

研究種目：基盤研究（B）

研究期間：2007～2009

課題番号：19360043

研究課題名（和文） 多モーメント手法による多目的CFDコアの開発

研究課題名（英文） Development of Multi-Purpose CFD Core using Multi-Moment Scheme

研究代表者

青木 尊之（AOKI TAKAYUKI）

東京工業大学・学術国際情報センター・教授

研究者番号：00184036

研究成果の概要（和文）：

次世代の流体解析(CFD)において、流体方程式を格子点上の値、線積分平均値、面積分、体積積分平均値を従属変数として解く多モーメント手法が高精度かつ安定な計算を行うために有効である。直交格子に適合細分化格子法を導入することで解像度制御を行い、保存形 IDO 法による圧縮性流体計算、非圧縮性流体計算、乱流計算、多相流計算などの様々な流体問題に適用できる高性能な計算コアを開発する。

研究成果の概要（英文）：

For the next-generation CFD, it is essential to use multi-moment scheme to solve fluid dynamics equations accurately and stably. An adaptive mesh refinement method is introduced to improve efficiently the mesh resolution for a regular grid and computational CFD cores using the conservative IDO scheme have been developed for such various flows as compressible and incompressible fluids, turbulent flows, multi-phase flows.

交付決定額

(金額単位：円)

| | 直接経費 | 間接経費 | 合計 |
|--------|------------|-----------|------------|
| 2007年度 | 5,200,000 | 1,560,000 | 6,760,000 |
| 2008年度 | 4,400,000 | 1,320,000 | 5,720,000 |
| 2009年度 | 4,400,000 | 1,320,000 | 5,720,000 |
| 年度 | | | |
| 年度 | | | |
| 総計 | 14,000,000 | 4,200,000 | 18,200,000 |

研究分野：数値流体力学、大規模計算力学シミュレーション

科研費の分科・細目：応用物理学・工学基礎

キーワード：多モーメント法、数値流体力学、保存形 IDO 法、AMR 法、MG 法、乱流計算

1. 研究開始当初の背景

流体の数値解析はさまざまな分野で必要性を増してきていて、効率よく高精度に計算することが重要になってきている。単一目的であるならば用途に特化した計算格子と計

算手法を用いることによりある程度は可能であるが、より複雑な形状や構造計算との連成問題などでは、新しい数値計算手法が求められている。従来のように計算格子を作成するために長時間を要することを避け、直交格

子上で高精度かつ安定な数値計算手法を開発する必要がある。

2. 研究の目的

これまで開発してきた局所補間微分オペレータ(IDO)法およびCIP法は従来の手法と異なり、従属変数の値のみを求めるのではなく空間勾配も基礎方程式から独立に計算し、それらで構成される高次の補間式を用いて高精度計算を行うという微係数型の多モーメント数値流体計算手法である。微係数型の多モーメント法では保存形のスキームが構築できず、圧縮性流体では人工粘性を調節しなければならない等の問題がつきまとっていた。また、長時間積分においても全質量・全エネルギーの保存性が心配になる。そこで、従属変数に微係数を用いる代わりに区間積分値を用いる積分値型の多モーメント法の開発を始めた。当初、風上側だけを参照する場合の補間関数が2次多項式になるために計算精度の低下が懸念されたが、精度検証の結果は微係数型の多モーメント手法とグラフ上で判断できないほど一致したため、保存形スキームの構築できる積分値型の多モーメント手法を新しいCFDコードのコアを構築することを目的とする。3次元計算の場合、物理量の値、線積分値、面積積分値、体積積分値が交互に配置され、計算の安定性と速度-圧力のカップリングも非常に良好となる。

複雑形状に対する計算格子の生成は実用上も大きな問題となっている。空間的に高い解像度が必要な領域を再帰的に細分化する適合細分化格子を保存形の多モーメントスキームに適用させ、計算効率の飛躍的な向上を図る。

3. 研究の方法

PCクラスターを組み上げ、様々な小規模計算を実行し、デバックなどを効率的に行う。大規模問題に対しては、東京工業大学・学術国際情報センターのTSUBAMEスーパーコンピュータで実行を行う。

多目的コアの開発方法は、まず解析解のある問題に設定し、保存形IDO法の計算精度を検証する。選択した離散化精度に応じた計算結果が得られることを確認し、各種ベンチマークテストにおいて他の結果との定性的比較を行い、本計算コアの優位性を確認する。

