

技術論文

並列計算機による数値流体解析 (CFD) の高速化 (第 2 報)

High performance parallel computing for Computational Fluid Dynamics (CFD) – Second Report

伊藤 敦
Atsushi Itou
中西 利和
Toshikazu Nakanishi
佐分利 禎
Tei Saburi
久保田 士郎
Shiro Kubota
緒方 雄二
Yuji Ogata

高速通信装置として InfiniBand を搭載し、最大 32CPU を利用可能な並列計算機により、爆発時に発生する飛散物を想定した球形物体の空力特性計算を CFD にて実施した。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。CFD による空力特性計算において高速通信装置の InfiniBand が有効であり、従来の通信装置に比べて最大約 5 倍の計算時間の短縮が図れることを示した。また、「CFD++」を爆風伝播解析に適用し、文献値との比較から TVD スキームによる爆風伝播の予測が有効であることがわかった。

Aerodynamic characteristics of spherical objects assuming flying objects in an explosion were calculated by Computational Fluid Dynamics (CFD) using a parallel computer that is equipped with InfiniBand as a high-speed communication system and that can use a maximum 32 CPUs. 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. InfiniBand is effective in the calculations of aerodynamic characteristics by CFD. The calculation time could be shortened by a maximum of about five times compared with conventional communication systems. And also “CFD++” was used in analyzing the propagation of air blasts and was found that the TVD scheme was effective in forecasting the propagation of air blasts in comparison with experimental values.

Key Words: CFD, 並列計算機, TOP500, 産総研, スーパーコンピュータ, パソコン, スケーラビリティ, CFD++, Linux, CPU, InfiniBand

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 10kg 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。

このような爆破状況の予測において、近年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。しかし、物理現象の数値モデル化の課題とともに、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千万という膨大なメッシュ数となる。そのため、通常利用可能な計算機では数十時間から数百時間の計算時間が予想され、現実的には実施が困難となる場合が多い。一般的にそれら膨大なメッシュ数の計算を実施するには、計算領域を分割し、並列に接続された計算機にそれぞれの計算領域を配分することで計算時間の短縮を図っている。本研究においても第 1 報として、並列計算技術が数

値流体解析 (CFD : Computational Fluid Dynamics) の空力計算に対して有効であり、大幅な計算時間の短縮が図れることを報告した¹⁾。今回は第2報として、産業技術総合研究所爆発安全コアとの共同研究により、新規に導入した高速通信装置「InfiniBand」の並列計算性能の有効性と、爆発時に発生する爆風伝播解析に対してCFDを適用した結果について報告する。

2. 並列計算機について

本研究で用いた並列計算機 (以後、KHPC と呼ぶ) を図1に、KHPCの構成を表1に示す。KHPCは第1報で報告した試作機に加え、16CPU (8ノード) を追加し、さらに大規模なモデルの並列計算に対応できるものとした。また、単純にCPU数を増やした状態で、ネットワークシステムとして Gigabit Ethernet を用いるのでは、通信速度と通信遅延 (レイテンシ) が計算時間に大きく影響を及ぼし、計算時間が大幅に増大する。そこで、レイテンシが小さく、高速・大容量のデータ通信が可能な Infiniband (Silverstorm 社製) を高速通信装置として追加した。

第1報においても示したように、1970年代後半から現在までスーパーコンピュータの処理性能は年代に対して対数で比例して処理性能が向上している。現在、TOP500で定められているベンチマークソフトウェア HPL (High-Performance Linpack Benchmark) により計測した処理性能の世界最速は、米国エネルギー省のローレンス・リバモア国立研究所で使用されている IBM 社製の Blue Gene (280TFLOPS, CPU数 131,072 個) である (2007年6月現在の TOP500 ランキングより)。また、同じベンチマークソフトを用いて KHPC の処理性能を計測したところ、約10年前のスーパーコンピュータ CM-5 (Thinking Machines 社製, CPU数 : 1,024 個) と同等の性能を有することがわかった。



