

平成 30 年 6 月 25 日現在

機関番号：82401

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2016～2017

課題番号：16K16063

研究課題名(和文)並列計算環境におけるメッシュレス法の為の高性能・高安定・低コストな形状関数の開発

研究課題名(英文)Development of high efficiency, highly stable and a low cost shape function for meshless method in parallel computing

研究代表者

大井 祥栄 (Yoshiharu, Ohi)

国立研究開発法人理化学研究所・計算科学研究機構・特別研究員

研究者番号：10721045

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,800,000円

研究成果の概要(和文)：2016年度は「delta function propertyを満たす形状関数の数学的特徴の精査」および「メッシュレス法の応用の現状調査」として論文・著書サーベイや会議聴講により情報収集を実施した。2017年度は上記に基づき"delta function property"を満たすものを抽出し、FDTDに応用を試みた。結果として、計算精度および安定性の向上は確認できたが、計算コストが増加した。これらの知見のまとめを試みたが、期間終了前(2018年2月末)に所属(理化学研究所 計算科学研究機構)を退職することとなり、研究を打ち切ることとなった。

研究成果の概要(英文)：In FY2016, I surveyed papers or books as "inspection of the mathematical characteristic of the shape function satisfying delta function property" and "investigation of present application of the meshless method". In FY2017, I applied a shape function satisfying delta function property to Finite-Difference Time-Domain Method. As a result, computational accuracy and stability improved, but a computational cost increased. I resigned from RIKEN Advanced Institute for Computational Science before the end during a period, and broke off a study.

研究分野：数値シミュレーション

キーワード：メッシュレス法 形状関数 delta function property FDTD MTDM

1. 研究開始当初の背景

昨今、電磁場解析における時間発展の数値シミュレーションには Finite Difference Time-Domain Method (FDTD) が多用される。力学に現れる波動方程式は二階偏微分方程式で表わされるため、一般的に関数は C^2 級である。一方、FDTD では Maxwell 方程式における Ampere の法則と Faraday の法則を独立に解くため、関数は C^1 級でよい利点をもつ。また、FDTD は陽解法であり、各節点における計算が独立に行えるため、並列処理に向いている。一般的な FDTD では節点をメッシュに沿って配置する必要があり、複雑形状領域の解析には細かいメッシュを用いることや部分的に異なるメッシュを適用する等の工夫が必要であり、複雑形状領域の解析が困難と言える。

幾何学的なメッシュが不要で複雑形状領域の解析が容易な計算手法としてメッシュレス法が注目されている。ここで、複雑形状領域の解析として有限要素法が挙げられるが、メッシュ生成が必要である。例えば大変形問題を扱う場合、メッシュ再生成が必要となり計算コストが膨大となり、時間的な要因により解析が困難となる。一方、メッシュレス法を用いた場合メッシュ生成が不要という利点があるため、これらの問題への応用されている。

2008 年に Kaufmann らにより、FDTD にメッシュレス法を応用した Meshless Time-Domain Method (MTDM) が提案された[1]。MTDM は C^1 級関数でよいことや並列処理に向いている等の FDTD の利点を継承し、複雑形状領域の解析が容易なことやメッシュ生成が不要という利点をもつ。そこで、MTDM は電磁場解析における大変形問題に応用が可能であると期待されている。例えば、大型ヘリカル装置(核融合炉)のプラズマ加熱システムでは、電子サイクロトロンから発生させた電磁波を全長 100 メートル程度の導波路を経由してプラズマに入射させる。この導波路の内部は渦電流損失を低減させるように複雑な形状をしている。また、導波路は数回直角に曲がっており、電磁波を直角に反射させるミラーも複雑な形状をしている。ここで、実験では電磁波を直角に反射させることで起こる特性の変化の測定が困難なため、数値実験による解析に期待が集まっている。また、装置運転中にミラーを回転させ、反射後の電磁波の特性に変化をもたせることもあり、大変形問題として扱う必要がある。現在は FDTD を用いて解析を行っているが、上記のように、複雑形状領域の詳細なトレースが困難であることやメッシュ生成コストが膨大なことから解析が困難である。そこで、MTDM を用いてこれらを解消

することに期待が高まっている。

[1] T. Kaufmann, C. Fumeaux and R. Vahldieck, The meshless radial point interpolation method for time-domain electromagnetics, Microwave Symposium Digest, IEEE MTT-S International (2008), pp. 61-64.

2. 研究の目的

上記背景に基づいて本研究では「並列計算環境」を前提とした「高精度・高安定・低コスト」な新たなメッシュレス法を提案し、既存の手法では困難な問題のブレイクスルーを創生する。

現在、並列計算環境において MTDM を用いた解析を行う場合、ユーザが並列計算環境向けに実装している。具体的には、複数ノードに分散した節点の情報を通信しているが、そこでのオーバーヘッドが少なくなるように通信削減や通信隠蔽技術を組み込んでいる。従って、並列計算環境での利用を前提として形状関数生成ルーチンも含めて開発することにより、MTDM を用いる場合の共通基盤となることを見込まれる。

本研究によって「並列計算環境」での利用を前提とした「高性能・高安定・低コスト」な形状関数の開発することにより、電磁場解析全体の精度・安定性の向上および計算時間の削減が見込まれ、既存の手法では解析が困難な大規模問題や大変形問題等のブレイクスルーになると予想される。また、MTDM が当該分野へ普及することを後押しすると考え、本研究の意義とも考えられる。

