

課題番号 jh160042-NAH

適合細分化格子を用いた格子ボルツマン法による非球形固体粒子との直接相互作用計算に基づいた大規模混相流シミュレーション

青木 尊之 (東京工業大学)

概要 流動層などで特徴的な混相流の解析において、流体計算の格子サイズを固体粒子のサイズより十分細かくすることにより、粒子と流体との相互作用を直接解くシミュレーションが可能になる。固体粒子どうしの衝突には個別要素法を用い、流体計算には格子ボルツマン法を用いる。さらに、複雑な容器形状や計算領域に合わせた適合格子細分化法により、複数 GPU を用いた大規模シミュレーションを効率的に実行する。流体の単独解析 (単相流) については、適合格子細分化法を適用した計算領域を空間重点曲線に基づいて領域分割する複数 GPU 計算が可能になった。均一格子を用いた計算では、球形固体粒子 56 万個と 12.6 億格子による固液の流動層シミュレーションを TSUBAME2.5 の 128 GPU を使って行った。また、非球形粒子を用いた混相流シミュレーションとして 512 枚のイチヨウの葉が舞い落ちるシミュレーションを流体計算に 20 億格子割り当て、128 GPU で計算することができた。年度の後半では、固気混相流の大規模噴流層シミュレーションを行い、粒子数 81,920 個と格子ボルツマン法の計算には $512 \times 512 \times 1680$ 格子を用い、48 個の GPU で計算を実行した。さらに球形粒子の周りに 5 段階で細分化格子を適合させ、空力解析も実施した。球近傍の格子解像度で計算領域全体を等間隔直交格子で満たした場合の格子点数は $4097 \times 4097 \times 8093$ (=1358 億) に相当する。領域間通信時間を短縮するためのさまざまな方法を導入し、複雑に分割された領域形状に対して大規模計算が可能になった。レイノルズ数が 1×10^5 の辺りで抗力係数が急激に低下するドラッグ・クライシスを再現できた。

1. 共同研究に関する情報

(1) 共同研究を実施した拠点名

東京工業大学・学術国際情報センター

渡辺 勢也 (東工大) : 固体運動による移動境界と格子ボルツマン法の連成計算

長谷川 雄太 (東工大) : D3Q27 モデルの GPU 実装と C++テンプレートによるカーネル生成

(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

青木 尊之 (東工大) : 研究総括・GPU 実装の詳細な指示

小林 宏充 (慶応義塾大) : サブグリッド LES モデルの開発

須賀 一彦 (大阪府立大) : D3Q27 モデルの MRT 時間積分

森口 周二 (東北大) : 固体衝突の物性パラメータ設定

桑田 祐丞 (東京理科大・現大阪府立大) : 格子細分化のレベル差補正

2. 研究の目的と意義

固体粒子を多数含んだ流れは化学プラントなどの流動層で利用されるため産業上非常に重要な役割を果たしているが、その流体力学的振る舞いは十分に理解されていない。サスペンション・フローやデブリス・フローなど、粒子密度や粒子サイズに応じて流れが大きく変化する。これまで経験則に基づいたモデル式が使われてきたが、最近では固体粒子を質点として扱い、粒子を球形と仮定して解析的な抗力を粒子に与え、流体には粒子分布に基づいた体積力を与える計算により流動層などを定性的に計算できるようになってきた。しかし、粒子間衝突や非球形の粒子形状を考慮することができないため、現実の複雑な流体挙動の解析が十分できないという問題点が指摘されている。非球形の固体が流体中に多数存在する固・気または固・液混相流に対し、形状を考慮した固体粒子と流体の相互作用を直接計算する混相流シミュレーションを行う必要がある。そのためには、粒子形状を分解できる高解像度格子が必要と

なり、必然的に大規模計算となる。一方、現実の問題として化学プラントなどの複雑な配管の流路に対し、これまでは非構造格子を用いた有限要素法や有限体積法が広く使われてきた。しかし、間接参照のメモリ・アクセスや大規模疎行列計算の収束性が悪く、これまでの手法ではエクサスケールの計算は非常に困難との見解が支配的である。

本研究では、非球形固体粒子との直接相互作用計算に基づいた大規模混相流の実問題に対するシミュレーションをエクサスケールで実現するための計算手法の開発と、性能/電力および性能/コストの高い GPU マシンでの実証を目的とする。具体的には、非構造格子の代わりに局所的に連続アドレスの間隔格子(構造格子)を用い、非圧縮性流体計算に対して疎行列計算を行う半陰解法の代わりに、弱圧縮性を仮定した完全陽解法を用いる。計算手法は、单相非圧縮性流体計算について弱圧縮性の陽解法として十分な実績のある格子ボルツマン法を用いる。直交等間隔格子に基づいた手法であるため複雑形状の物体境界に対して、Interpolated Bounce Back 法を D3Q27 モデルに適用することにより、非構造格子境界条件に匹敵する精度を得ることができる。また、これまで多く用いられてきた SRT(Single Relaxation Time)の時間積分の代わりに MRT(Multiple Relaxation Time)を用い、計算の安定性を大幅に向上させる。計算効率を飛躍的に向上させるために、物体形状や必要とされる計算精度に応じて格子を 8 分木データ構造で再帰的に細分化する適合格子細分化法を用いる。リーフに大きめのパッチを当てれば Building Cube Method とほぼ同じになるが、概念としては以前から提案され広く研究されてきた静的な AMR(Adaptive Mesh Refinement)法と同じである。これらを全て組み合わせた GPU 計算を実装し、実問題に適用して有効性を示す。