図1 並列計算機 KHPC の外観

表1 並列計算機 KHPC の構成

CPU	AMD Opteron2.2GHz (64bit)
CPU 数	32 (16 ノード)
ハードディスク	データ保存用 1.5Tbyte (RAID 5)
ネットワーク	Gigabit Ethernet, Infiniband
OS ^{※1}	Linux (64bit 対応版)

※1 : Operating System の略

3. CFD ソフトウェアについて

本研究に用いた CFD コードは、第1報で用いた「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^{2,3,4,5,6,7)}。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、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、Intel32bit版、AMD64bit版ともに並列化への対応もされ、さらに、InfiniBand や Myrinet など高速通信装置への対応もされている。

4. 高速通信装置「InfiniBand」の並列計算性能

新規に導入した高速通信装置「InfiniBand」の並列計算性能を「CFD++」を用いて検討した。

図2に並列計算性能のベンチマークテストモデルとした計算モデルを示す。計算モデルは第1報で高速通信装置「Myrinet」の有効性を検討したモデルと同じである。計算は、飛散物が地上を飛翔している条件 (圧力 101,325Pa, 温度 288.15K, 空気密度 1.225kg/m³) にて、マッハ数を 3.0 として計算を行った。

図3に通信方式及び CPU 数と計算時間の関係を示す。通常用いられる Gigabit Ethernet では、16CPU までは計算時間の短縮が図れるが、さらに CPU 数を増やし 32CPU とすると、計算時間が増大する。これは、Gigabit Ethernet においては、CPU 数が少ないうち CPU あたりの問題規模が大きく、全体の処理時間に対してネットワーク通信 (通信速度とレイテンシ (通信遅延) 速度) の影響が小さいが、CPU 数が増えて CPU あたりの問題規模が小さくなると、次第に全体の処理時間に対してネットワーク通信の影響が大きな割合を占めるため、計算時間が増大する。これに対し、InfiniBand は通信速度が速く、レイテンシ速度が小さいため、全体の処理時間に対してネットワーク通信の影響は小さく CPU の増加により計算速度は上

昇する。以上のことから、高速通信装置「InfiniBand」は計算時間の短縮に非常に有効であることがわかった。

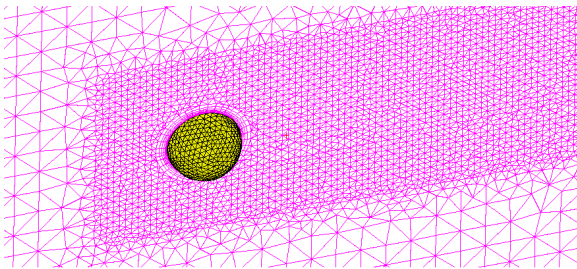


図2 飛翔体空力計算モデル

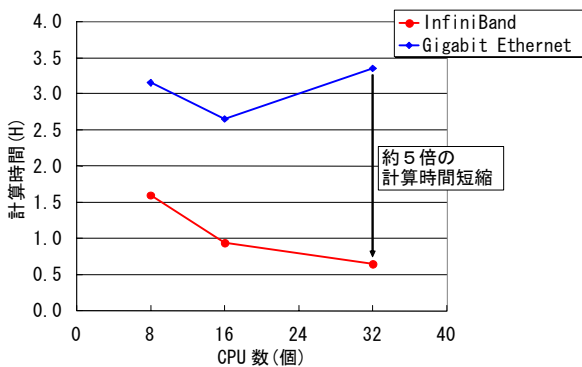


図3 通信方式及びCPU数と計算時間の関係

5. 爆風伝播解析

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つは第1報で検討した、“爆発時に発生する飛散物がどこまで飛ぶか”という飛散物の空力特性に関する問題である。もう1つは、“爆発時に発生する爆風が周囲にどのような影響を及ぼすか”という爆風伝播に関する問題である。ここでは、CFD++を用いて以下の2点に関する検討を行い、その検討結果について述べる。

