

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 26 年 6 月 8 日現在

機関番号：12608

研究種目：基盤研究(B)

研究期間：2011～2013

課題番号：23360046

研究課題名(和文) GPUスパコンによる気液二相流と物体の相互作用の超大規模シミュレーション

研究課題名(英文) Large-scale simulations for gas-liquid two-phase flow-structure interaction using GPU supercomputer

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

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 15,600,000円、(間接経費) 4,680,000円

研究成果の概要(和文)：気液二相流は気液界面を含んだ複雑な流れのダイナミクスを象徴する流体现象であるが、その数値計算は負荷が大きいのにもかかわらず並列化が難しいため、これまでの計算は空間解像度が不十分であった。演算性能の高いGPUを大量に搭載するスパコンを用い、新しいCLSVOF法による界面捕獲、圧力Poisson方程式を解くためのマルチグリッド前処理付BiCGSTAB法などのGPUに適した数値計算手法、複雑形状の物体に対して境界埋込み法を導入し、複数GPU計算での通信と計算をオーバーラップさせることにより、超大規模な気液二相流と物体の相互作用計算を可能にした。

研究成果の概要(英文)：In spite of unknown complex dynamics of two-phase flows including gas-liquid interfaces, it is hard to study them with high spatial resolution by numerical computation due to quit less efficiency of parallel computing. By using a large number of GPUs equipped with high computational performance, we have developed a numerical simulator of gas-liquid two-phase flows with high resolution by introducing a new CLSVOF (Coupled Level Set with Volume of Fluid) method, a Pressure Poisson solver of Multi-grid preconditioned BiCGSTAB and IBM (Immersed Boundary Method). In order to get high parallel scalability, an overlapping technique between computation and communication is indispensable.

研究分野：工学

科研費の分科・細目：応用物理学・工学基礎、工学基礎

キーワード：気液二相流 GPU スパコン Immersed Boundary Method CLSVOF マルチグリッド 計算と通信のオーバーラップ

1. 研究開始当初の背景

数値流体力学は計算機が科学技術計算に用いられた当初からの比較的成熟した学術領域である。多くの流体現象が数値流体力学により解明され、産業界でも流体解析は欠くことのできないものとなっている。その中で未だに計算し難い対象が気液二相流である。気体と液体の界面が絶えず大きく変形し、多様性とダイナミクスを象徴する流体現象である。

単相流と比較すると気液二相流計算の計算負荷は圧倒的に大きい。通常の分散メモリ型スパコンでは並列計算の性能が著しく低いため、 $100 \times 100 \times 100$ 格子点程度の小規模な計算しか行われておらず、これまでの気液二相流解析は解像度が決定的に不足していた。そのため、液膜、大量の小気泡、スプラッシュ、噴霧、複雑形状の物体との相互作用など、高解像度が必要な計算を行うことは極めて困難な状況となっていて、自然界や工学分野では物体(構造物)と気液二相流の相互作用のメカニズムが明らかになっていない現象が多く残されている。

2. 研究の目的

高解像度で気液二相流計算を行うということは必然的に大規模計算ことであり、計算負荷が問題となる。そこで、本研究では近年登場した高い演算性能を誇る GPU を多数搭載するスパコンを利用する。GPU は内部に数 100 ~ 数 1000 の演算コアを持ち、細粒度の超並列計算に適したアルゴリズムの導入、GPU 計算のためのプログラミング、GPU のアーキテクチャに対する最適化チューニングを行う必要があり、これらに対して新しい手法を開発することで超大規模な気液二相流と物体の相互作用計算を可能にすることを目的とする。

3. 研究の方法

気液二相流の数値計算は 1990 年代から VOF 値を導入して気液界面を有限な厚さとして扱う計算手法が台頭し、Level Set 法、Front Tracking 法や CIP 法などの界面捕獲手法が発展した。距離関数や密度関数という 3 次元データから 2 次元断面を生成することにより、界面の合体・分離というトポロジー変化に対して数値計算が破綻せずに計算ができるようになった。(数学的な厳密性は依然失われている。)

