Keynote Lecture)
- [3] K. Tsuji, M. Asai, K. Kasama, 'Simulation of Breakwater Failure induced by Tsunami Using an ISPH-DEM Coupled Method', COUPLED PROBLEMS 2021, June 2021
- [4] D. S. Morikawa, M. Asai, 'Smoothed particle hydrodynamics method for landslide problems based on Biot's formulation and elastoplastic constitutive models', COUPLED PROBLEMS 2021, June 2021
- (4) 国内会議発表 (査読なし)
- [1] 荻野正雄, 荻巣豊, '重心ボロノイ分割粒子初期配置による大規模流体シミュレーション', 日本機械学会第 34 回計算力学講演会, 2021 年 9 月
- [2] 荻巣豊, 荻野正雄, '大規模粒子数の重心ボロノイ分割に向けた検討', 令和三年度電気・電子・情報関係学会東海支部連合大会, 2021 年 9 月
- [3] 竹崎奏詠, 辻勲平, ハザリカ・ヘマンタ, 浅井光輝, '粘り強い防波堤の構築に向けた捨石マウンドの洗掘低減効果の解析的検討', 第 56 回地盤工学研究発表会, 2021 年 7 月 (優秀発表者賞)
- [4] 荻野正雄, '深層強化学習を用いた粒子ランダム稠密充填の検討', 日本計算工学会第 26 回計算工学講演会, 2021 年 5 月
- [5] 荻巣豊, 荻野正雄, '粒子初期配置向け重心ボロノイ分割探索における Optimizer の性能評価', 日本計算工学会第 26 回計算工学講演会, 2021 年 5 月
- [6] 辻勲平, 竹崎奏詠, 浅井光輝, ハザリカヘマンタ, 'SPH-DEM マクロ型連成解析手法による防波堤の浸透・洗掘破壊シミュレーション', 第 26 回計算工学講演会, 2021 年 5 月
- [7] 辻勲平, 浅井光輝, 笠間清伸, 'SPH-DEM によるマウンド変形・ケーソン滑動を考慮した防波堤浸透崩壊シミュレーション', 第 24 回応用力学シンポジウム, 2021 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。