

人工的な仮定を極力排除した物理モデルに基づく 非熱流体シミュレーションコードの開発

大木慎一^{*1}、菊池俊彦^{*1}、松岡浩^{*2}、菊池範子^{*3}、板倉憲一^{*4}、廣川雄一^{*4}、齊藤展^{*1}

*1 株式会社テラバイト、 *2 国立大学法人東北大学(委嘱)
*3 株式会社サイエンス・サービス、 *4 国立研究開発法人海洋研究開発機構

1. 概要

近年、スパコン計算能力の飛躍的な向上により、流体シミュレーションの解像度が急速に向上したが、それでも解像できない微細な流れが存在し、この不規則変動を扱う物理モデルが複雑な乱流を正確に記述しきれていない。現時点では、「①極力細かな格子による高解像度な直接計算」と「②人工的な仮定を極力排除した物理モデル」の併用で精度向上を目指す必要がある。本課題では、“多速さ格子ガス法”を用いてこの両者を一体的に実現し、将来的には、各種流動設計の信頼性をあげ、CO₂の排出低減など環境負荷の低減に直接資する“ものづくりコード”の実現を目指した。

具体的には、SX-ACEの512ノード(2048コア)を用いれば、1000億格子点解像度で非熱流体過渡変化(Re数≒1200)の全過程を約2週間で計算できるという見積もりを得た。また、取り扱える流体事象の範囲を広げるため、混ざり合わない2種類の流体シミュレーションや高Re数を模擬できる粘性制御法について考察した。

2. 成果

2. 1 性能試験コードによる1000億格子点規模の流体シミュレーション

面心超立方体(FCHC)54速度格子ガス法(3速さ格子ガス法)を用いることにより、主記憶容量の大きさとしては、ES2の64ノード(512CPU, 主記憶合計約8TB)でも、1000億格子点規模の時間発展計算を進めることができることを確認した。

- ・計算時間：時刻ステップ数384回目で28765秒≒8時間
- ・性能：ベクトル長：255.927, ベクトル化率：98.514

また、比較計算として、東北大学サイバーサイエンスセンターのSX-ACEの256ノード(256CPU=1024コア)を用い、500億格子点規模(7680×2560×2560)の計算を107520時刻ステップ実行したところ8.65日(500億格子点情報の1回更新に7秒)を要した。他方、典型的な過渡変化流体挙動である「突然動き出した流体中に置かれた円柱後流における渦の発生」の全過程を1000億格子点規模(12288×4096×2048)でシミュレーションするには、16万時刻ステップ程度の時間発展計算が必要だという知見を得ていたため、ES3で利用できる典型的な計算機規模としてSX-ACEの512ノード(512CPU=2048コア)を仮定すれば、その計算時間は7秒×16万≒13日と見積もることができる。

2. 2 汎用化と機能追加及びチューニング

性能評価コードは解析データがハードコーディングされた研究用コードであるため、地球シミュレータ上で一般利用可能な汎用化コードとするために解析データを外部データ化した。

更に、これらの解析データの設定を行うためのGUIを用意した。本手法においては、モデル作成時にメッシュ作成等のような作業は不要であるため、GUIはシンプルであり、形状のSTLデータが用意されていればデータ作成から計算実行までの作業を数分で行うことが可能である。

なお、汎用化による性能劣化を最小限とするためのチューニングも行った(表 1、2)。疑似乱数関数使用部のチューニングが困難であったが地球情報基盤センター情報システム部 HPC 応用グループ様のご指導、ご助言、ご協力により解決することができた。

表 1. ES2 でのチューニングの効果

コード	計算時間[秒]	計算時間増加	備考
性能試験コード	14376	—	
汎用化コード (改善前)	23862	66%	
汎用化コード (改善後)	19563	36%	改善前に比べて 30%改善

表 2. ES3 でのチューニングの効果

計算機	コア数	計算時間[秒]	ベクトル長	ベクトル演算率
ES2 (SX-9) *1)	32(=4 ノード×8 コア)	4275.4	253.1	97.1%
ES3 (SX-ACE) *2)	32(=8 ノード×4 コア)	1088.2	238.6	98.7%

[注] *1) フラット MPI による計算 (MPI+OpenMP ハイブリッドよりもフラット MPI のほうが計算時間が若干短い)

*2) MPI+OpenMP ハイブリッドによる計算 (フラット MPI より 45%時間短縮)

3. 試計算

基本機能確認のための試計算として円柱周りの流動計算を次の条件で行った(結果は表 1)。

疎視化後メッシュ分割数：(64,28,12)、3 次元格子：(512,224,96)=約 1100 万

出力ステップ：20 (512 タイムステップ毎)

また、混ざり合わない 2 種類の流体の場合の計算も行った(図 1)。なお、本ケースにおいては 2 種類の粒子のうち片方の粒子 (図中では透明表示) にのみ重力が作用するものとしている。

本プロジェクトにおいては、ここで示したように定性的に妥当な結果を得ることができたが、定量的な確認は今後の課題として残った。

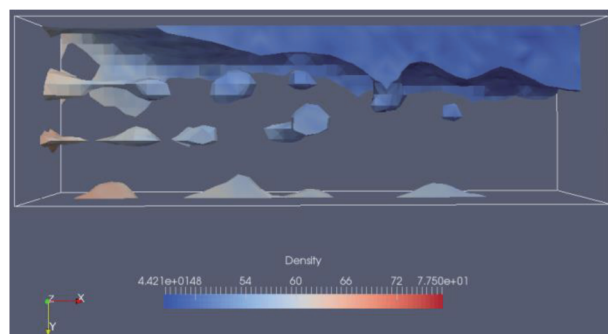


図 1. 混ざり合わない 2 種類の流体の試計算結果 (重力あり)
(透明表示流体に重力が作用している)

4. 今後の取り組み

地球シミュレータ利用により 1000 億格子点規模の大規模問題を計算できることが確認できた。しかし、実用的な流体シミュレーションコードには、幅広いレイノルズ数の流体挙動を模擬できることが望まれる。特に、高いレイノルズ数の事象を模擬するには、0 に近い正の粘性を実現する必要があるが、格子ガス法の場合、実現できる粘性は、格子点間隔と仮想粒子の衝突規則で決まるという制限がある。今回、1000 億格子点規模という十分細かい格子点間隔を実現したが、通常の衝突規則を用いる限り、得られるレイノルズ数は、数 1000 程度までである。このため、本プロジェクトでは、“負の粘性”を発現できる特別な衝突規則を考案し、これを正の粘性を発現する通常の衝突規則と確率的に組み合わせることを目指していた。試行錯誤の末、“負の粘性”を発現させる基本的な衝突規則を見つけることはできたが、「時間発展計算の 1 格子点 1 ビット幅化」という特徴を崩さずにこれを実現するコード化に多大な時間を要してしまい、本プロジェクトの期間内では、広範囲の粘性制御の実現までには至らなかった。今後とも、この方向で開発を継続していきたい。

最後になりましたが、「地球シミュレータ産業戦略利用プログラム」により大規模問題に対する機能確認を行う機会をいただきましたことに、深く感謝申し上げます。