

技術論文

並列計算機による数値流体解析 (CFD) の高速化

High performance parallel computing for Computational Fluid Dynamics (CFD)

伊藤 敦
Atsushi Itou
中西 利和
Toshikazu Nakanishi
水口 隆司
Takashi Mizuguchi
吉田 正典
Masatake Yoshida
佐分利 禎
Tei Saburi

最大 128CPU を利用可能な並列計算機により、爆発時の飛散物を想定した球形の超音速における空力的な特性を CFD にて求めた。本研究の並列計算機は汎用の CPU 等、いわゆるパソコン部品を用いたクラスタタイプの自作並列計算機である。ソフトウェアとして、有限体積法により粘性・圧縮性の 3 次元 NS 方程式を解く汎用 CFD ソフトである「CFD++」を用いた。本並列計算機と CFD ソフトにより大幅な計算速度の向上が得られる事がわかった。ただし Ethernet によるノード間ネットワークでは、通信等の余計な負荷により数 CPU で並列化の効果が得られなくなるが、高速通信装置 (Myrinet) を用いることで数十 CPU においても並列計算の効果が得られ、高速通信装置の重要性が明らかになった。また、64bitCPU の利用は、メモリ空間増大による大規模モデル構築に対するメリットのみならず、演算速度向上にも効果的であることがわかった。

The supersonic aerodynamic coefficient of a sphere that represents a broken piece of structure under explosion was obtained by using Computational Fluid Dynamics (CFD). The computer that was used in this study was self-made cluster type parallel machine and available maximum number of CPU was 128. The CFD software named CFD++ was used in this study. CFD++ is general purpose CFD software to solve three-dimensional Navier-Stokes equations that represent characteristic of fluid viscosity and compressibility by using finite volume method. Using the parallel computer, computational time was reduced dramatically. The importance of network performance was mentioned in this study. Since Ethernet required more time for communication between CPUs, that performance was limited under the condition of small number of CPUs. However, using high-speed network system (Myrinet), we could get more performance even large number of CPUs. The use of 64bit CPUs was also effective to reduce computational time, in addition to provide advantage for building a large-scale computational model through an expansion of memory space.

Key Words: CFD, parallel computer, TOP 500, National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST), supercomputer, personal computer, scalability, CFD++, LINUX, CPU

1. はじめに

火薬類を扱う事業において、その貯蔵・保管における安全性に関する配慮が近年、世界的な課題となっている。火薬類は、その性質上法律的に厳重な安全管理が義務付けられるので、一箇所に保管される事が多く、それらが事故により爆発した場合の爆風による影響範囲、飛散物の散布の予測は、保管庫の設計や周囲安全環境の設定等にとって重要である。このため、爆発試験により、火薬爆発に関する各種データ収集が実施されるが、国内においては試験場の広さの関係上、取り扱う事のできる火薬量は数十 kg 程度と限られており、実際に保管される数

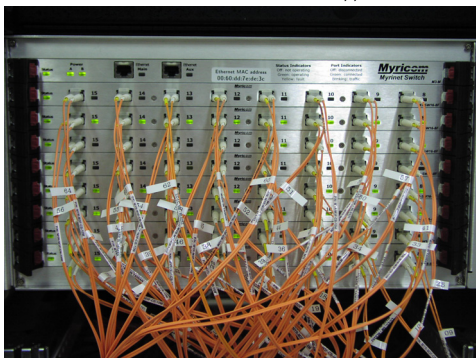
100kg～数十トンの火薬が爆発した場合の実験は不可能である。このため、少量の火薬による実験データから、大量の火薬による爆破状況を予測する事が必要となる。

このような予測において、コンピュータを用いた数値シミュレーションが活用されている。とくに数値流体解析 (CFD : Computational Fluid Dynamics) は、爆発における飛散物の散布予測及び爆風の影響等に対して適用可能な技術である。ただし、CFD の適用にあたっては、物理現象の数値モデル化に際しての課題とともに、空間のメッシュ分割の必要性から、問題によっては数百万から数

グを 500 位まで記載したもの) において世界 351 位であり国内では 27 位である (図 1 参照. ちなみに同年の 1 位は, NEC の「地球シミュレータ」SX6, 5120CPU, 35Tflops である).