4. 研究成果

多くの分野でさまざまな目的に使うことができ、高精度で格子生成の問題を大幅に低減する新しい数値流体計算(CFD)手法を開発することを目的とする。

多モーメントを従属変数とし、物理量に対する多項式補間関数について、局所区間積分が従属変数に一致する条件を課して未定係

数を決定する。流体方程式を区間積分して離散化式を導出し、式中に表れる微係数に対しては、IDO法の特徴である補間関数を微分して導く高次精度の式を代入する。各従属変数の時間積分には、3段および4段のルンゲ・クッタ法を用いる。本CFDコアは、(1)圧縮性流体計算コアの検証、(2)非圧縮性流体計算コアの開発、(3)Poisson方程式の高速計算(MG)コア、(4)多相流計算コア等から構成され、それぞれに対して検証を行いながら総合的に開発を行う。

(1) 保存形IDO法の高精度さの検証

従属変数に物理量の値と積分値(線積分、面積積分、体積積分)を用いる積分値型の多モーメント法である保存形のIDO法を用いた高精度な数値流体力学(CFD)の多目的コアを開発するための検証として、移流項に対して3次精度の風上補間および4次精度の中心補間を適用し、Fourier解析により位相誤差の波数依存性を調べた。積分平均値が同精度の有限差分法より極めて優れていることが明らかになった。

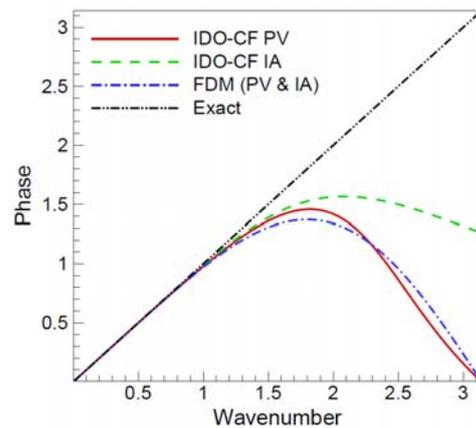


図1 保存形IDO法の位相誤差

(2) 圧縮性流体計算コアの検証

多(マルチ)モーメント法である保存形IDO法の圧縮性流体コアへの適用をほぼ完全に確立することができた。最低次モーメントである格子点上の値の計算は補間関数をベースとした高次精度有限差分法のように解き、最高次のモーメントである体積積分値平均値はセルに対する有限体積法として数学的に厳密に解くことで、有限差分法と有限体積法の利点を併せ持つ計算手法を衝撃波のベンチマークテストなどに適用し、非常に良い成果が得られた。最高次のモーメントである体積積分値は完全に保存するため、衝撃波速度が数値粘性で変化することがない。各モーメントの配置がスタガードになっているため、物理量に対してコロケート配置になっていても圧力と速度間のカップリングが非常に良いことが明らかになった。

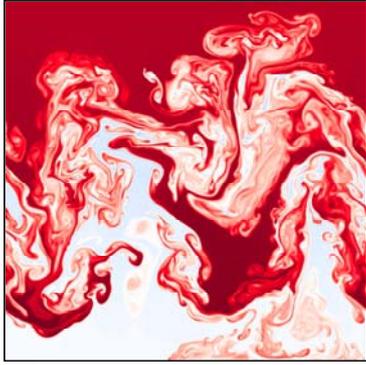


図 2 圧縮性のレーリー-テラー不安定性の非線形成長

(3) 浅水波方程式の計算コアの開発

津波の広域計算など、鉛直方向に静力学平衡が十分成り立つ問題は双曲型方程式である浅水波方程式に帰着される。津波のリアルタイム計算などを旨とし、より高速で安定した計算コアの開発を行った。方向分離解法を導入し、格子点上での時間積分にはリーマン不変量に基づいたセミ・ラグランジュ法を導入して重力波速度で時間ステップを律速するようにし、積分平均値に対しては保存形のセミ・ラグランジュ(CIP-CLS2)法を導入した。方向分離解法が安定な遡上計算にも功を奏した。浅水波方程式の計算コアは GPU を用いて高速計算を行うためにも使われ、CUDA を用いてプログラミングし、NVIDIA の GeForce GTX 285 で実行することにより CPU の 60 倍以上の高速化を達成した。

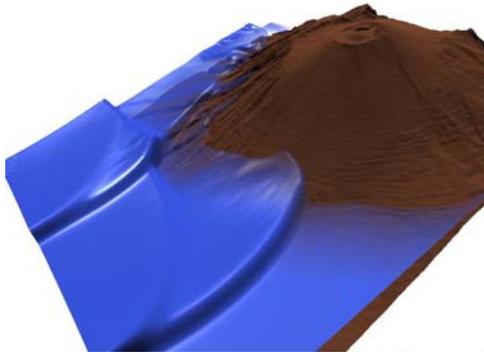


図 3 遡上する津波計算

(4) 非圧縮性流体計算コアの開発

圧力の Poisson 方程式を解く部分は MG 計算コアを使い、速度の運動方程式を解く部分に保存形 IDO 法を組み込むことで、非圧縮性流体計算コアがほぼ完成された。これまでの非圧縮性流体計算と比較すると、運動量を完全に保存しているため、高波数領域で非常に良い計算結果が得られている。乱流直接計算と LES 計算では、どちらも従来の結果に勝る計算精度を示すことができた。以下に LES によるチャンネル乱流の速度プロファイルを示す。

