



アドバンス・シミュレーション・ニュース

No.4 (2023年9月21日発行)

第4回アドバンス・シミュレーション・セミナー2023 開催報告

東京工業大学 学術国際情報センター 教授 青木 尊之 様

「GPU スパコンによる混相流シミュレーション・流体構造連成のシミュレーション」

アドバンス・シミュレーション・ニュースは、アドバンスソフト株式会社が2021年度から、我が国における計算科学技術の振興を目的として、幅広い分野の最先端研究を対象として開催している「アドバンス・シミュレーション・セミナー」の開催報告と今後の開催予定をご案内するサービスです。

本セミナーで紹介される多種多様な最先端研究をきっかけに、企業の研究開発を担う技術者の方が新たな視点を持つこと、最先端研究を産業に応用する起点となること、長期的には計算科学シミュレーション分野の裾野が広がること等を期待しています。

開催概要

- 日時：2023年7月21日（金）14:00～15:30
- 開催方法：オンラインセミナー（Zoomにて開催）
- 主催：アドバンスソフト株式会社 出版事業部
- 講演概要

混相流は数値解析が難しい流れとしてよく知られている。ものづくり分野では複雑形状の物体が激しく移動するため、気体と液体の密度の違いから気液界面がせん断流れとなる。界面での密度と運動量プロファイルを整合させ、運動量が保存するように解く必要がある。さらに、8分木データ構造



の適合細分化格子（AMR）法を用い、気液界面と物体近傍に高解像度格子を効率的に配置している。また、流体構造問題もAMR法とCumulant型格子ボルツマン法を用いて解いている。これらをGPUスパコンに実装するために、空間重点曲線を用いた動的負荷分散を行っている。

本講演では、多数の動画とともにさまざまな応用事例を紹介する。

ご講演内容

本稿は、2023年7月21日に開催した「アドバンス・シミュレーション・セミナー2023」において、青木 尊之 様にご講演いただいた内容をアドバンスソフトがまとめたものです。また、最後の章には、アドバンスソフトの感想を付記しました。

1. 講演内容

1.1. はじめに

我々の研究室では、混相流のシミュレーションを高精度かつ高速に大規模で計算するための研究開発を進めている。また、移動物体を含めた流体構造連成や、最近話題になった野球ボールの空力解析の研究にも取り組んでいる。計算手法は、非圧縮性流体に対

して弱圧縮性解法を適用している。ソルバーは2種類あり、NS方程式のソルバーと格子ボルツマン法のソルバーであり、メッシュを動的に割り当てるAMR法も採用している。また、GPUで計算するためにCUDAでプログラミングしている点も我々の大きな特徴である。

1.2. 気液二相流のシミュレーション手法

代表的な気液二相流のベンチマーク問題であるダムブレイク問題の計算では、気体と液体が激しく入り混じることで気泡が出来たり、液滴が飛んだりする。我々も他の多くの研究と同じく、1流体のナビエ・ストークス (NS) 方程式に加えて、気液界面の識別関数を用いている。しかし、非圧縮性流体計算は大規模になるとメッシュ数だけが問題でなく、流路が複雑な場合や移動物体があると圧力のポアソン方程式 (線形ソルバー) の収束性が非常に悪くなってしまふ。そこで、陽解法の弱圧縮性流体計算手法を開発した。圧縮性でのNS方程式を解き、ポアソン方程式の代わりに等温過程あるいは低マッハ数近似から導出される圧力の時間発展方程式を解く。これは、十分に非圧縮性流体と見なせる範囲であれば僅かな圧縮は許容するという手法である。