- ①爆風伝播状況
- ②CFDによる数値計算データと文献値データの比較

5.1 計算条件

計算モデル空間の全体図を図4に、爆源近傍を図5に示す。爆源として7.5kgのTNT火薬に相当する高压空気源を地上18cmに設置した。また、伝播する爆風を評価するため、爆源から半径1, 2, 3, 4mの距離(換算距離)で爆源から1mの高さに爆風観測点を設置し、爆風圧の時間変化を計算した。爆薬の爆発による爆風圧は、ホプキン

ソン則(三乗根法則)といわれる同じ爆風圧を与える距離と質量の関係により、換算距離 R_s を用いて評価することができる⁸⁾。換算距離 R_s は以下の式により求める。

$$R_s = \frac{R}{M^{1/3}}$$

ここで、 R_s は換算距離、 R は爆心からの距離、 M はTNT火薬相当の薬量である。また、本研究に用いた条件における実距離と換算距離の関係を表2に示す。

計算空間は爆源中心を原点とし、x, z各方向に0~18m, y方向に-0.18~17.82m(地上面から境界上面までの高さが18m)の範囲とした。また、空間対象面としてxy平面, yz平面を2面持たせ、地上面はスリップ条件、その他は流出の境界条件とした。

格子は直方体のヘキサメッシュとして空間分割を行った。円筒空間の外周付近においてはヘキサメッシュの変形が著しくなるが、評価対象の爆風圧の計測点に対して十分外側の領域でありメッシュのひずみによる影響は小さい。また、爆源近傍においては、1辺6.5cmの等間隔直行格子となるように空間分割を行った。その結果、今回の計算に用いる総セルサイズは約1000万メッシュとなる。

CFD++では独立変数として基本的に圧力Pと温度Tを使用する。そのため、高压空気源は等容爆発を仮定して $P=2.8\text{GPa}$, $T=5982\text{K}$ とし、周辺大気は $P=100\text{kPa}$, $T=290.8\text{K}$ とした。

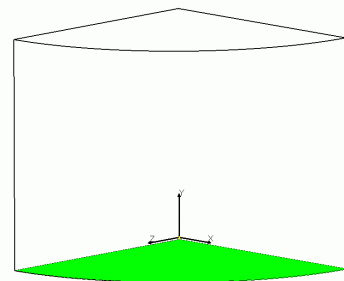


図4 計算空間全体

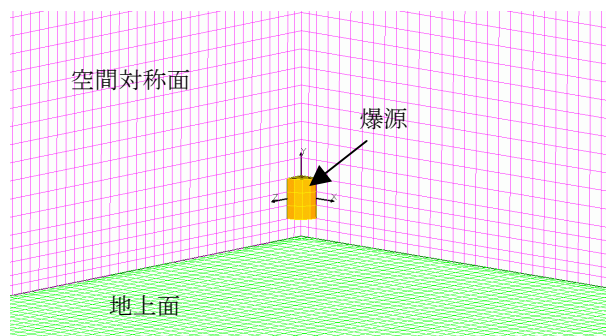


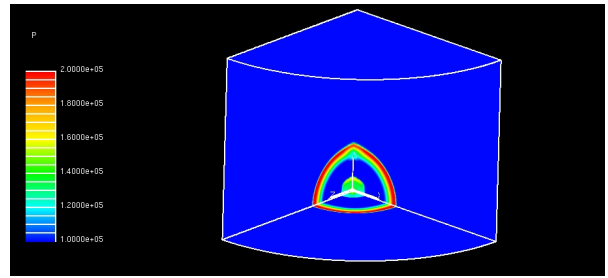
図5 計算空間爆源近傍

表2 実距離と換算距離の関係

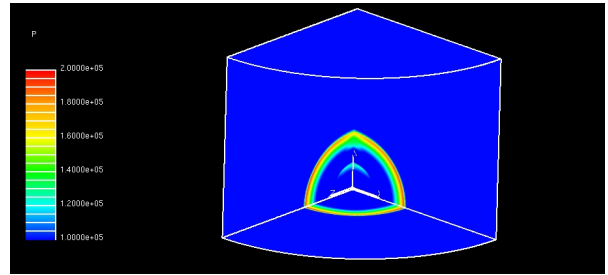
実際の距離 m	換算距離 m/kg ^(1/3)
1.95	1.00
3.91	2.00
5.86	3.00
7.82	4.00
10.00	5.12
15.00	7.67
18.00	9.21