本研究では、精度の良い界面追跡法として体積保存する VOF 法と Level Set 法を組み合わせた CLSVOF (Coupled Level Set with VOF) を用い、それに適した WENO 法等の高解像度移流計算スキームを導入する。一方、最も計算負荷の高い圧力の Poisson 方程式の計算には、気液二相流計算特有の疎行列非ゼロ要素に対しても収束性の良いクリロフ部分空間での反復法である BiCGSTAB 法にマルチグリッド前処理を組み合わせる方法を導入する。

これらを複数ノードに分散した GPU を多数利用し、GPU の高い演算性能を引き出すようなプログラミング実装とスレッド・ブロックの最適化、キャッシュ・チューニング等を行う。

4. 研究成果

(1) 気液界面の捕獲法

気液界面は 2 次元面であるが、これを表現するために 3 次元空間の関数の断面を利用する手法が良く使われる。3 次元の識別関数を用いると情報量としては冗長に思えるが、気泡の合体・分離などのトポロジー変化を容易に表現することができるという利点がある。代表的な識別関数として Level Set 関数を使う方法や気体・液体の流体の体積率分布を用いる VOF (Volume of Fluid) 法等が知られている。Level Set 関数は界面からの符号付距離関数であり、液体側の領域は界面からの距離に正の符号を付け、気体側の場合は距離に負の符号を付ける。こうすることにより界面は Level Set 関数のゼロの等値面として表現される。識別関数はなめらかなプロファイルになるため、曲率等を精度よく求めることができる。Level Set 法(特に Particle Level Set 法)は界面形状を表現する精度が高いが、本来保存されるべき気体・液体の体積保存が保証されず小さな気泡や液滴が消失する可能性がある。一方、VOF 法は気体・液体のそれぞれの体積を保存するが、格子サイズに近い曲率半径を持つ気液界面形状を精度よく表現することができない。この両者を十分満足させる界面捕獲手法はまだ開発されていない。ここでは、THINC-WLIC 法という VOF 法をベースにし、気液界面の広がりを阻止するアンチ拡散性が入った手法で界面を捕獲し、表面張力や接触角を評価するためだけに Level Set 法を導入している。

表面張力および壁との接触角については Brackbill の CSF (Continuous Surface Force) モデルにより有限幅に力を分散させて計算している。

(2) 非圧縮性 Navier-Stokes 方程式のマルチグリッド前処理付 BiCGTAB 法による圧力の Poisson 方程式の解法

気液二相流計算において最も計算時間を要する部分が Poisson 方程式の計算である。ここでは構造格子を用いているため、有限差分法で離散化した連立一次方程式の係数行列は非ゼロ要素の位置は規則的であるが、気液を統一的に解くために界面に急峻な密度変化が生じ、かなり悪条件の疎行列となる。そこで、クリロフ部分空間での反復法である BiCGSTAB 法を V サイクルのマルチグリッド法(図 1)による前処理と組み合わせる収束性の高い疎行列解法をみずほ情報総研と共同研究し、GPU 用のライブラリとして開発している。マルチグリッド法は大規模並列計算にも適用可能なアルゴリズムであり、Red &

Black 法を用いた ILU(0) 法をスムーザとして用いることで安定した収束性を確保している。

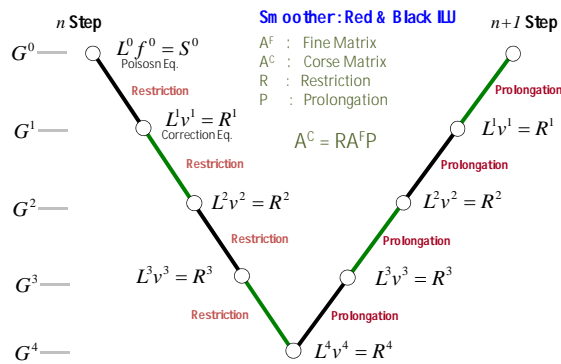


図1 マルチグリッド前処理のVサイクル

(3) 単一気泡の上昇の検証

気液二相流計算の基本的な検証として単一気泡の上昇を計算した。Grace ダイアグラムによると、単一気泡の上昇は無次元の Eotvos 数、Morton 数、Reynolds 数に応じて球型、楕円型、スカート型、くぼみ付き楕円型に分類される。その典型的なパラメータに対して得られた計算結果を図2に示す。定常の上昇速度になったときの気泡形状は Grace ダイアグラムの分類と良く一致しており、さらに上昇速度は実験値と非常によく一致している。