BAKOO システム全体



Myrinet ハブ

図 2 BAKOO システム

表 1 BAKOO の構成

CPU	Intel Xeon2.8GHz
CPU 数	128 (64 ノード)
メモリ	192Gbyte
ハードディスク	各ノード 30Gbyte データ保存用 3.4Tbyte (RAID 5)
ネットワーク	Myrinet (LANai9.2, PCI-X 接続)
オペレーティングシステム	Linux

3.2 64bit 試作計算機 (KHPC)

UNIX 系 EWS から遅れてパソコンの CPU も 64bit の時代へ移行しつつある. 64bit 化により, プロセス当たり 2Gbyte のメモリ制限がなくなり, 取り扱うデータ量を飛躍的に増大させることができる. またバス幅の広がりによりデータ転送速度の向上も期待できる.

このため次世代の自作並列計算機の研究として, 64bit プロセッサ (AMD : Opteron2.2GHz) を用いた並列計算機を製作した (以後 KHPC と呼ぶ). KHPC の外観と内部を

図 3 に示す. サーバ用のケースを用い, 19 インチのラックに収めているが, 内部のパーツは量販店で購入するもので構成されている. また, KHPC の構成を表 2 に示す. 構成は 8 ノード, 16CPU, メモリは 32Gbyte である.

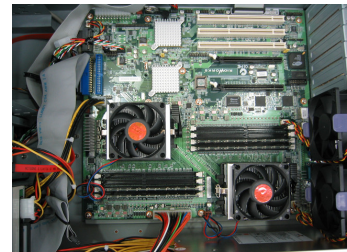


図 3 KHPC 外観と内部

表 2 KHPC の構成

CPU	AMD Opteron2.2GHz
CPU 数	16 (8 ノード)
メモリ	32Gbyte
ハードディスク	各ノード 75Gbyte データ保存用 1.5Tbyte (RAID 5)
ネットワーク	Gigabit Ethernet
オペレーティングシステム	Linux

4. CFD ソフトウェア

本研究に用いた CFD コードは, 「CFD++」 (シーエフディ プラスプラス) である. 「CFD++」は航空宇宙産業を主なターゲットとして米国 Metacomp 社で開発された市販の汎用 CFD ソフトウェアである.

粘性・圧縮性を含む 3 次元 Navier-Stokes 方程式を, 有限体積法をベースに TVD スキームにより離散化している¹⁾⁻⁷⁾. 乱流モデルは, k-ε モデルをはじめとして数種類が選択可能である. このため, 亜音速から超音速まで広い Mach 数及び Re 数に適用可能であり, 今回の研究においても, 高速飛散物の空力計算, 爆発現象のシミュレーションを同じソフトパッケージにて実施可能であった. また, 並列化への対応も Intel32bit 版, AMD64bit 版ともにされている.

さらに, 6 自由度剛体運動との連成計算がモジュールとして組み込まれており, 飛散物の運動方程式を解きながら CFD を実施することで姿勢変化に伴う空気抗力の変化を考慮した飛翔距離の計算が可能である. これに関しては別途報告する予定である.

5. 解析対象

本研究では、2つの問題点に関して爆発の安全性に対する検討を行っている。1つは、爆発時に発生する飛散物がどこまで飛ぶかという問題、もう1つは、爆発による爆風がどのように影響するかという問題である。ここでは、爆発に伴う飛散物の空力特性をCFDにより計算する過程において得られた、並列計算機の性能について述べる。

5.1 解析モデル

飛散物の形状として、球形（直径 14mm）に対して計算を行った。計算は、飛散物が地上を飛翔している条件（圧力 101325Pa、温度 288.15K、空気密度 1.225kg/m³）にて、各マッハ数の計算を行った。

図4に計算モデル全体と外部境界を示す。計算モデルは、外部境界、飛散物（球形）ともに3次元CAD（Pro/Engineer）にて作成し、IGES ファイルをメッシュ作成ソフトであるICEM/CFDに取り込み、メッシュを作成した。空間メッシュは4面体（テトラメッシュ）を用いた。