5.2 計算結果

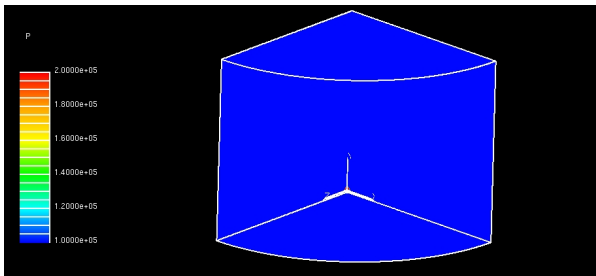
シミュレーション結果として爆風が伝播する様子を圧力値で可視化したものを図6に示す。爆源より半球状に広がる爆風はすぐに地面に衝突して、距離による圧力の減少はあるものの、比較的高圧を維持しながら空間を広がっていく。また、上空に広がる爆風に追隨して、地面からの反射波も上空に広がっていく様子が捉えられている。



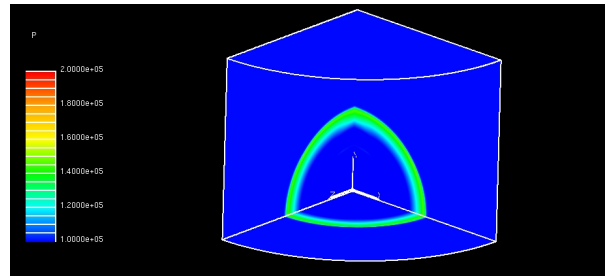
④時間 t = 5.116 msec



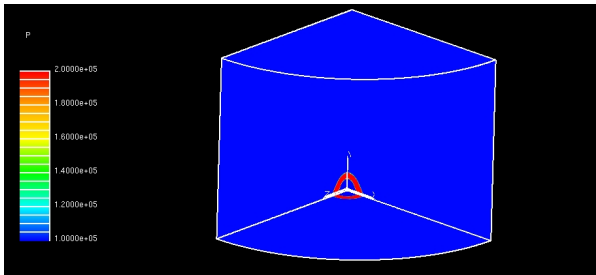
⑤時間 t = 7.458 msec



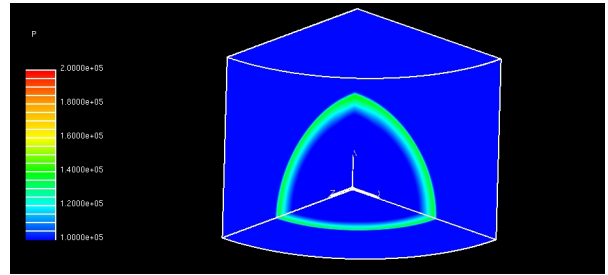
①時間 t = 0.027 msec



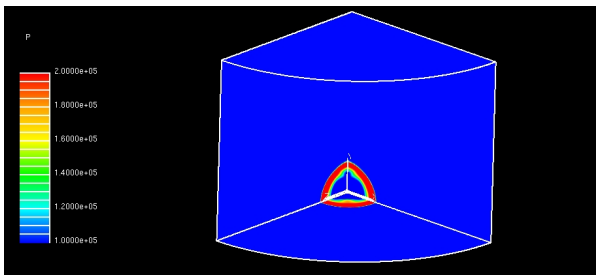
⑥時間 t = 13.314 msec



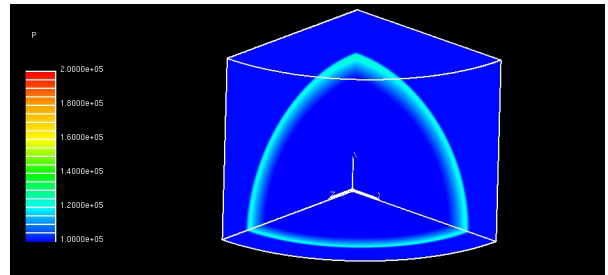
②時間 t = 0.520 msec



⑦時間 t = 16.437 msec



③時間 t = 1.993 msec



⑧時間 t = 26.978 msec

図6 爆風圧伝播時間履歴

各観測点での爆風圧の時間履歴を図7に示す。横軸は起爆（TNTの燃焼時間は含まない）を基準とした爆風圧の伝播時間であり、縦軸は爆風圧である。観測点までの距離は薬量により正規化した換算距離としている。距離により爆風圧の伝播の遅れや、ピーク圧力の低下が見られる。

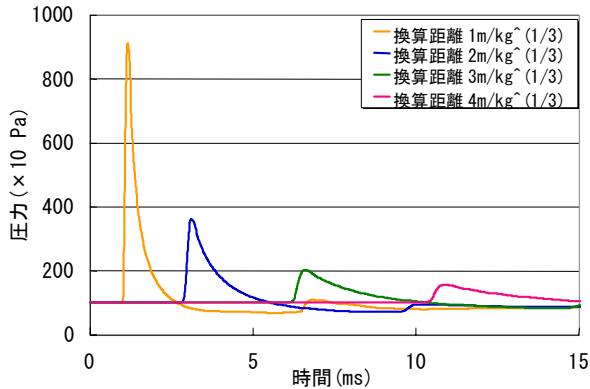


図7 各爆風観測点での爆風圧時間履歴