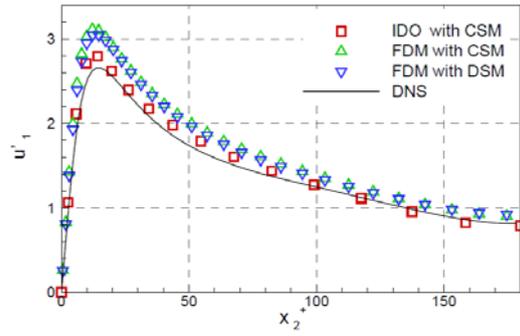


図 4 チャンネル乱流の速度プロファイル比較

(5) Poisson 方程式の高速計算 (MG) コア

マルチグリッド (MG) 法を離散化した Poisson 方程式の行列計算に直接適用し、SOR 法等の計算を高速化する方法と、CG 法や BiCGStab 法などのクリロフ部分空間法の前処理として収束を加速する方法の両方を検討し、問題に応じて使い分けられることのできるコアとして開発した。Poisson 方程式に対しても 4 次精度で計算でき、マルチグリッド法での反復回数が 2 次精度差分法と同様に低減することも確認できた。

(6) 多相流計算コア

気体-液体の混在する (気液界面を含む) 問題は、界面で密度比が大きく異なるため非圧縮性流体計算の Poisson 方程式の収束性を改善しなければならない問題と、気液界面の高精度な記述を行うための方法を開発することが重要であり、前者は MG 法によりほぼ満足の行く結果が得られ、後者はレベルセット法を高精度に解くことによって、大規模多相流計算のコアを開発することができた。ダム・ブレイク問題に対して実験と計算の比較を行い、3 次元性の現れる機構の解明に十分貢献できる結果が得られている。気液界面のアンチ拡散の導入は必須であるが、体積保存性と界面形状の記述精度の両立が今後の課題である。



図 5 ダム・ブレイク問題の大規模計算

ダム・ブレイク問題に対して、東京工業大学・学術国際情報センターの Tsubame スパコンの 512 CPU を用いて 800x500x400

格子で行った計算と、九州大学・応用力学研究所で行われた実験との比較を行った。前方に浅い水がある状態では適度な浅さの時に激しい3次元性が現れるが、その機構の解明に十分貢献できる結果が得られた。これまでの多相流の計算は低解像度の計算が多く、高解像度にするにつれて物理現象の計算結果として収束して行かないことも明らかになった。

(7) Cahn-Hilliard 方程式による界面捕獲の検討

多相流の界面捕獲のために Cahn-Hilliard 方程式を解くことに対して、保存形 IDO 法で高精度に計算することは可能であるが、計算の安定性に必要な時間ステップが単純な差分法よりも厳しいことが明らかになった。これは時間積分に陰解法を導入すれば緩和されるが、時間ステップを進めると界面形状を必要以上に歪むことが分かり、自由界面を追跡するために Cahn-Hilliard 方程式を用いるときには過剰な表面張力を与える点に注意が必要であることが分かった。

(8) AMR 法計算コアの開発

多モーメント手法である保存形 IDO 法を圧縮性および非圧縮性流体計算に適応し、計算コアを開発した。必要な領域に必要な空間解像度を設定できる適合格子細分化手法に対して、Space filling 曲線として Peano 曲線を用い、キャッシュ効率を高め動的負荷分散を行うことができた。

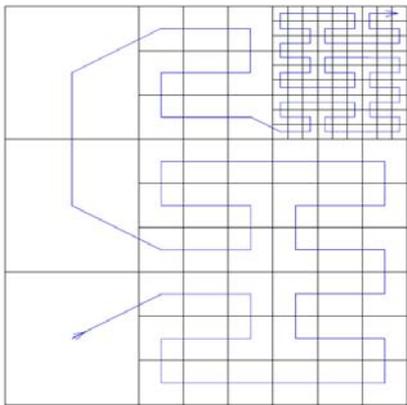


図 6 Peano 曲線を用いた Space Filling.