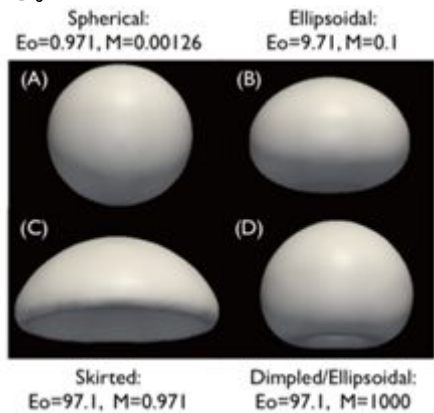


図2 無次元パラメータの違いによる上昇する単一気泡の形状変化

(4) 気液二相流の複数 GPU による計算

気液二相流計算に必要な移流計算、Poisson 方程式計算、表面張力計算等の全てを GPU コンピューティングで実装し、速度、圧力、Level Set 関数、VOF 関数といった従属変数を GPU 上のメモリに置いている。CPU 側からは GPU 計算を実行するカーネル関数を call (実行命令)するだけとなり、CPU と GPU の頻繁なデータ交換を排除した。これにより GPU 本来の演算性能、メモリバンド幅を有効に利用して実行することができ、単一 CPU コア(シングル CPU スレッド)に対して単一 GPU を用いて数 10 倍の実行性能を達成している。

大規模計算に対しては、複数の GPU を用いて各 GPU のビデオ・メモリのサイズで計算可能になるように領域分割を行い、各 GPU は割

り当てられた領域だけを計算する。CPU 計算と同じように分割領域間のデータ通信が必要になり、GPU から CPU 上のメモリを介して MPI ライブラリを使う 3 ステップからなるデータ通信を行う。GPU スパコンでは、しばしばノードの演算性能に対してノード間のインターコネクションの通信性能が不足するため、GPU 数を増やすにつれて通信時間が大きなオーバーヘッドになり、計算と通信をオーバーラップすることにより通信時間を隠ぺいするような工夫が必須となる。

(5) ダムブレークの濡れた床への浸水計算

複雑な気液二相流としてダムブレークの計算を行い、九州大学・応用力学研究所のグループとの共同研究で行った実験との比較も行った。通常はプレートで仕切り、溜めておいた水を乾いた床に浸水させ、その先端の速度などを実験と比較するが、ここでは濡れた床へ水を浸水させる計算と実験を行った。濡れた床の場合、浸水を塞ぎ止める効果が大きいので、後から押し寄せる水の速度が先端速度を上回り浸水直後から砕波が起こり先端は大きく乱れる。

計算条件は 72cm x 13cm x 36cm の計算領域に 1.8cm の浅い水面を設定し、初期に幅 15cm、高さ 36cm の水柱を置く。気相および液相の物性値はそれぞれ空気、水の値を用いた。576 x 96 x 288 格子を用いて計算した結果と実験のスナップショットを図3に示す。



図3 ダムブレーク計算と実験の比較

計算と実験の比較は水槽のサイズ等が必ずしも同一条件ではないが、計算は砕波の過程を良く再現している。また、壁との衝突により小さな気泡が水中に巻き込まれている様子も良く捉えられている。砕波の水面形状は初期の水柱高さや濡れた床面の水深の比が大きいほど噴流の角度が浅く、進行方向に