飛散物付近のメッシュの様子を図5に示す。メッシュは物体付近と後流域を細かく、外周境界にいくにつれて粗くしている。また、飛散物表面においては5面体（プリズムメッシュ）を生成し境界層に対する考慮をしている。

メッシュ数はモデル規模による計算性能を見るため約123万と約600万のものを作成した。123万メッシュの対象物表面のメッシュを図6に示す。計算モデルはハーフモデルとし、対称面には対称条件を設定している。乱流モデルはk-εモデルを用いた。

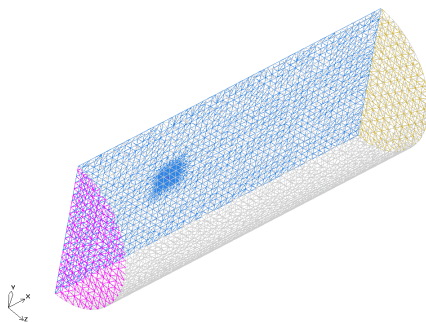


図4 計算空間と境界条件

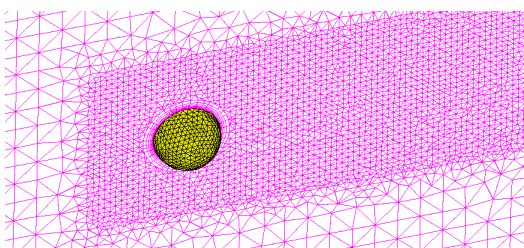


図5 対称面のメッシュ

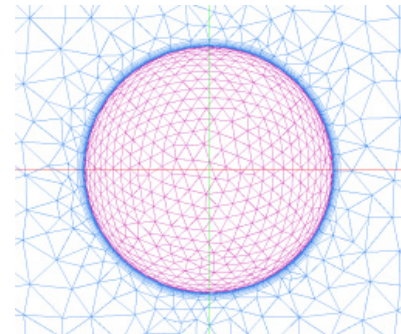


図6 123万メッシュモデルの表面

5.2 計算結果

各マッハに対する空気抗力係数 (Cd) の計算結果を図7に示す。CFDの計算で解かれるのは、3次元の各速度成分、圧力、温度及び乱流特性値 (k, ε) であり、モデルにかかる力は表面圧力の積分としてCFD++のポスト処理により得られる。この力から直径を代表長とする空気抗力係数 (Cd) を計算した。参考として実験によるCd⁽⁸⁾も記載した。これより、このマッハ数域において、計算はほぼ実験値を再現している事がわかる。

CFDで取得した流れ方向の密度の空間微分を図8に示す。CFDからは色々な物理量を可視化でき、図に示すように、流れ方向の密度の空間微分も得ることができる。流れ方向の密度の空間微分は、風洞試験におけるシュリーレン画像に相当する。この結果から、物体前方の離脱衝撃波や、後流の衝撃波の様子が明瞭に見られる。

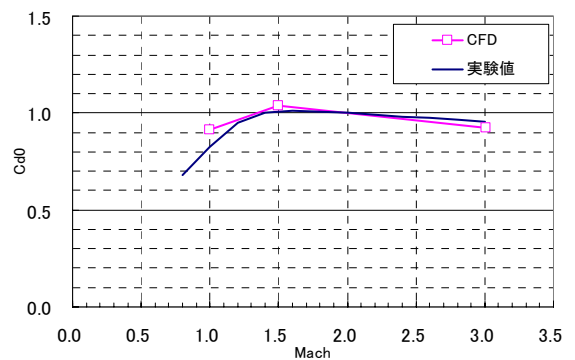


図7 各マッハに対する空気抗力係数 (Cd)

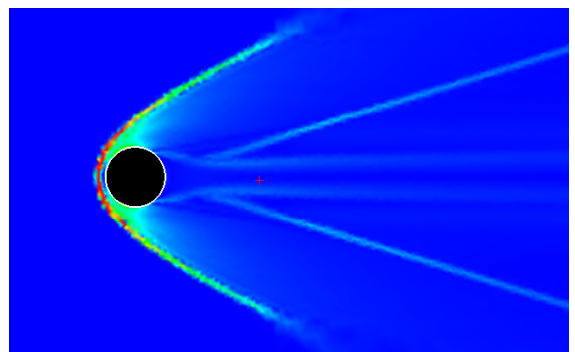


図8 シュリーレン画像相当の出力

6. 並列計算による高速化

6.1 産総研 BAK00 による計算

32bit マシンである BAK00 での計算について述べる。BAK00 では、最大 128CPU の計算が可能であり、かつ、ネットワーク (Ethernet と Myrinet) の性能比較も可能である。

