3次元VOF法に基づく自由表面流れのための並列計算手法の検討

中央大学大学院　学生員　○ 不室　太希
東京大学　正会員　田中　聖三
中央大学　正会員　樫山　和男

1. はじめに

東北地方太平洋沖地震により発生した津波は，沿岸地域に甚大な被害をもたらし，改めて津波の挙動を事前に予測・把握して災害に備えることの重要性が認識された．

これまでの津波シミュレーションは，広領域を対象として浅水長波方程式やBoussinesq方程式に基づく2次元解析によるものが一般的であるが，構造物への被害を十分に検討するためにはNavier-Stokes方程式に基づく3次元解析が必要となる．また，3次元の津波シミュレーションは非常に大規模な自由度を扱うことから，これを高速に処理するためには並列計算が必要となる．津波の数値解析対象は複雑な自然地形や構造物を考慮するため，任意形状への適合性に優れた有限要素法は有効な手法である．

そこで本研究では，基礎方程式として3次元Navier-Stokes方程式を，離散化手法としては安定化有限要素法[1)]を用いた自由表面流れの並列計算手法の構築を行うことを目的とし，導入した並列計算手法の効率について検討する．本論文ではMPI，OpenMPおよび両者のハイブリッド並列計算手法の効率について比較・検討を行う．なお，自由表面位置を捕捉するための計算には，ロバスト性が高い界面捕捉法の1つであるVOF法[2)]を用いる．

2. 数値解析手法

(1) 基礎方程式

非圧縮性粘性流体の流れを考え，流れ場の基礎方程式は以下に示す運動方程式(1)と連続式(2)で表される．

$$\rho\left(\frac{\partial u_i}{\partial t}+u_j\frac{\partial u_i}{\partial x_j}-f_i\right)+\frac{\partial p}{\partial x_i} -\mu\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j}+\frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right)=0 \tag{1}$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i}=0 \tag{2}$$

ここでu，p，f，ρ，μはそれぞれ流速，圧力，物体力，密度，粘性係数を表している．

また，自由表面流れにおける界面位置を表現するVOF関数は，以下に示す移流方程式(3)によって支配される．

$$\frac{\partial \phi}{\partial t}+u_i\frac{\partial \phi}{\partial x_i}=0 \tag{3}$$

ここで，ϕはVOF関数を表している．

(2) 離散化手法

本解析では基礎方程式の空間方向の離散化には安定化有限要素法を適用し，時間方向の離散化にはCrank-Nicolson法に基づく差分近似を適用する．なお，式(1)の移流速度はAdams-Bashforce法によって陽的に近似し，式(3)の移流速度は流れ場の計算から求めたものを使用する．連立一次方程式の解法にはGPBi-CG法を用いる．

(3) 界面鋭敏化/体積保存

計算されたVOF関数に対して，気液界面の不鮮明さを取り除き，同時に液体の体積を一定に保つために以下に示す界面鋭敏化/体積保存[3)]を行う．

$$\begin{aligned}\hat{\phi}&=c^{1-a}\phi^a \qquad (0.0\le\phi\le c),\\ \hat{\phi}&=1-(1-c)^{1-a}(1-\phi)^a \qquad (c\le\phi\le 1.0),\\ \phi&\longleftarrow\hat{\phi}.\end{aligned} \tag{4}$$

ここで，aは鋭敏化パラメータ，cは体積保存を行うレベルを表す．

3. 並列計算手法と計算機性能

本論文ではMPI，OpenMPおよびハイブリッドによる並列計算を行い，プログラムの実行時間の比較を行う．ハイブリッド並列とはプロセス並列とスレッド並列を組み合わせて2つの階層で並列処理を行う方法であり，プロセス並列による2並列とスレッド並列による2並列を組み合わせてハイブリッド並列を行う場合には**図－1**に示すように2×2個のコアを使用して計算が行われる．

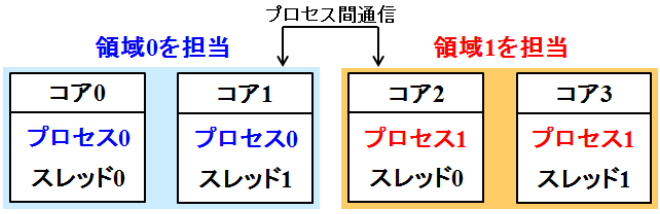
実行時間の計測には京都大学のスーパーコンピュータCRAY XE6を使用する．ハードウェア構成およびソフトウェア構成を以下に示す．

〈ハードウェア構成〉

- メモリ：64GB×940ノード
- CPU：AMD Opteron 6238 (2.9GHz)
- コア数：16コア ×2プロセッサ ×940ノード

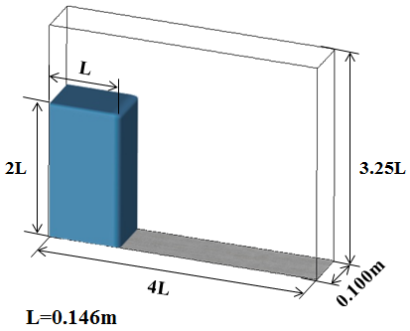
〈ソフトウェア構成〉

- OS：SUSE Linux Enterprise Server 11
- コンパイラ：Intel Composer XE2011
- 並列化ライブラリ：MPICH2-5.4.4