3. 当拠点公募型共同研究として実施した意義

研究代表者のグループはこれまで大規模計算(HPC 分野)の実績があり、GPU コンピューティングの研究を進めてきた。本共同研究の体制は、格子ボルツマン法の最先端の研究を進めている大阪府立大学の研究者、LES 乱流モデルの国内の第一人者である慶応大学の研究者、流体と粒子の相互作用計算の経験が豊富な東北大学の研究者で構成されている。JHPCN の枠組みを使い、HPC 分野の研究者と機械系計算力学分野、土木系応用力学分野の研究者が連携することで初めて TSUBAME 2.5/3.0 において実問題の大規模混相流シミュレーションを達成することができる。

4. 前年度までに得られた研究成果の概要

新規採択課題なので、該当しない。

5. 今年度の研究成果の詳細

5.1 節から 5.7 節までの内容が平成 28 年 11 月まで

に得られた研究成果であり、5.8 節と 5.9 節の内容がそれ以降の研究成果である。

5.1 再帰的な格子細分化の実装

流体解析は物体近傍に高い解像度の計算格子を必要とするため、物体周りの流れを解析する場合などでは、計算領域全体で均一な格子を用いると計算効率が悪くなる。木データ構造に基づく再帰的な格子の細分化により、高解像度が必要な領域に細かい格子を割当てて、2 次元格子では 1 回の領域分割で元の領域が 4 つに分割され、3 次元格子では 8 つに分割される。GPU 計算ではメモリ・アクセスを効率化するため、木構造の末端であるリーフに $2 \times 2 \times 2$ ではなく $16 \times 16 \times 16$ や $32 \times 32 \times 32$ のような大きい格子を割り当てる。木データ構造のリーフの再帰深度である細分化レベルが高いほどリーフの格子解像度は高くなる。図 1 では、リーフ 5, 6, 7, 8 はリーフ 2, 3, 4 の 2 倍の格子解像度(格子間隔は $1/2$)となる。

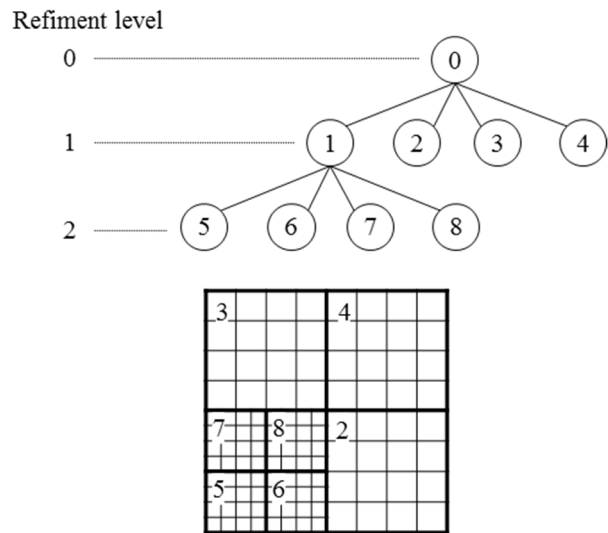


図 1 木データ構造に基づく細分化格子

格子ボルツマン法では、細分化レベルごとの格子幅に合わせて速度分布関数の 1 ステップ分の移動量を変更する必要がある。速度分布関数の速度 $c = \Delta x / \Delta t$ は一定であるため、格子幅 Δx に応じて時間刻み幅 Δt を変化させる。最も細かい格子の細分化レベルを lm 、時間刻み幅を $\Delta t(lm)$ とすると、細分化レベル l の格子における時間刻み幅は、以下のように定められる。

$$\Delta t^{(l)} = 2^{lm-l} \Delta t^{(lm)}$$

細分化レベルが 1 段上がる毎に時間刻み幅は半分になり、同時に時間ステップ数は 2 倍になる。さらに、通常の細分化格子における空間補間および時間補間に加えて、偏差応力テンソルの連続性を保つために次式の細分化レベルの変換を行う。

$$\hat{f}_\alpha^{(l-1)} = f_\alpha^{(l,eq)} + 2 \frac{\tau^{(l-1)} - 1}{\tau^{(l)} - 1} (f_\alpha^{(l)} - f_\alpha^{(l,eq)})$$

$$\hat{f}_\alpha^{(l+1)} = \tilde{f}_\alpha^{(l,eq)} + \frac{1}{2} \frac{\tau^{(l+1)} - 1}{\tau^{(l)} - 1} (\tilde{f}_\alpha^{(l)} - \tilde{f}_\alpha^{(l,eq)})$$

左辺はレベル変換により求められる速度分布関数である。上付き添字の $l-1, l, l+1$ は細分化レベルを表し、チルド記号は時間・空間補間された値であることを表す。

5.2 適合細分化格子における GPU カーネル実行の高速化

格子ボルツマン法に局所細分化格子を導入すると細分化の末端のリーフに割り当てる格子サイズが小さくなるため、GPU 計算の実行性能が大きく低下する。特に D3Q27 型では、リーフの外殻部分にある格子（外殻格子）の計算は、隣接格子点参照に対して多数の条件分岐を含む。