大きく巻き込む。

実験では、砕波した流れが壁へ当たる際の衝撃圧を高感度センサーで測定しており、定量的に良く一致している。空気の巻き込みが重要であることが明らかになった。

(6) IBM による物体表現手法の導入

IBM (Immersed Boundary Method) は格子点上の物理量(q)に物体力を作用させることで、物体から流体への影響を表現する。物体形状は物体表面からの符号付き距離関数(ϕ)で与えられ、物理量は物体表面上にて境界条件が満たされる。ここで、図4のように物体境界($\phi = 0$)が計算セル内にある場合を考える。ここで、ベクトル \vec{q}_f は、符号付き距離関数の勾配ベクトルである。下付き添字 f の物理量は、流体側で補間される物理量、下付き添字 b の物理量は物体境界面上の物理量となる。下付き添字 s の物理量は、物体内の格子点上に定義され、境界条件を満たす様に決定される。圧力・流体率の物体上の境界条件として、勾配 0 を与える Neumann 境界条件が与えられ、物体内の物理量は、 $q_s = q_f$ を満たす。ここで、法線方向の流体率の勾配が 0 となるため、接触角は 90 度となる。IBM による物理量の修正は、連続の式を満たすために圧力 Poisson 方程式を解く前に適用される。

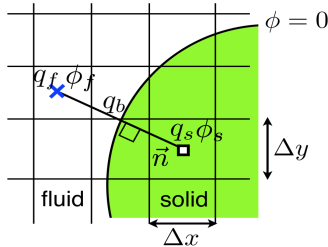


図4 IBM (Immersed Boundary Method)法

(7) 気液二相流コードの実行性能測定

液滴落下現象の計算を行い、気液二相流コードの実効性能を測定した。計算領域として、 x 軸・ y 軸方向に水平方向を、 z 軸方向を高さ方向に割り当て、計算領域サイズは $(L_x, L_y, L_z) = (40 \text{ mm}, 40 \text{ mm}, 20 \text{ mm})$ と設定した。液滴落下計算では、初期の液面高さ 0.9 mm の薄い液膜に、直径 4.8 mm の液滴を 2.8 m/s の速度で衝突させた。 2.8 m/s は約 400 mm の高さから液滴を落下させた時の速度に相当する。気体と液体の物性値はそれぞれ密度 $\rho_L = 1000 \text{ kg/m}^3$ 、 $\rho_G = 1.25 \text{ kg/m}^3$ 、粘性 $\mu_L = 1.7 \times 10^{-3} \text{ Pa}\cdot\text{s}$ 、 $\mu_G = 1.0 \times 10^{-6} \text{ Pa}\cdot\text{s}$ 、表面張力係数は $\sigma = 5 \times 10^{-2} \text{ N/m}$ を設定し、液体の物性として擬似的なミルクの物性(水と比較して粘性が倍、表面張力が半分程度)を用いた。重力加速度は 9.8 m/s^2 を用いる。

GPU 数を変化させた時の 1 秒間に時間更新できる格子点数の数 (MLUPS : mega lattice-updates per second) の弱スケーリングと強スケーリングを測定した。倍精度演

算にて測定を行い、圧力 Poisson 方程式の収束判定条件として、速度場の発散が 10^{-6} 以下となるように設定した。計算速度の測定条件として、液滴が界面に衝突するまでの比較的収束が容易な条件である Case 1 と、液滴が界面に衝突したときの収束が悪い条件である Case 2 を設定した。

図5の弱スケーリングでは、1 GPU あたりの格子点数を $(N_x, N_y, N_z) = (192, 192, 96)$ と設定し、8 GPU から 512 GPU までの実行性能を測定した。Case 1 の条件では、8 GPU で 9.0 MLUPS 、64 GPU で 56 MLUPS 、512 GPU で 317 MLUPS の結果が得られ、512 GPU では 8 GPU に対して、35 倍(効率 55%)の良いスケーリングが得られた。一方で、Case 2 の条件においては、8 GPU で 5.9 MLUPS 、64 GPU で 32 MLUPS 、512 GPU で 82 MLUPS の結果が得られ、512 GPU では 8 GPU に対して、14 倍(効率 22%)の程度の高速化しか達成されていない。このような速度低下の原因として、問題サイズの増加と、最小格子スケールの細かな液滴の存在による収束性能の著しい低下が考えられる。