計算は、先に示した球のハーフモデルの Mach3.0 の場合について、2CPU を最小構成として実施した。計算の収束に要する Iteration 回数は 600 回に固定した。

4CPU における空間分割例を図 9 に示す。並列計算の為には、CPU 数に応じた空間の分割が必要となる。CFD++ には領域分割機能が付属しており、その機能を用いて 2~128 まで分割した。各分割領域がそれぞれの CPU に割り振られ、境界での情報を相互に通信しながら計算を実施する。

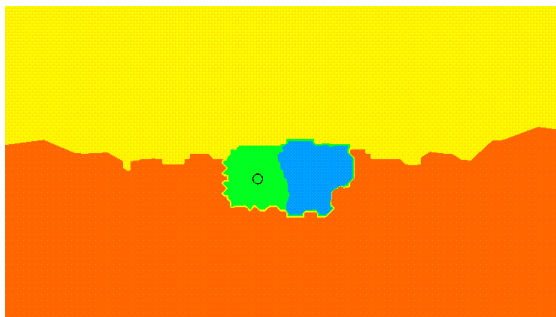


図 9 4CPU の場合の空間分割例 (対称面)

123 万要素における計算時間を図 10 に示す。2CPU の場合に 10.9 時間であるが、4CPU の Ethernet では 6.1 時間、4CPU の Myrinet では 5.1 時間と約半分である。ところが、16CPU になると、Ethernet では 3.7 時間、Myrinet では 1.6 時間と差がつき、さらに 32CPU においては、Ethernet では 4.5 時間と CPU が倍になったにもかかわらず、かえって時間がかかっている結果となった。この時 Myrinet では 1.0 時間と計算時間は短縮している。これは、CPU の増加につれて領域分割が多くなり、CPU 当たりの計算量が減

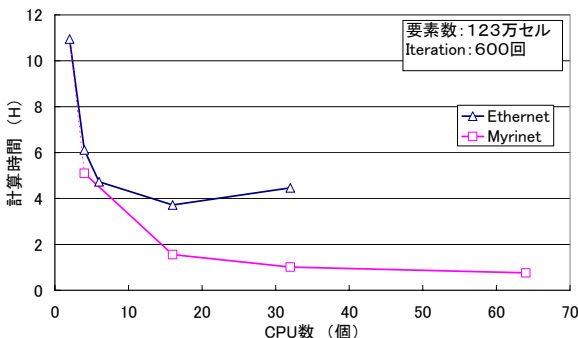


図 10 123 万要素の計算時間

る一方でノード間のデータ通信のオーバーヘッド (計算のために必要なその他の時間) が律速してくるため、通信時の遅延(latency)が大きいと CPU が“遊んで”しまうことによる。Ethernet のように通信の遅延が大きい (100 μ sec \sim) 場合は CPU 増加の効果が無くなることを示す。この場合、Myrinet のような高速ネットワーク装置 (~ 10 μ sec) を用いる事が必要であることがわかる。

また、計算時間から見ると、Myrinet を用いても CPU の増加に対して計算時間が単純に短縮されていない事がわかる。つまり、CPU を 2 倍にしても計算時間が半分 (1/2) にはなっていない。このように、CPU の増加と計算時間の短縮の関係をスケラビリティと言う。スケラビリティがあると言うのは、CPU 数が 2 倍になれば計算速度も 2 倍になる (計算時間 1/2) ということであるが、通信等のオーバーヘッドにより、通常 CPU 数が増えるに従ってスケラビリティは得られなくなる。