外殻格子計算の高速化のためには、存在しうるアクセスパターンをすべて列挙し、複数のカーネル関数に分割して記述する方法が考えられる。しかし、D3Q27 格子ボルツマン法においては、外殻格子点の位置によって図 2 のようにパターンが 26 通りあり、そのそれぞれに 27 通りの隣接点参照が存在するため、それらの組合せによるアクセスパターンの総数は 702 に達する。これほど多数のパターンを手動で記述することは、プログラムの生産性を考えると現実的でない。条件分岐の無い実装をするため、全隣接パターンの GPU カーネル関数を記述し、複数カーネルの同時実行による高速化を図った。プログラムの生産性を維持しながら記述するため、C++テンプレートを用いて 702 通りの GPU カーネル関数を自動生成する。すべての格子点を単一の GPU カーネルで計算する単純な実装に比べて 10 倍以上の高速化を達成することができた[1-3]。

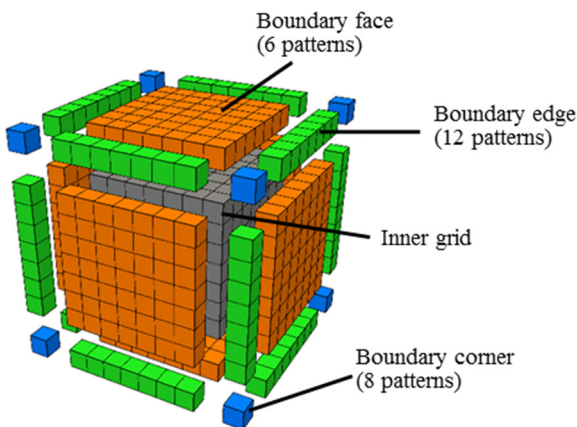


図 2 隣接点参照のパターンに基づくリーフ内の格子の分類

5.3 走行中の自転車周りの流れの計算

上記高速化手法を適用した例として、自転車競技の選手の周りの流れの計算を行った。計算領域の中で自転車競技の選手と自転車は静止した物体として扱い、自転車の進行方向から一定速度で風が流入すると仮定している。このような空力計算では、計算境界において圧力波が反射し、計算精度を悪化させ

ることが知られており、精度良く計算するためには計算領域を物体の遠方までとる必要がある。等間隔格子では広い計算領域をとるために物体近傍で格子解像度が不足するおそれがあるが、局所細分化格子を用いることで物体近傍を局所的に高解像度に行うことができる。各リーフには $32 \times 32 \times 32$ の格子を割り当てる。局所細分化格子の最深の細分化レベルを 3 とし、物体近傍に高解像度格子を集中させた。最高

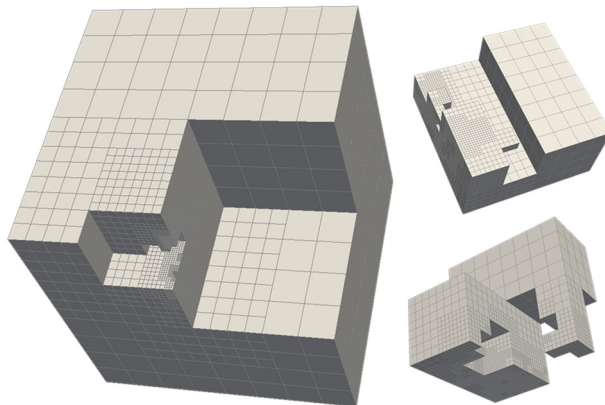


図 3 ヒルベルト空間重点曲線による領域分割

の格子解像度は、計算領域全体に等間隔格子を割り当てた解像度 ($1024 \times 1024 \times 1024$) に相当し、格子点数は 5% にまで削減されている。複数 GPU で計算するには、計算負荷が均等になるように領域分割する必要がある。リーフを空間充填曲線で辿り積算し、各領域でリーフの数がほぼ等しくなるように切断する (図 3)。ヒルベルト曲線は交差しないため、モーション曲線などよりも分割領域が良好な形状となる。



図 4 走行中の自転車周りの流れ

本計算では、流体の計算と同時に速度場に沿って移流する煙状のトレーサ粒子を流体計算と伴に計算し、計算結果を可視化している。乱流が十分に発達した時刻のスナップショットを図 4 に示す。レイノルズ数 40 万の流れになっているため、衝突ステップに Multiple Relaxation Time (MRT) モデルを適用し、ここでも LES モデルとしてコヒーレント構造スモグリンスキーモデル (CSM) を導入している。自転車の境界条件には Interpolated Bounce Back スキームを適用している。流れを可視化するためにトレーサ粒子を発生させ、自転車の背後に乱れた流れ場が生じていることが確認できた。

5.4 固体と流体の直接相互作用

これまでの殆どの固液・固気の混相流解析では、固体粒子は大きさを持たない点として扱われ、流体から固体粒子には理想化された抗力が働き、流体側には粒子運動をモデル化した力の項が運動方程式に加えられ、計算が行われてきた。流体を格子ベースの手法で計算する場合、1 格子内に複数個の粒子が存在することができる。しかし、このような流体と固体の相互作用の計算方法では、粒子が球形でない場合や高レイノルズ数の流れになった場合、十分な精度で解析が行えなくなる。そこで、固体粒子のサイズより格子間隔を十分に細かく取り、固体と流体が固体境界を介した直接相互作用を行う。