5.3 CFDと文献値との比較

図8に圧力伝播距離によるピーク圧力の変化を示す。横軸は薬量で基準化した換算距離、縦軸は各観測点で計測したピーク圧力である。また、図中には今回の計算結果とBAKERによる結果⁹⁾を元にした結果を比較している。また、本研究でのシミュレーションは地表面近くでの爆発であり、BAKERによる空中爆発データを地表面爆発相当のデータに変換した。

今回のCFDと文献値を比較したところ、換算距離 $1 \text{ m/kg}^{(1/3)}$ 以下の爆源近傍では大きく圧力ピーク値がずれているが、換算距離 $1 \text{ m/kg}^{(1/3)}$ 付近からBAKERによる結果に漸近し、換算距離 $2 \text{ m/kg}^{(1/3)}$ 以上ではほぼ一致している。BAKERによる結果は、実際の実験に基づくため、爆源近くでは爆轟ガスなどの影響が出ておりピーク圧力が高くなっていることが考えられる。一方、CFDでは、高压ガスの伝播のみの計算であるので、実際の爆轟ガスなどの影響は考慮されない。そのため、CFDにおいては爆源付近ではピーク圧力が低下したものと考えられる。また、換算距離 $2 \text{ m/kg}^{(1/3)}$ 以上では文献値とCFD結果はほぼ一致しており、CFDによる爆風圧伝播が精度よく計算されていることがわかる。

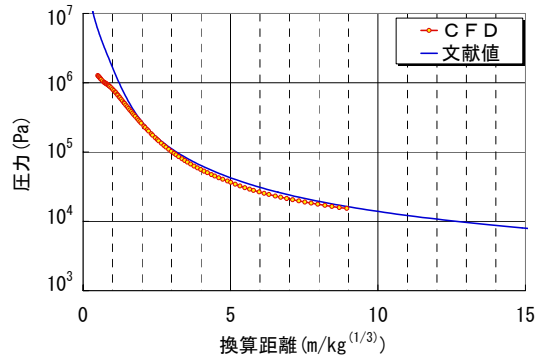


図8 圧力伝播距離によるピーク圧力の変化

6. 結論

本研究により、以下の結論を得ることができた。

1) 汎用パソコン部品を用いた自作並列計算機と市販CFDソフトの組合せにおいて通常の Gigabit Ethernet よりも高速通信装置の InfiniBand を用いることで約5倍の計算時間の短縮が可能であることがわかった。