2CPU の場合 (ネットワークを用いない) の計算時間を基準に、CPU 増加の場合の計算時間短縮割合の逆数をとったものを図 11 に示す。同時に CPU 増加に比例した計算速度が得られる場合を破線で示す。この破線が理想的な並列計算機の効果である。本図より、図 10 の計算速度の向上が CPU 数の増加に対してどのように得られているかがわかる。Myrinet の場合においても 32CPU 程度から CPU 増加の効果が薄れていることがわかる。同様に 600 万要素の場合を示す。600 万要素の場合は、32CPU 程度までほぼ CPU の増加に比例した計算速度の向上が得られている。これは、各 CPU に割り振られた領域の要素数が多いと、計算時間に対する通信時間の割合が相対的に小さくなり、CPU 増加の効果が維持されるからである。ただし、600 万要素においても 62CPU では理想的には 32 倍の計算速度であるが、実際は約 18 倍と大幅に効率が低下している。

このことから、CFD++ を用いた場合での解析対象のモデル規模 (要素数) によって、高速通信装置 (この場合 Myrinet) を用いてもコストパフォーマンスの点から適切な CPU 数があるということである。

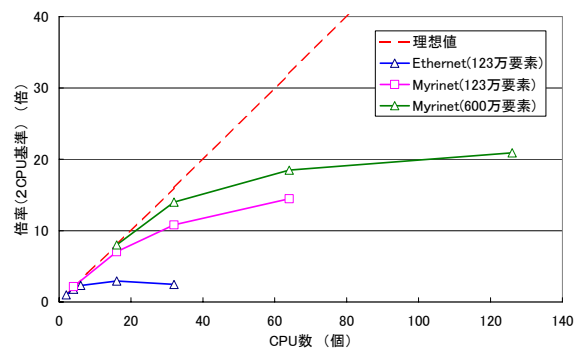


図 11 CPU 数による計算速度 (倍率)

6.2 試作機 KHPC による計算

64bit 試作機である KHPC での結果を、BAKOO との比較で図 12 に示す。同じ 123 万要素、同じ CPU 数では、Ethernet による通信では今回の試作機の方が計算速度は速い結果となった。2CPU で 1.5 倍、4CPU で 1.4 倍程度である。CPU のクロック的には BAKOO が 27% 程速いが、演算性能的には KHPC の性能が高い事がわかる。これは本計算においては 64bit のバス幅の大きさがメモリ空間だけではなく演算性能にも寄与していると考えられる。ただし 16CPU においては、BAKOO の Myrinet による方が速い結果となった。つまり、KHPC においても 32CPU とした場合には、高速の通信装置がなければ 16CPU よりも計算速度が低下することが予想される。参考までに単一 CPU での計算結果も示す。1 CPU では 15.5 時間であり、2CPU の場合の約 2 倍の計算時間であった。

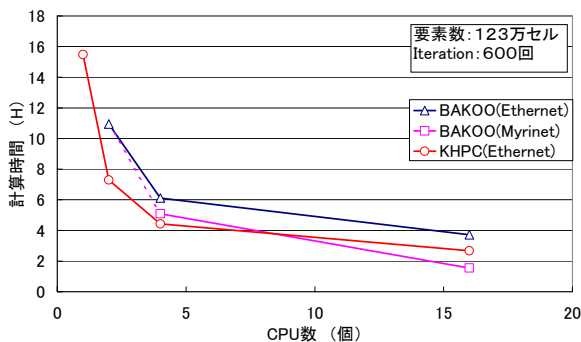


図 12 BAKOO と KHPC の計算速度

7. 結論

本研究により、以下の結論を得ることができた。

- 汎用パソコン部品を用いた自作並列計算機により、市販 CFD ソフトにおいても 10 倍以上の計算時間短縮が可能である事がわかった。
- 64bit CPU は CFD にとってアドレス空間の拡張が可能であり、大規模モデルが扱えるメリットとともに、演算の高速化においても有利である。
- CPU 数が一定数を超えると CPU の増加に対して、かえって計算速度が低下する場合がある。Ethernet に代わる高速通信装置が必須であり、並列化の重要なキー技術の 1 つである。
- “世界最速”と数千 CPU の並列計算機が話題になるが、今回使用したような汎用ソフト、解析モデルの組み合わせでは、スケーラビリティの限界が早く（少ない CPU で）あらわれる。適用課題によりコストパフォーマンスの良いシステムを利用する必要がある。