固体粒子-流体間の直接相互作用計算を行うためには、粒子の運動を格子ボルツマン法に移動境界条件として組み込む必要がある。ここでは、各計算セルの固体体積占有率に基づいて流体と固体の重み付けをする Immersed Moving Boundary を用いた。また、時間積分には安定性の高い MRT (Multiple Relaxation Time) モデルを用い、移動境界条件を含む時間発展方程式は

$$\mathbf{f}(\mathbf{x} + \mathbf{c}_\alpha \Delta t, t + \Delta t) = \mathbf{f}(\mathbf{x}, t) - (I - \beta) M^{-1} S (\mathbf{m} - \mathbf{m}^{\text{eq}}) + \beta \boldsymbol{\Omega} + (I - \beta) \mathbf{F}$$

となる。 \mathbf{f} は速度分布関数、 \mathbf{m} はモーメント、 M は変換行列、 S は緩和係数行列、 \mathbf{F} は外力である。添字 α は速度分布関数の方向、 eq は平衡状態の速度分布関数を表す。 β は固体体積率に基づく重み係数の行列、 I は単位行列、 $\boldsymbol{\Omega}$ は移動境界の影響を与える追加項であり、 \mathbf{u}_{wall} を壁の速度として

$$\boldsymbol{\Omega}_\alpha = (f_{\alpha'} - f_{\alpha'}^{\text{eq}}(\rho, \mathbf{u})) - (f_\alpha - f_\alpha^{\text{eq}}(\rho, \mathbf{u}_{\text{wall}}))$$

と与える。添字 α' は反対方向の速度分布関数を表す。固体粒子の形状は、符号付きの距離関数で表現する。固体粒子に作用する流体力は、固体粒子に覆われている格子点における運動量変化の総和を計算することで求める。

固体粒子の計算は、粉体計算でよく用いられている個別要素法で行う。固体粒子間の接触力はバネとダンパでモデル化される。非球形の粒子や構造物の接触相互作用の計算には、昨年度の JHPCN 課題 (jh150048-NA26) で開発した粒子を剛体連結して形状を表現する剛体計算手法を導入した。

5.5 固液流動層の大規模シミュレーション

床面から一様に流体 (液体) を流入させて容器内の粉体を流動化する流動層について、粒子-流体間の直接相互作用を格子ボルツマン法と個別要素法を連成させ流動層解析を行う。解析領域は 9.6 mm×256 mm×512mm とし、直径が 1 mm の球形粒子を 56 万個含む。粒子直径に対して格子ボルツマン法の計算格子を 10 格子割り当てる。格子ボルツマン法の計算には 12.6 億 (96×2, 560×5, 120) 個の格子点を用い、TSUBAME 2.5 に搭載されている 128 台の GPU を利用した。初期に計算領域の下半分に粒子をほぼ稠密

に配置し、床面全体に流入境界条件、上面全体に流出境界条件を課し、領域内の固体粒子群を流動化する過程の計算を行った。図 5 は 128 GPU で計算した

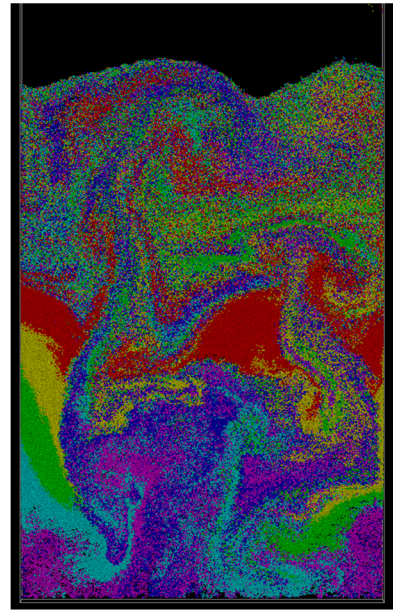


図 5 128 GPU を使い 12.6 億格子に 56 万個の球形粒子を含む流動層の直接計算

領域全体のスナップショットである。粒子の初期位置に応じて層状に色付け (下から紺→紫→青→緑→黄→赤) して可視化している。図 6 の左側は図 5 中の 1 つの GPU が計算を担当する領域の粒子と流れ場を可視化したもの、右図は粒子周りの流れ場を流速ベクトルで可視化したものである。粒子周りの微視的な流れも捉えられていて、高精度な解析を実現できている。

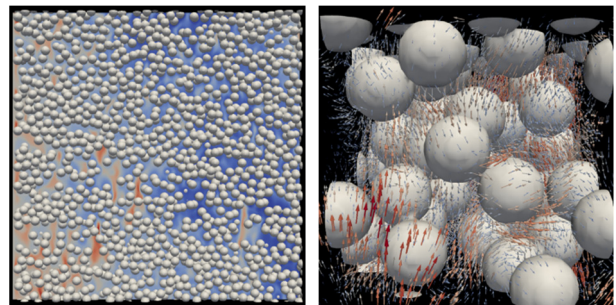


図 6 1 つの GPU が担当する範囲である図 5 の 1/128 の計算領域 (左図) と、その一部分の粒子と流れの場の拡大図 (右図)