図－1　ハイブリッド並列

KeyWords： 自由表面流れ，VOF法，安定化有限要素法，並列計算
連絡先： 〒112-8551 東京都文京区春日 1-13-27



図－２　解析モデル図

表－１　使用するメッシュ

最小メッシュ幅	総節点数	総要素数
0.0025m	1,832,454	10,624,800

4.　数値解析例

(1)　解析条件

並列計算手法の違いによる実行時間の比較を行うため，**図－２**に示すダムブレイク問題を取り上げ，**表－１**に示すメッシュを用いた解析を行う．微小時間増分量は 0.001s とし，10Step までの実行時間を計測する．なお，気体，液体は空気と水を仮定し，密度はそれぞれ 1.293kg/m^3，1000.0kg/m^3，粘性係数はそれぞれ 1.8×10^{-5}Pa·s，1.0×10^{-3}Pa·s とする．境界条件として全ての境界面に slip 条件を与える．

(2)　解析結果

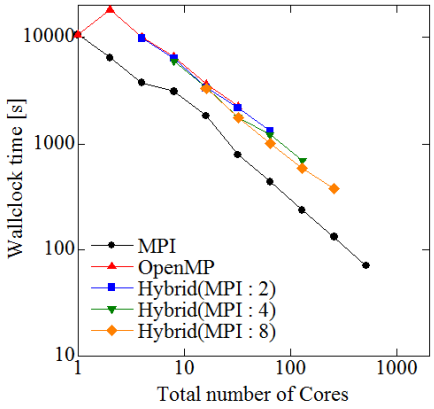
図－３に使用コア数と実行時間の関係を示す．図中，Hybrid(MPI:2) は，ハイブリッド並列において MPI による並列数を 2 としていることを表す．図より，同数のコアを使用した場合は，OpenMP またはハイブリッドよりも，MPI を用いた計算の方がより実行時間を短縮できていることが分かる．また，2 並列の OpenMP を用いた計算では，逐次計算よりも実行時間が大きくなる結果となった．

図－４, 図－５に使用コア数とスピードアップの関係および使用コア数と並列化効率の関係を示す．512 並列の MPI を用いた計算によって，逐次計算と比べて約 150 倍の速度で計算を行うことができた．また，各手法において並列数の少ない段階で効率が大きく下がり，並列数が増すにつれて効率の落ち方が緩やかになるという傾向がみられた．同数のコアを使用するハイブリッド計算においては，MPI による並列数が増すごとに若干ではあるが効率が上がっていく傾向がみられた．

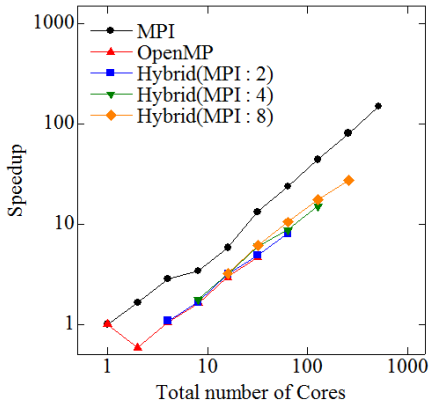
5.　おわりに

本論文では，3 次元 VOF 法に基づく大規模津波シミュレーションのための並列計算手法を構築するため，MPI, OpenMP，および両者のハイブリッド並列計算による実行時間を計測することで以下の結論を得た．

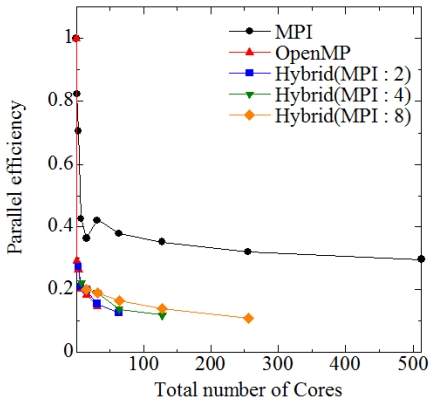
- 同じ使用コア数で並列計算手法を比較した場合，MPI を用いる並列計算は，OpenMP またはハイブリッド並列計算より実行時間を短縮できることが明らかとなった．



図－３　使用コア数と実行時間の関係



図－４　使用コア数とスピードアップの関係



図－５　使用コア数と並列化効率の関係

- ハイブリッド並列計算において，MPI による並列数が大きい方が，若干ではあるが高い効率を得ることが明らかとなった．

今後はより大規模な問題への適用を行っていく予定である．

参考文献

1) T.E.Tezduyar：Stablized finite element formulations for incompressible flow computations, Advance in Applied Mechanics, 28, pp.1-44, 1992.
2) C.W.Hirt and B.D.Nichols：Volume of Fluid(VOF) Method for the Dynamics of Free Boundaries, Journal of Computational Physics, 39, pp.201-225, 1981.
3) S.Aliabadi, T.E.Tezduyar：Stabilized-finite-element/interface-capturing technique for parallel computation of unsteady flows with interfaces, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 190, pp.243-261, 2000.