8. あとがき

今回試作した並列計算機は、電源部など信頼性が要求される部分をサーバ機用とし、RAID5 の 1.5Tbyte のストレージとラックマウントにした以外は普通のパソコンである。ソフト (OS) やモニタがないという事情もあるが、1 ノード (2CPU) あたりの価格としては、社内で解析用に導入する 2CPU Windows マシンの半分程度である。しかし、自作マシンであることから保守の問題については課題が残る。また、ハードは劇的に安くなったとしても相対的にソフトのライセンス費用が並列分だけ増大するという問題もある。色々と課題はあるが、例えば数百時間の計算が数十時間で可能という状況は、シミュレーションの考え方、適用対象を一変させる可能性を含んでおり、当社のような機械メーカーとしても注目せざるを得ない技術であろう。

今後は、本研究をハード、CFD 解析技術の両面から継続する予定である。また、CFD 以外の FEM 等の解析に対する並列計算の有効性についても検証していく予定である。

参考文献

- A.A. Amsden and F.H. Harlow, "The SMAC Method: A Numerical Technique for Calculating Incompressible Fluid Flows", Los Alamos Scientific Laboratory Report, LA-4370.
- S.V. Patankar, "Numerical Heat Transfer and Fluid Flow", Hemisphere Pub, New York (1980).
- S.V. Patankar and D.B. Spalding, "A Calculation Procedure for Heat, Mass and Momentum Transfer in Three-Dimensional Parabolic Flows", Int. J. Heat Mass Transfer, 15(1972) 1787.
- Harten, A., "High resolution schemes for hyperbolic conservation laws", J. Comp. Phys. 49(1983) 357-393.
- Harten, A., "On a Class of High Resolution Total-Variation-Stable Finite-Difference Schemes", SIAM J. Numer. Anal., 21 (1984) 1-23.
- S.R. Chakravarthy and S. Osher, "A New Class of High Accuracy TVD Schemes for Hyperbolic Conservation Laws", AIAA Paper 85-0363 (1985).
- Robert L. McCoy "Modern Exterior Ballistics", Schiffer Publishing Ltd.

○myrinet

<http://www.myricom.com>

○Top500

<http://www.top500.org>

○metacomp

<http://www.metacomptech.com>

○linpack

HPL(High-Performance LINPACK Benchmark)として

<http://www.netlib.org/benchmark/hpl/>

筆者紹介



Atsushi Ito

いとう あつし
伊藤 敦 2002年, コマツ入社. 現在,
特機事業本部 技術研究所所属.



Toshikazu Nakanishi

なかにし としかず
中西 利和 1986年, コマツ入社. 現在,
特機事業本部 技術研究所所属. 工学博士.



Takashi Mizuguchi

みずぐち たかし
水口 隆司 1998年, 株式会社メイテック
入社. 現在, コマツ 特機事業本部 技術研
究所派遣.



Masatake Yoshida

よしだ まさたけ
吉田 正典 現在, (独)産業技術総合研
究所 爆発安全研究センター 所属.
副研究センター長. 工学博士.



Tei Saburi

さぶり てい
佐分利 禎 現在, (独)産業技術総合研
究所 爆発安全研究センター 所属.
特別研究員. 工学博士.

【筆者からのひと言】

10数時間かかるCFDの計算が1時間となる事は驚きであるが、それが誰でも買えるパソコンに手を加えることで可能な事はもっと驚きである。CPU やネットワーク技術の進歩で、家庭でもブロードバンドによるインターネットが楽しめる時代である。CAEの世界もこれらの技術の応用で、かつては高嶺の花であったスーパーコンピューティングによるシミュレーションが比較的手軽に可能な時代になりつつあるという気がする。プレーステーションの(ゲーム機の)CPUを使った激安高性能な並列計算機もあると聞く。面白い時代になったものである。ただ、いくら速くシミュレーションができるようになったからといって、設計としての考え、アイデアがないと何の意味もない。このような道具をうまく使って、より良い製品を早く安く提供できるようにしなければならない。