5.6 複数GPU実装

格子ボルツマン法と個別要素法の MPI 並列化の概念図を図 7 に示す。格子ボルツマン法の MPI 並列化では、格子点のデータがある程度連続して並んでいる y 軸と z 軸に対して、領域分割を行い、各小領域を 1 台の GPU に割り当てて計算する。1 つの MPI プロセスが 1 台の GPU を担当する Flat-MPI で並列化を行う。各 GPU のメモリ領域は完全に独立しているため、隣接している小領域のデータが必要な場合は、CPU のメモリを介して MPI で通信する。

相互作用の直接計算に基づく連成計算では、固体粒子数は流体計算の格子点数よりも非常に少なく、個別要素法の計算負荷は小さい。そのため、個別要素法を MPI 並列化しなくても全体の計算時間への影響は小さいと考えられる。そこで、図 7 のように、個別要素法に関しては MPI 並列化を行わず、各 GPU がすべての固体粒子に関して冗長に計算する手法を提案する。MPI_Allreduce 関数を用いて全ノード間の総和計算を行い、固体粒子に作用する流体力を求める。

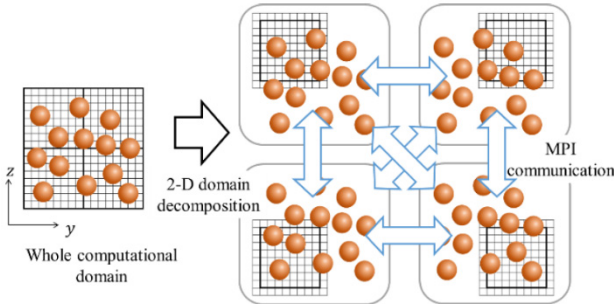


図 7 LBM-DEM 連成計算における複数 GPU 計算のダイアグラム

5.7 舞い落ちるイチョウの葉のシミュレーション

小さな球形粒子を連結して複雑形状の物体を表現することにより、比較的容易に非球形粒子と流体の相互作用を計算することができる。舞い落ちるイチョウの葉のシミュレーションを示す。図 8 のように、

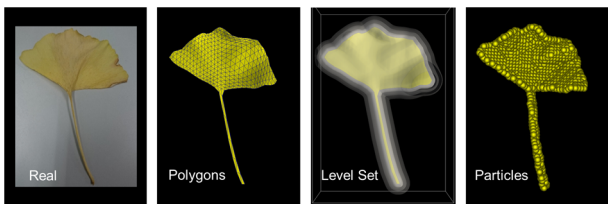


図 8 イチョウの葉の計算モデルの作成過程

実際のイチョウの葉から 3 次元のポリゴンデータを作成し、ポリゴンデータを符号付きのレベルセット関数に変換する。イチョウの葉の運動に合わせてレベルセット関数の座標変換を行い、格子ボルツマン法の移動境界条件における、各計算セルでの固体体



図 9 512 枚のイチョウの葉の舞い落ちる計算

積占有率の計算に用いる。レベルセット関数のゼロ等値面に球形粒子を配置することで、物体形状を表す粒子群データを作成し、他のイチョウの葉との衝突を計算する。TSUBAME2.5 の 128 台の GPU で $1024 \times 1024 \times 2048$ 格子を用い、512 枚のイチョウの葉が舞い落ちる過程を計算した。図 9 に示すように、回転しながら落下するイチョウの葉もあり、特徴的な現象を再現できた。イチョウの葉同士の接触を考慮することで床に堆積する様子を計算することができた。

5.8 固気噴流層シミュレーション

化学工学プラントなどで良く使われる固気混相流の流動層シミュレーションを行った。下部が滑らかに絞られた矩形容器に直径が 0.5 mm の球形粒子を 81,920 個充填し、絞られた部分から空気を流入させ、噴流により粒子群を流動化する。容器の幅は 25 mm、流入口の幅は 5 mm とし、空気の流入速度は 1.5 m/s と設定している。固体粒子の密度は 100 kg/m^3 である。格子幅を 0.05 mm と設定し、固体粒子の直径に対して 10 格子分を割り当てて計算している。LBM の計算には $512 \times 512 \times 1680$ 格子を用い、TSUBAME2.5 の 48 個の GPU を用いて計算を実行した。噴流層では、高レイノルズ数の流れ場となるため、精度の高い Interpolated Bounce-back に基づく移動境界条件と LES 乱流モデルを導入している。図 10 左図は噴流層全体のスナップショットで、全粒子を可視化したものである。初期配置に応じて下にある粒子ほど黒く、上にある粒子ほど白く色付けしている。噴流により初期に下の方にあった黒色の粒子が噴水のように吹き上げられているのが確認できる。図 10 右図は計算領域の中央でスライスした平面における流速のコンター図である。空気が矩形容器の中央付近を流れ、固体粒子を拭き上げていることがわかる。