気液界面の識別手法は、THINC/WLIC法やPLIC-VOF法、界面を自律的に記述できる保存型Allen-Cahn方程式に基づいたPhase Field法を使用し、その時々の問題に応じて使い分けている。また、運動量を保存する計算手法を導入していて、気液界面で密度と運動量の空間プロファイルを整合させる必要がある。壁が遠方に設置されているダムブレイク問題では、先端で数値的なKelvin-Helmholtz不安定を起こすことなく計算できた。また、民間企業との共同研究で、矩形流路内に溜まった凝縮水に対して、空気を流入させることで排出させる問題では、保存型で解くと流路内の水が残り実験と近い結果になる。気体と液体の密度が大きく異なるため、気液界面ではしばしばせん断流れになり、運動量保存型で気液二相流では解くことが必要となる例も多い。

1.3. より高解像度・高効率計算を目指して

弱圧縮性計算手法のソルバーを開発したことで大規模計算が可能になったが、計算を高速に行うために、演算性能が高いGPUコンピューティングにも取り組んでいる。CFDでは、演算性能が高いだけではダメで、メモリ帯域が広いことも大切である。BF値=メモリ帯域/演算性能でみるとGPUのBF値は低くピーク性能に対して実行性能が出し難いと思われるかもしれないが、GPUは演算性能が高いので、実際の計算速度はCPUよりも圧倒的に速くなる。GPUの特徴は1チップ内に非常に多くの演算コアがあり、2024年4月に稼働開始する東京工業大学 学術国際情報センターのTSUBAME4.0にはNVIDIA H100が960個搭載される。1つのH100に約18000

個のコアがあり、1GPUを使う場合でも並列計算を意識する必要がある。

いくら速いプロセッサを使っても、均一格子で計算すると実問題では総格子数が非現実的になり殆ど役に立たない。そこで、必要などころに高解像度 (細かい) 格子を動的に割り当てるAMR法を採用している。GPUの場合には、自分でメモリプールを用意し、細分化と粗大化に対してシステム側に頻繁な動的メモリ確保をさせない必要がある。また、大規模計算では複数GPUや複数ノードを使うことが必須であり、計算負荷をバランスするように動的に計算領域を分割する必要がある。我々はモートン曲線やヒルベルト曲線、ペアノ曲線などといった空間充填曲線を用いている。その分割方法は、端から計算格子を数えながらメッシュを一筆書きでなめ、均等な格子数になるように空間充填曲線を分割する手法である。AMR法の場合はどうしても領域間の通信のオーバーヘッドが大きくなるが、陽解法なので隣接領域との通信が必要な格子と内部の格子を分けて解き、内部の格子を計算している時間に領域間通信を行う通信と計算のオーバーラップ手法で通信をできる限り隠蔽している。

もう1つ大きな課題として、移動境界をどう扱うかという問題がある。我々はFAVOR法をベースにDual Contouring法という手法を使って格子の中の物体の占有率を精度よく求めている。さらに物体が移動することにより流体率が小さい格子が発生するが、流体の体積が保存されるように隣接格子と合体させるセルマージング法を用いている。これらの手法は計算の安定性にも大きく貢献している。

次は表面張力が重要になる流れに対する計算例である。液膜が非常に薄く100マイクロン以下になるシャボン玉の計算では、AMR法を使うと液膜の近傍だけを細かい格子で計算することができる。2つの球の間に液架橋があって、その状態で片方の球を落下させるシミュレーションでは、液架橋が変化の様子が実験結果と非常によく一致している。この応用として、水分を含んだ粉体の容器に振動を加えて液架橋ネットワークが変化する計算ができたり、流動特性の評価で使われる一軸せん断試験の計算ができる。

さらに、接触角や表面張力が重要となる事例として、アメンボの水面走行を計算した。AMR法で水と接するアメンボの脚の近傍に高解像格子を割り当てることで非常に高効率に計算することができる。2本の中脚を手漕ぎボートのオールのように使って泳ぐが、推進のメカニズムは抗力の反作用ではなく、水面の歪みによる毛細管力であることが分かった。

1.4. 格子ボルツマン法による流体・移動物体・流体構造連成のシミュレーション

格子ボルツマン法は、粒子の速度分布関数を格子上で時間発展させる弱圧縮性流体計算手法である。従来はSRT (Single Relaxation Time)と言われる衝突