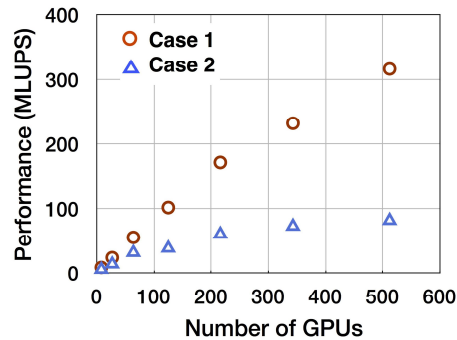


図5 気液二相流計算の TSUBAME2.5 における弱スケーリング

図6に Case 1 および Case 2 の強スケーリングの結果を示す。Case 1 の格子点数 $(N_x, N_y, N_z) = (382, 382, 192)$ の結果において、8 GPU の結果と比較して 16 GPU で 1.7 倍、32 GPU で 2.3 倍、64 GPU で 2.9 倍の高速化が達成されたものの、128 GPU においては 2.8 倍と速度の低下が確認された。

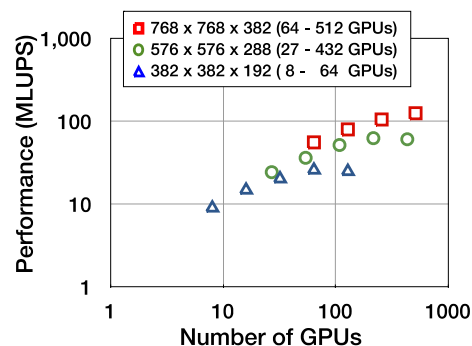


図6 case 1 の強スケーリング

また、図7では、Case 2 においてその傾向がより顕著となり、並列数を増やすことによ

る効率的な高速化が見込めない。高い強スケーリングを得ることの難しさが明らかになった。

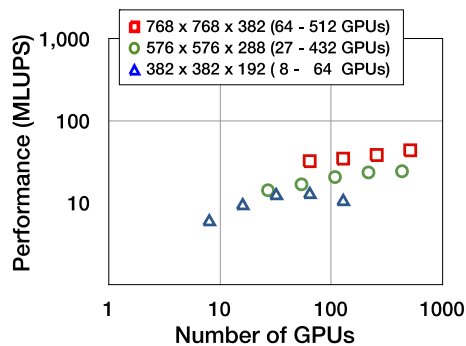


図7 case 2の強スケーリング

(8) 複雑物体を含む二相流計算

移動物体を含む二相流計算として、回転板による水面の攪拌計算を行う。計算領域として、x 軸・y 軸方向に水平方向を、z 軸方向を高さ方向に割り当て、領域サイズ (Lx, Ly, Lz) = (0.5m, 0.5m, 0.5m) に対して、格子点数 (Nx, Ny, Nz) = (512, 512, 512)、64 台の GPU を設定した。壁面は滑りなし境界条件を与えた。気体・液体の物性値として、20 の空気と水の物性値を与え、初期値として水面高さは 0.2 m に設定した。物体は計算領域中に 2 個配置し、それぞれ逆方向に強制的に回転させる。物体の大きさは、周方向、軸方向、厚さ方向に (0.325m, 0.08m, 0.01m) とし、物体間の幅を回転板の幅と同じ 0.08m と設定した。回転数は 210 rpm に設定した。

図 8 に気液界面、および手前側の回転板の中心を通る x-z 軸断面の流体率 (VOF 値) を示す。それぞれの回転数において、板が気液界面に打ち付けられることで、気液界面が大きく変形し、細かなスプラッシュが飛んでいることが確認できる。この様な気液界面が激しく揺き乱される現象においても、本計算手法は安定に計算できることを確認した。

気泡の巻き込みや、しぶきを捉えた解像度で計算が実施できていることが確認できる。以上の事より、GPU を用いた計算により、1 億格子点程度の固気液三相流の連成解析が容易に実施可能であることを示した。