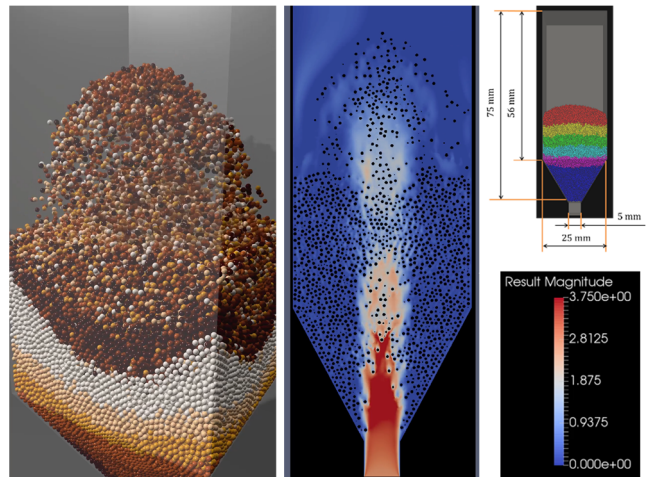


図 10 固気直接相互作用に基づいた噴流シミュレーション

5.9 球形粒子の周りに細分化格子を適合した空力計算

高レイノルズ数の粒子周りの流れの計算の妥当性を検証するために、3 次元球形粒子周りの空力解析を

実施した。計算領域の大きさは $0 \leq x, y \leq 1$ および $0 \leq z \leq 2$ とし、 $(0.5, 0.5, 0.5)$ の位置に球を配置した。球の近傍に高解像度の格子を集中させて球近傍において球の直径を 500 格子で解像し、周辺には 5 レベル分 (32 倍) まで粗い格子を配置した。球近傍の格子解像度で計算領域全体を等間隔直交格子で満たした場合の格子点数は $4097 \times 4097 \times 8093$ (=1358 億) に相当する。本計算の総格子点数は 6317 万であり、適合細分化格子により格子点数は 99.95% 削減されている。境界条件として、 $x = 0, x = 1, y = 0, y = 1, z = 0$ の面に $\rho = 1, \mathbf{u} = (0, 0, U_\infty)$ の流入境界条件を、 $z = 2$ の面に $\partial\rho/\partial z = 0, \partial\mathbf{u}/\partial z = 0$ の流出境界を設定した。球表面には Interpolated bounce-back 境界条件を適用した。計算格子を図 11 に示す。ヒルベルト空間充填曲線に基づいて領域分割を行った。

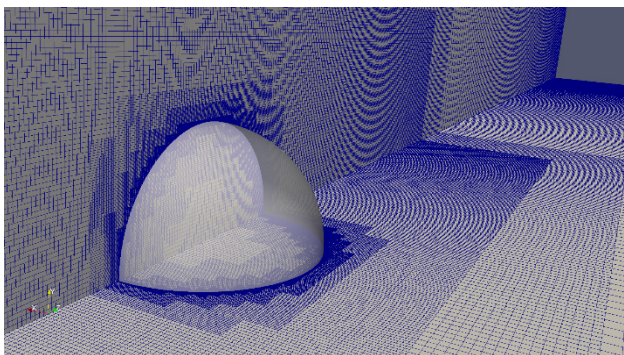


図 11 球形粒子の周りに細かい格子を適合した計算格子

隣接領域の格子点を参照するための袖領域に対して、時間発展計算の際の隣接参照を容易にするために、隣接するリーフ全体の格子をメモリに取る実装とした。MPI 通信では、袖領域リーフのうち隣接参照で用いる格子点を選択して送受信する。具体的には、袖領域リーフ内において、領域分割の切断面の形状に応じて、5.2 節と同じように 26 種類の外殻格子の中から必要な格子を C++テンプレートを用いたカーネル生成で選択する。さらに、格子ボルツマン法においては細分化レベルの低い (粗い) 格子は時間ステップ幅が大きい、データが更新されたリーフのみを選択して通信を行い、過去の時間ステップで

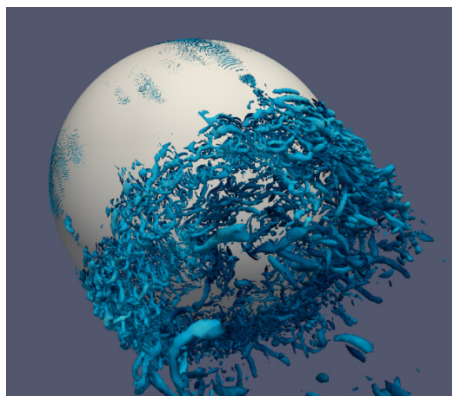


図 12 レイノルズ数が 1×10^5 の空力計算における速度勾配テンソルの第二不変量の等値面

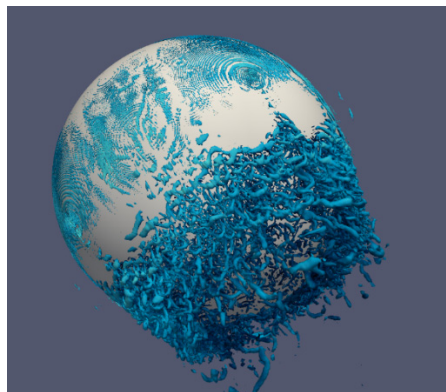


図 13 レイノルズ数が 2×10^5 の空力計算における速度勾配テンソルの第二不変量の等値面

既に送受信したデータを重複して通信しないようにしている。

レイノルズ数が 1×10^5 および 2×10^5 における速度勾配テンソルの第二不変量を可視化した結果を図 12 および図 13 に示す。いずれのレイノルズ数においても非常に細かい渦が球の後方に多数発生している。レイノルズ数 2×10^5 では渦の発生する位置がレイノルズ数 1×10^5 よりも後方に移動し、急激に抗力係数が低下するドラッグ・クライシスと呼ばれる現象を再現できた。