項の計算が行われていたが、最近の研究の発展により Cumulant 衝突項を用いることにより、計算精度と安定性が飛躍的に向上している。我々も Cumulant 衝突項を用いた格子ボルツマン法を用いている。一方、格子ボルツマン法は流体の密度変化の計算を得意としないため、気液二相流に対しては、気相の流れを解かず自由界面を含む液相の流れのみを計算する。また、格子ボルツマン法のメリットとして、2次精度の Interpolated Bounce Back 法を用いることができ、速度ベクトルが27方向あるため、任意形状の物体の境界条件を精度よく満足することができる。

事例として、水槽実験との比較で16m水槽内にボールを8本置いたケースと18本置いたケースで、流木を模擬した木片を流した実験とシミュレーションの比較を行った。ボールが8本のときは、木片が全てボールをすり抜けて下流側に流れてしまうが、18本のボールでは約半数が補足されることが分かり、補足された木片の角度も水槽実験と非常によく一致している。別の事例としては、空力によるアクリルの薄板の変形の実験との比較も行っている。慣性力と弾性力の比であるコーシー数を変えてシミュレーションすると、流速が速くなるのに従って変形モードが遷移する実験結果を再現することができている。

1.5. 野球ボールの空力解析と変化球の軌道シミュレーション

球が受ける抗力は、レイノルズ数が $2 \times 10^5 \sim 5 \times 10^5$ の辺りでドラッグクライシスと言われる抗力係数が急激に減少するところがあることはよく知られている。抗力が急激に減少するのは、剥離点の位置が下流側に移動するため、乱流境界層になるためである。野球ボールの軌道の変化を解析するために、メジャーリーグの公式試合球の実物を3Dスキャンし、AMR法でボールの表面近傍と後流に高解像度格子を配置し、総格子数が約10億の空力解析を行った。一番細かい格子幅は約50マイクロンで境界層を解像している。まず、バックスピンのツーシームとフォーシームを比較すると、球速と回転数は同じでも縫い目が違うだけでボールに働く揚力が全く違うことが分かる。高さ0.9mmの縫い目も解像する高解像度の非定常シミュレーションにより、ツーシームの場合には1回転の中で縫い目の位置がある角度の範囲で負のマグナス力が働いていることが分かった。さらにメジャーリーグの大谷翔平投手のスプリットをツーシームのバックスピンだとしてシミュレーションしてみたが、落差を再現できない。そこで改めてボールの回転をよく調べてみると、バックスピンではなくジャイロ回転していることが分かり、ジャイロ回転により横に曲がる力と落ちる力が周期的に変化して相殺することが分かった。さらに富岳を用いて、スライパーの計算も行い、バッター方向の回転軸が50度～60度傾くと余り落ちずにスライドするスライパーの特徴を再現することができた。縫い目の効

果によりマグナス効果とは異なるメカニズムでボールに揚力がかかることを明らかにした。

2. 聴講における感想（アドバンスソフト）

青木先生には、様々な混相流、移動物体、流体構造連成のシミュレーション事例について魅力的な動画を多数用いてご講演いただいた。野球ボールの空力解析など身近な事例もあり、流体解析が専門でない方にも興味を持っていただける内容だったと思う。大規模な非圧縮性流体のシミュレーションを高速化するための工夫（弱圧縮性流体計算手法の導入による陽解法化）やGPUで計算するためのメモリ管理の方法、様々な数値的（非物理的）な不安定性の問題への対処など専門的な話も伺えることができて大変勉強になった。超高並列の流体シミュレーションでは太陽の対流層の計算においても、連続の式を工夫して音速を抑制する手法があり、他の分野（マントル対流）にも適用されており、個人的には陰解法から陽解法への流れを感じている。野球ボールの空力解析については、On GPUで高速に計算できるようになれば、例えば、F1で空力解析を用いてマシンを開発するように大リーグの各チームが野球ボールの空力解析から新しい変化球を生み出すような時代も来るかもしれないと思った。