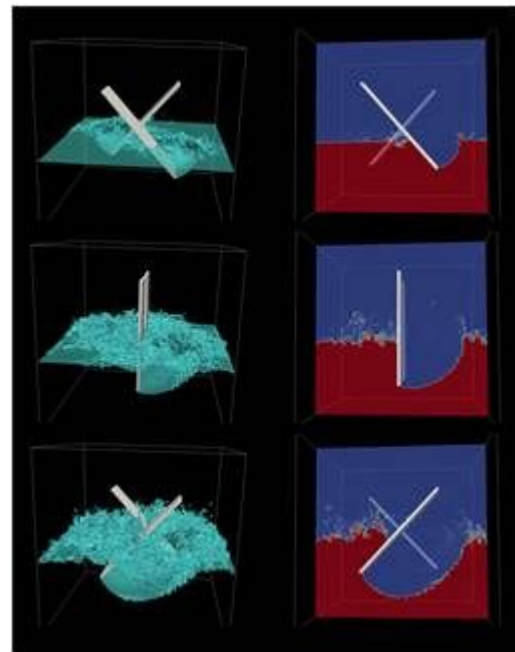


図8 回転板による水面の攪拌計算

(9) 物体と気液界面の連成解析

固体と気液流体との連成問題として、球体の落下問題の計算を行う。計算条件として、計算領域 (Lx, Ly, Lz) = (0.3m, 0.3m, 0.3m) に対して、格子点数 (Nx, Ny, Nz) = (480, 480, 480)、並列数 27 を設定した。初期水面高さは 0.12 m とし、球体半径は 0.02 m、質量は 10 g と設定し、簡略化のため球の回転運動は考慮しない。球体の初期高さは 0.25 m、初期速度を下向きに 5 m/s と設定した。固体と流体の連成解析では、固体に働く力の総和を求める必要がある。固体に働く力は、IBM の物体力の計算と同様に、物体近傍格子点上にて計算される。物体の重心に作用する力は、Thrust ライブラリを用いることで GPU のデバイス上にて高速な総和計算を行った。

図 9 に計算結果を示す。球体が気液界面に衝突し液中に沈んだ後、浮力によって気液界面まで浮き上がる様子が確認できる。また、

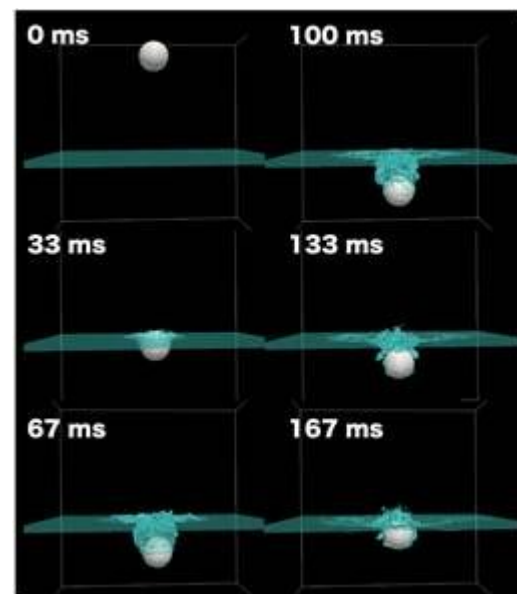


図9 固体と気液二相流体との連成問題

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 15 件)

都築怜理, 青木尊之, 下川辺隆史: GPU スパコンにおける 1 億個のスカラ粒子計算の強スケーリングと動的負荷分散, 情報処理学会論文誌コンピューティングシステム, 査読有, Vol.9, No.3, P.82-93, 2013 年 9 月

T. Takaki, T. Shimokawabe, M. Ohno, A.

Yamanaka, T. Aoki: Unexpected selection of growing dendrites by very-large-scale phase-field simulation, Journal of Crystal Growth, 査読有, 21-25, Volume 382, 2013年7月