6. 今年度の進捗状況と今後の展望

均一格子を用いての格子ボルツマン法による非球形固体粒子との直接相互作用計算に基づいた大規模混相流シミュレーションは達成することができた。この計算では、固体粒子は格子ボルツマン法による流体計算に対して相対的に計算負荷が低いため負荷バランスは流体計算だけを考えて行っているが、今後、粒子数が増えてきた場合に粒子計算の負荷バランスとメモリ分散との調和を考慮する必要がある。

格子ボルツマンに基づいた流体計算の適合細分化格子による計算は複数 GPU での実行が行える段階に到達した。空間重点曲線に基づいた領域分割を行っているが、分割された領域形状が複雑になり、複雑な通信相手に対して細かいデータを送る必要があり、D3Q27 モデルでは 26 方向に応じて通信する内容が異なる点も実装を難しくしている。単純な形状の領域分割とは違い、大きな通信オーバーヘッドが生じることが明らかになった。領域間データ通信に対しても C++テンプレートによるカーネル生成を行い、通信時間を大幅に短縮することができた。動的領域分割は、粒子計算と流体計算の 2 種類の計算負荷のバランスと領域間通信の最小化を満足する最適化問題であることが明らかになり、今後の研究課題が見出された。また、格子ボルツマン法の格子の生成・消滅は分布関数の生成・消滅であるため、非物理的な振動が発生するなど大きな課題を含み、数値計算手法の一分野となりつつある。

今年度の進捗状況としては、ほぼ当初の研究計画通りに研究を実施することができた。より実用問題

における混相流計算に適合細分化格子法を適用することが残されている。

申請時点では、本課題実施期間中に TSUBAME3.0 が稼働開始し、新しい Pascal コアの GPU や HBM2 による高速メモリ、NV-Link 等による高速な GPU 通信を利用することが期待されていたが、稼働開始が遅れたためこれらの研究計画を実施することはできなくなった。

7. 研究成果リスト

(1) 学術論文

- [1-1] Naoyuki Onodera, Takayuki Aoki, Kensuke Yokoi: A fully conservative high-order upwind multi-moment method using moments in both upwind and downwind cells, International Journal for Numerical Methods in Fluids, Volume 82, P449–538 (2016)
- [1-2] 渡辺勢也, 青木尊之, 都築怜理: GPU を用いた個別要素法による粉体シミュレーションに対するメモリ使用量を抑えた高速化手法, 日本計算工学会論文集, Vol.2016, 2016 年 5 月 27 日
- [1-3] 長谷川雄太, 青木尊之: Octree 型 AMR を導入した格子ボルツマン法の C++ テンプレートを用いたカーネル生成による GPU 計算の高速化, 情報処理学会論文誌 コンピューティングシステム(ACS), Vol.9, 2016 年 7 月 14 日
- [1-4] 青木尊之: GPU を用いた超並列高速計算入門-IV-GPU スパコンによる大規模物理シミュレーション, システム制御情報学会誌, Vol.60, 2016 年 8 月 15 日 (解説記事)
- [1-5] 青木尊之: GPU スパコンによる大規模 LBM 計算, 伝熱, Vol.55, No. 233, P22-28, ISSN:1344-8692, 2016 年 10 月 1 日 (解説記事)
- [1-6] 青木尊之: GPU による粉体・混相流の大規模シミュレーション, 化学工学, Vol.81, No.5, 2017, pp.232-235, ISSN 0375-9253, 2017 年 5 月 5 日 (解説記事)

(3) 国際会議発表

- [3-1] M.Gestrich, S.Adami, T.Aoki, T.Indinger: Parallel Smoothed Particle Hydrodynamics on a GPU Supercomputer, Parallel CFD 2016, Kobe, May 10, 2016
- [3-2] S.Tsuzuki, T.Aoki: Large-Scale Particle-Based Simulations Using Dynamic Load Balance with Space Filling Curves on a GPU Supercomputer, Parallel CFD 2016, Kobe, May 10, 2016
- [3-3] S.Watanabe, T.Aoki, Y.Hasegawa: Large-Scale Simulations for Fluid-particle System Using Multiple GPUs, Parallel CFD 2016, Kobe, May 10, 2016
- [3-4] S.Watanabe, T.Aoki, Y.Hasegawa: Large-scale Simulations for Fluidization using Coupled Lattice Boltzmann Method and Discrete Element Method on a GPU Supercomputer, ECCOMAS Congress

2016, Greece, Jun 7, 2016

- [3-5] Yuta Hasegawa, Takayuki Aoki, Hiroichi Kobayashi: Aerodynamics Study using Locally Mesh-refined Lattice Boltzmann Method for a GPU Computation, ECCOMAS Congress 2016, Greece, Jun 7, 2016
- [3-6] Satori Tsuzuki, Takayuki Aoki: Large-Scale Particle Simulations for Debris Flows Using Dynamic Load Balance with Space Filling Curves on a GPU-RICH Supercomputer, ECCOMAS Congress 2016, Greece, Jun 8, 2016
- [3-7] Takayuki Aoki: Large-scale Complex Flow Simulations using Particle and Mesh Methods on a GPU supercomputer, WCCM XII & APCOM VI 2016, Korea, July 25, 2016 **【Semi-Plenary 講演】**
- [3-8] Takayuki Aoki: CFD Applications Using Adaptive Mesh and Space-Filling Curves on a GPU Supercomputer, 2017 SIAM Conference on Computational Science and Engineering, Atlanta, USA, February 27, 2017