【ご経歴】

1983年 東京工業大学・理学部・応用物理学卒業。
2001年から同大学・学術国際情報センター教授。
2011年 ACM ゴードンベル賞、2012年 文部科学大臣表彰、2022年 東京都功労者表彰。

参加者

申込者は173名、当日の参加者は125名であった。参加者の内訳は、企業が98名、公的機関が16名、教育機関が11名であった。主な業種は、「材料/素材」、「自動車/自動車部品」、「機械/機械部品」、「電機/精密機器/IT機器」であった。

公開資料

ご講演のYouTube動画は、右のQRコードからご覧いただくことができます。



ご講演の資料は、右のQRコードの「ダウンロードする」からログイン後、ダウンロードすることができます。ログインアカウントをお持ちでない方は、「ダウンロードする」から新規メンバー登録後、ログインしてダウンロードすることができます。



今後の開催予定

アドバンス・シミュレーション・セミナー

2023 の開催予定

<https://www.advancesoft.jp/seminar/11637/>

No	日程 受付状況	内容	テーマ
第1回	4月21日(金) 終了	「防災・インフラ分野でのシミュレーションへの期待と課題」 国立研究開発法人 海洋研究開発機構 付加価値情報創生部門 部門長 堀 宗朗 様	防災・インフラ
第2回	5月19日(金) 終了	「半導体デバイスの歴史と展望」 IEEE LIFE FELLOW 広島大学 名誉教授 角南 英夫 様	半導体
第3回	6月22日(木) 終了	特別セミナー 「複雑流動現象の数値シミュレーション」 大阪大学 基礎工学研究科 機能創成専攻 教授 後藤 晋 様 ----- 「機械学習による流体解析の拡張」 University of California, Los Angeles (UCLA) 教授 平 邦彦 様	複雑流動・機械学習
第4回	7月21日(金) 終了	「GPU スパコンによる混相流シミュレーション・流体構造 連成のシミュレーション」 東京工業大学 学術国際情報センター 教授 青木 尊之 様	流体・HPC
第5回	8月3日(木) 終了	「原子力安全に必要となる計算科学技術への期待」 東京大学大学院 工学系研究科 原子力国際専攻 教授 笠原 直人 様	原子力安全
第6回	8月28日(月) 終了	「サイバー空間の脆弱性と AI：エコーチェンバー、ディープ フェイク、ChatGPT の社会的影響」 東京工業大学 環境・社会理工学院 イノベーション科学系 准教授 笹原 和俊 様	生成 AI
第7回	9月14日(木) 終了	「量子コンピュータと量子アニーリングマシン：基礎から最 先端まで」 国立研究開発法人 産業技術総合研究所 新原理コンピューティング研究センター 副研究センター長 川畑 史郎 様	量子コンピュータ
第8回	10月6日(金) 受付中 	「爆轟から見える CAE の方向性」 青山学院大学 理工学部 名誉教授 林 光一 様	爆轟
第9回	11月10日(金) 準備中	「都市のデジタルツイン」 国立研究開発法人 産業技術総合研究所 デジタルアーキテクチャ研究センター 総括研究主幹 中村 良介 様	デジタルツイン
第10回	12月15日(金) 準備中	「計算物質科学による 2.5 次元物質科学研究：原子層物質複 合構造体と外場」 筑波大学 数理物質系 教授 岡田 晋 様	ナノ

【お問い合わせ先】

アドバンスソフト株式会社 出版事業部
〒101-0062 東京都千代田区神田駿河台四丁目3番地 新お茶の水ビルディング 17 階西
TEL : 03-6826-3971 FAX : 03-5283-6580 E-mail : office@advancesoft.jp
<https://www.advancesoft.jp/>

当社では随時人材の募集も行っております。

<https://www.advancesoft.jp/recruit/>

Advance Soft