下川辺隆史, 青木尊之, 小野寺直幸: 複数GPUによる格子に基づいたシミュレーションのためのマルチGPUコンピューティング・フレームワーク, HPCS シンポジウム 2014, 査読有, 一橋大学, 2014年1月8日(最優秀論文賞)

小野寺直幸, 青木尊之, 下川辺隆史, 小林宏充: 格子ボルツマン法による1m格子を用いた都市部10km四方の大規模LES気流シミュレーション, 情報処理学会ハイパフォーマンスコンピューティング研究会主催HPCSシンポジウム2013, 査読有, 東京, 2013年1月16日(最優秀論文賞)

T. Shimokawabe, T. Aoki, T. Takaki, A. Yamanaka, A. Nukada, T. Endo, N. Maruyama, S. Matsuoka: Peta-scale Phase-Field Simulation for Dendritic Solidification on the TSUBAME 2.0 Supercomputer, in Proceedings of the 2011 ACM/IEEE International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis, SC '11, 査読有, IEEE Computer Society, Seattle, WA, USA, Nov. 15, 2011, SC '11 Technical Papers. (ゴードンベル賞)

A. Yamanaka, T. Aoki, S. Ogawa, T. Takaki, GPU-accelerated phase-field simulation of dendritic solidification in a binary alloy, Journal of Crystal Growth, 査読有, Vol.318, 2011/03, pp. 40-45.

T. Miki, X. Wang, T. Aoki, Y. Imai, T. Ishikawa, K. Takase and T. Yamaguchi: Patient-specific modelling of pulmonary airflow using GPU cluster for the application in medical practice, Computer Methods in Biomechanics and Biomedical Engineering, 査読有, DOI:10.1080/10255842.2011.560842, 02 Aug 2011.

Naoyuki Onodera, Takayuki Aoki, Hiromichi Kobayashi: Large-eddy simulation of turbulent channel flows with conservative IDO scheme, Journal of Computational Physics, 査読有, Volume 230, Issue 14, 20 June 2011, Pages 5787-5805 (2011).

丹愛彦, 青木尊之, 井上景介, 吉谷清文: 回転体に駆動される気液二相流の数値計算, 日本機械学会論文集B編, 査読有, Vol.77, No.781, 1699-1714, (2011).

Xian Wang and Takayuki Aoki: Multi-GPU performance of incompressible flow computation by lattice Boltzmann method on GPU cluster, Parallel Computing, 査

読有, pp.521-535, September 2011, doi:10.1016/j.parco.2011.02.007.

[学会発表](計 104 件)

Takayuki Aoki: Large-scale GPU Applications for Scientific Computing, SIAM Parallel Processing 2014, Portland, US, Feb.20,2014【基調講演】

Takayuki Aoki: GPU Computing and HPC Applications on a GPU-rich Supercomputer, Annual Meeting of TWSIAM, Providence University (Taichung), Taiwan, Jun.2,2013【基調講演】

Takayuki Aoki: Large-scale stencil applications using the whole TSUBAME2.0 resources TSUBAME 2.0, PRIB 2012, Tokyo Tech, Japan, Nov 9, 2012【基調講演】

Takayuki Aoki: Large-scale Stencil Applications on GPU-rich Supercomputer TSUBAME2.0, The annual IEEE International Conference on High Performance Computing (HiPC 2011), Bangalore, India, Dec 21, 2011【招待講演】

T. Aoki: Large scale GPU computing for CFD applications, 23th International Conference on Parallel Computational Fluid Dynamics (ParCFD 2011), Barcelona, May 17, 2011【基調講演】

[図書](計 2 件)

青木尊之 他, コロナ社, シミュレーション辞典, 2012, 415

Takayuki Aoki 他, Springer Berlin Heidelberg 社, GPU Solutions to Multi-scale Problems in Science and Engineering, 2012, 720

[その他]

ホームページ等

<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

小林 宏充 (KOBAYASHI, Hiromichi)
慶應義塾大学・法学部・教授
研究者番号: 60317336

(3) 研究分担者

今井 陽介 (IMAI, Yohsuke)
東北大学・工学系研究科・特任准教授
研究者番号: 60431524