更には、本研究では電磁場解析に向けて開発するが、音場や地震波等、波動方程式で記述される現象の解析に応用が見込め、周辺分野での技術革新に繋がると考える。

3. 研究の方法

筆者はこれまで MTDM に対する基礎研究として計算精度や安定性等に関する研究をしてきた[2]。そこで、形状関数生成に用いる重み関数や様々なパラメータにより計算精度や安定性が大きく変わることを解明し、重み関数の種類やパラメータの最適化を行った。また、形状関数生成のための計算コストを削減する手法を提案し、最大で 40 倍程度の高速化に成功した[3]。

筆者はこのように MTDM に関する研究を進めてきたが、更なる計算精度や安定性の向上、計算コストの削減が望まれる。そして、既存の手法より「高精度・高安定・低コスト」な新しい形状関数の開発が必須と考えるに至った。また、昨今、コンピュータの高性能化・低価格化が進み、高性能なコンピュータを利用する機会が増え、並列計算環境における数値計算が主要である。従って、「並列計算環境」での利用を前提とした開発が適切と考える。

本研究では、「並列計算環境」での利用を前提とした「高性能・高安定・低コスト」な形状関数の開発に関する研究を進めるにあたり、以下の4つの項目について順に進めていく:

- (1) delta function property を満たす形状関数の数学的特徴の精査
- (2) 新しい形状関数の開発
- (3) MTDM への実装と形状関数生成ルーチンの開発
- (4) 形状関数生成ルーチンの高速化および並列環境での最適化

(1) メッシュレス法を電磁場解析に応用する為には形状関数が "delta function property" を満たす必要がある。形状関数にこの特性を組み込む場合は形状関数の数学的特徴の精査が必要不可欠である。形状関数の特性を調べるため、重み関数の特性やその他数学的な特性等を深く調査する。

(2) (1)の調査に基づき、MTDM に応用可能な形状関数を開発する。ここで重要なのが、研究目的でも挙げた「高性能・高安定・低コスト」である。また、本研究ではそれに加え「並列計算環境」での利用を前提としており「高性能」には通信を減らして計算を速くする意味も含む。更に、高性能な手法であっても導入コスト(プログラミングの難易度等)が高くては同手法の普及を阻害する。従って、「低コスト」には計算コストを抑えるだけでなく、プログラミング等を考えた導入コストの削減も含む。

(3), (4)は同時進行。2.の開発に基づき、MTDM へ形状関数を実装する。

そして、本研究で開発する形状関数を普及させるために、更に導入コストの削減を目指す。その為に、形状関数生成の基本的なルーチンを開発し、オープンソースとして公開する。その場合も、「並列計算環境」での利用を前提に考え、最適なデータ構造や通信方法を考慮する。昨今の計算機は、複数のコアをもつ CPU またはアクセラレータで1つのノード内に1つもしくは複数あり、数百・数千のノードを連結して1つの計算機を構成していることが多い。従って、同環境下での最適化を考えると MPI を代表とするノード並列と OpenMP を代表とするスレッド並列を組み合わせたハイブリッド並列を前提とする必要がある。

[2] Y. Ohi and S. Ikuno, Numerical investigation of electromagnetic wave propagation phenomena by three-dimensional meshless time-domain

method, Plasma and Fusion Research, 10, 3406072 (2015).

[3] Y. Ohi, Y. Fujita, T. ITOH, H. Nakamura and S. Ikuno, Faster generation of shape functions in meshless time domain method, Plasma and Fusion Research, 9, 3401144 (2014).

4. 研究成果

2016 年度は形状関数の肝となる "delta function property" に着目し「delta function property を満たす形状関数の数学的特徴の精査」および「メッシュレス法の応用の現状調査」を行った。具体的には論文・著書サーベイや会議聴講により情報収集を実施した。

2017 年度は上記に基づき多々ある形状関数の中で "delta function property" を満たすものを抽出し、FDTD に応用を試みた。結果として、計算精度および安定性の向上は確認できたが、計算コストが増加した。

これらの知見のまとめを試みたが、期間終了前(2018年2月末)に所属(理化学研究所 計算科学研究機構)を退職することとなり、研究を打ち切ることとなった。その結果、論文等の執筆に至らなかった。また、申請時は期間が2年間の予定だったが、途中で期間を3年に延ばそうと考えたが、これも上記の理由によりできなかった。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

〔雑誌論文〕(計 0 件)

〔学会発表〕(計 0 件)

〔図書〕(計 0 件)

〔産業財産権〕

出願状況(計 0 件)

名称:
発明者:
権利者:
種類:
番号:
出願年月日:
国内外の別:

取得状況(計 0 件)

名称:
発明者:
権利者:
種類:
番号:

取得年月日：
国内外の別：

〔その他〕
ホームページ等

6. 研究組織

(1) 研究代表者

大井 祥栄 (OHI, Yoshiharu)
国立研究開発法人理化学研究所・計算科学
研究機構・特別研究員
研究者番号：10721045

(2) 研究分担者

該当なし ()

研究者番号：

(3) 連携研究者

該当なし ()

研究者番号：

(4) 研究協力者

該当なし ()