(4) 国内会議発表

- [4-1] 渡辺勢也, 青木尊之, 長谷川雄太: 非球形固体粒子と流体の直接相互作用による混相流の大規模シミュレーション, 粉体工学会 2016 年度春季研究発表会, 京都, 2016 年 5 月 17 日
- [4-2] 坂根慎治, 高木知弘, 大野宗一, 澁田靖, 下川辺隆史, 青木尊之: Phase-field 法と格子ボルツマン法による柱状デンドライトの透過率評価法の構築, 第 21 回計算工学講演会, 新潟, 2016 年 5 月 31 日
- [4-3] 森口周二, 太田勇真, 高瀬慎介, 寺田賢二郎, 阿部慶太, 青木尊之: 個別要素法による大規模土砂流動実験の再現解析, 第 21 回計算工学講演会, 新潟, 2016 年 5 月 31 日
- [4-4] 渡辺勢也, 青木尊之, 長谷川雄太: 舞い落ちる多数のイチョウの葉のシミュレーション, 第 21 回計算工学講演会, 新潟, 2016 年 5 月 31 日
- [4-5] 長谷川雄太, 青木尊之: 適合格子細分化法を導入した格子ボルツマン法の複数 GPU 計算, 第 21 回計算工学講演会, 新潟, 2016 年 6 月 1 日
- [4-6] Anna Brown, Takashi Shimokawabe, Takayuki Aoki: A GPU implementation for high performance stencil calculations on an adaptively refined mesh, 第 21 回計算工学講演会, 新潟, 2016 年 6 月 2 日
- [4-7] 長谷川雄太, 青木尊之, 小林宏充: 適合格子細分化法を導入した格子ボルツマン法の GPU 計算による自転車競技の空力解析, 第 29 回計算力学講演会, 名古屋, 2016 年 9 月 22 日
- [4-8] 渡辺勢也, 青木尊之, 長谷川雄太: LBM-DEM の直接相互作用計算による流動層の大規模シミュレーション, 第 29 回計算力学講演会, 名古屋, 2016 年 9 月 23 日

- [4-9] 坂根慎治, 高木知弘, 大野宗一, 澁田靖, 下川辺隆史, 青木尊之: デンドライト沈降現象の phase-field 格子ボルツマンシミュレーション, 第 29 回計算力学講演会, 名古屋, 2016 年 9 月 23 日
- [4-10] Michael Gestrich, Takayuki Aoki, Stefan Adami, T Thomas Indinger: A large-scale SPH Two-Phase Flow Simulation using Multiple GPUs, 第 29 回計算力学講演会, 名古屋, 2016 年 9 月 23 日
- [4-11] 青木尊之: GPU スパコンによる大規模粒子法・格子法シミュレーション, RIMS 研究集会 現象解明に向けた数値解析学の展開 II, 京都, 2016 年 10 月 19 日 【招待講演】
- [4-12] 岩崎颯, 青木尊之, 渡辺勢也, 長谷川雄太: 格子ボルツマン法による魚のフリー・スイミングのシミュレーション, 第 30 回数値流体力学シンポジウム (CFD2016), 東京, タワーホール船堀, 2016 年 12 月 15 日
- [4-13] Michael Lahnert, Takayuki Aoki, Miriam Mehl: Minimally-Invasive Integration of P4est in Espresso for Adaptive Lattice-Boltzman, CFD2016, Tokyo, December 14, 2016
- [4-14] 渡辺勢也, 青木尊之, 長谷川雄太: 格子ボルツマン法による舞い落ちるイチヨウの葉の大規模流体-構造連成シミュレーション, 第 30 回数値流体力学シンポジウム (CFD2016), 東京, タワーホール船堀, 2016 年 12 月 12 日
- [4-15] 青木尊之: LBM の強み・弱みと GPU スパコンによる混相流シミュレーション, 第 26 回 LBM 研究会, 大阪, 大阪府立大学, 2016 年 12 月 9 日
- [4-16] 渡辺勢也, 青木尊之, 長谷川雄太: 流体-固体粒子間相互作用の直接計算による大規模流動化シミュレーション, 第 22 回流動化・粒子プロセスシンポジウム, 東京, 東京大学生産技術研究所, 2016 年 12 月 8 日

(5) 受賞学術賞

- [5-1] 渡辺勢也, 青木尊之, 長谷川雄太: グラフィックスアワード特別賞, 第 21 回計算工学講演会, 新潟, 2016 年 6 月 1 日
- [5-2] 松下真太郎, 青木尊之: ベスト CFD グラフィックスアワード静止画部門第 2 位, 第 30 回数値流体力学シンポジウム (CFD2016), 東京, タワーホール船堀, 2016 年 12 月 13 日
- [5-3] 渡辺勢也: 日本機械学会・第 29 回計算力学講演会・優秀講演賞, 2017 年 3 月 3 日
- [5-4] 渡辺勢也: Best presentation award, 日中韓・熱流体に関するシンポジウム, 2017 年 3 月 10 日