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 11 件)

- ① Marlon Arce Acuna, Takayuki Aoki: Multi-GPU Computing and Scalability for Real-Time Tsunami Simulation, 情報処理学会, 2010 年ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム

(HPCS2010), pp.125-132, 工学院大学, 2010 年 1 月 (査読有)

- ② 小川 慧, 青木 尊之, 山中 晃徳: マルチ GPU によるフェーズフィールド相転移計算のスケーラビリティ ~ 40 GPU で 5 TFLOPS の実効性能 ~, 情報処理学会, 2010 年ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム (HPCS2010), pp.117-124, 工学院大学, 2010 年 1 月 15 日 (東京) (査読有)

- ③ 小川 慧, 青木 尊之: GPU によるマルチグリッド法を用いた 2 次元非圧縮性流体解析の高速計算, 日本計算工学会論文集, Vol. 2009, No. 20090021, 2009 年 11 月 (査読有)

- ④ 青木 尊之: GPU コンピューティングによる CFD の超高速計算, 日本流体力学会誌「ながれ」, Vol. 28, pp.89-97 (2009) (査読有)

- ⑤ 青木 尊之: フル GPU による CFD アプリケーション, 情報処理学会誌, Vol. 50, No. 2, pp.107-115 (2009) [解説記事] (査読無)

- ⑥ 青木 尊之: 並列計算技術の最新動向 — スパコンと流体アプリケーション —, 自動車技術, [解説記事], Vol. 62, No. 5, pp.27-33 (2008) (査読無)

- ⑦ 青木 尊之, 今井陽介: 保存形 IDO (局所補間微分オペレータ) 法, 応用数学会誌「応用数理」, Vol. 18, No. 2, 岩波書店, pp.32-45 (2008) (査読有)

- ⑧ 青木 尊之・今井陽介: 保存形 IDO (局所補間微分オペレータ) 法, 岩波「応用数理」, Vol. 18 No. 2, pp.32-45 (2008) (査読有)

- ⑨ Yohsuke Imai, Takayuki Aoki and Kenji Takizawa, Conservative form of interpolated differential operator scheme for compressible and incompressible fluid dynamics, Journal of Computational Physics, Vol. 227, Issue 4, pp.2263-2285 (2008) (査読有)

- ⑩ Yohsuke Imai, Takayuki Aoki, Magdi Shoucri, Comparison of Efficient Explicit Schemes for Shallow-Water Equation -- Characteristics-Based Fractional-Step Method and Multimoment Eulerian Scheme, J. Appl. Meteorology and Climatology, Vol. 46, pp.388-395 (2007) (査読有)

- ⑪ 青木 尊之, マルチモーメント・スキーム CIP/IDO 法を用いた大規模高精度流体計算, [解説記事], 放電研究, Vol. 50, No. 2, pp.26-30 (June 2007) (査読無)

[学会発表] (計 81 件)

- ① T. Aoki: Multi-GPU performance of mesh-based HPC applications, 2nd International Workshops on Advances in Computational Mechanics (IWACOM-II), March 29-31, 2010, Yokohama, JAPAN
- ② Takayuki Aoki: Multi-GPU Scalabilities for Mesh-based HPC Applications, SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing (PP10), Seattle, Washington, February 26, 2010
- ③ Takayuki Aoki: Multiple-GPU Performance for CFD Applications - Why can GPU accelerate CFD so much?, RIKEN-NVIDIA International Conference "Accelerated Computing", 2010, Jan 29, Roppongi, Japan
- ④ Marlon Arce Acuna, 青木尊之: Real-Time Tsunami Simulation on Multi-node GPU Cluster, 2009 年度次世代スーパーコンピューティング・シンポジウム ポスター最優秀賞 (2009 年 10 月 7 日~8 日), 東京
- ⑤ Satoshi Matsuoka, Takayuki Aoki, Toshio Endo, Akira Nukadal, Toshihiro, Kato, Atushi Hasegawa, GPU Accelerated Computing---From Hype to Mainstream, the Rebirth of Vector Computing, San Diego, SciDAC2009, June 15, 2009
- ⑥ 青木尊之: GPU コンピューティングによる CFD の超高速計算 (特別講演), 第 22 回数値流体シンポジウム, 東京, 2008 年 12 月 18 日 (CD-ROM)

[図書] (計 2 件)

- ① 青木尊之, 額田彰著: 「はじめての CUDA プログラミングー驚異の開発環境 [GPU+CUDA] を使いこなす」, 工学社, ISBN-10: 4777514773, ISBN-13: 978-4777514779, 2009 年 11 月, 247 ページ
- ② 青木尊之, 計算力学ハンドブック, 担当章 CIP 法, 朝倉書店, 2007 年, pp. 34-50.

[その他]

ホームページ

<http://www.sim.gsic.titech.ac.jp/>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

青木 尊之 (AOKI TAKAYUKI)
東京工業大学・学術国際情報センター・
教授
研究者番号: 00184036

(2) 研究分担者

内海隆行 (UTSUMI TAKAYUKI)
山口東京理科大学・基礎工学部・教授
研究者番号: 50360433

今井 陽介 (IMAI YOHSUKE)
東北大学・工学系研究科・助教
研究者番号: 64431524

小林 宏充 (KOBAYASHI HIROMICHI)
慶応義塾大学・法学部・教授
研究者番号: 60317336