2) 爆風伝播解析において、CFD++で採用している TVD スキームによる流体計算が、文献値と比較しても良好な結果が得られ、爆風伝播解析に有効であることがわかった。

7. あとがき

今回試作した並列計算機により、計算時間が飛躍的に短縮でき、設計ツールとして十分に利用できるレベルになってきた。今回はCFDをベンチマークとしているが、陽解法FEMでも同じように計算時間の短縮が図れることがわかってきた。今後は、本技術を用いて流体解析であるCFDと剛体運動の連成計算や、非線形FEMなどに適用し、複雑な物理現象の把握についても取り組んでいく予定である。

参考文献

- 1) 伊藤敦, 中西利和, 水口隆司, 吉田正典, 佐分利禎, “並列計算機による数値流体解析(CFD)の高速化”, コマツ技報(2005) Vol.51, No.156, 8-14
- 2) 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.
- 3) S.V. Patankar, “Numerical Heat Transfer and Fluid Flow”, Hemisphere Pub, New York, (1980).
- 4) S.V. Patankar and D.B. Spalding, “A Calculation Procedure for Heat, Mass and Momentum Transfer in

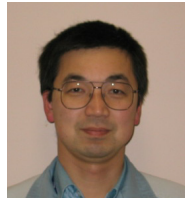
Three-Dimensional Parabolic Flows”, Int. J. Heat Mass Transfer, 15(1972) 1787.

- 5) Harten, A., “High resolution schemes for hyperbolic conservation laws”, J. Comp. Phys. 49(1983) 357-393.
 - 6) Harten, A., “On a Class of High Resolution Total-Variation-Stable Finite-Difference Schemes”, SIAM J. Numer. Anal., 21 (1984) 1-23.
 - 7) S.R. Chakravarthy and S. Osher, “A New Class of High Accuracy TVD Schemes for Hyperbolic Conservation Laws”, AIAA Paper 85-0363 (1985).
 - 8) B. Hopkinson: British Ordnance Board Minutes, 13565, 1915.
 - 9) W.E. Baker, Explosions in Air, University of Texas Press, Austin and London (1973).
- Top500
<http://www.top500.org>
 - metacomp
<http://www.metacomptech.com>
 - linpack
HPL(High-Performance LINPACK Benchmark)
<http://www.netlib.org/benchmark/hpl/>
 - Silverstorm
<http://www.infinicon.com/>

筆者紹介



Atsushi Itou
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
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.



Tei Saburi
佐分利 禎 現在, (独)産業技術総合研究所 爆発安全研究コア所属. 特別研究員. 工学博士.



Shiro Kubota
久保田 士郎 現在, (独)産業技術総合研究所 爆発安全研究コア所属. 研究員. 工学博士.



Yuji Ogata
緒方 雄二 現在, (独)産業技術総合研究所 爆発安全研究コア所属. 研究チーム長. 工学博士.

【筆者からのひと言】

従来, 並列処理はスーパーコンピュータなどで行っており, あまり身近なものではなかった. 今回試作した KHPC は RAID や電源, 通信装置こそサーバ用ではあるが, ほぼ一般向けの汎用品の組合せである. また, 最近では1プロセッサに2個のCPUコアが搭載されたものがパソコンとして販売され, PLAYSTATION3では1プロセッサに9個ものCPUコアが搭載されており, 並列処理はより一般的なものとなり身近ところに使われている. 設計ツールとしての並列計算機は, CPU数の増加や通信装置の性能向上により, さらに高速化されていくものと考えられるが, それにあわせてこれらのツールを有効に活用するための設計者の思考もより早く回転させ, いい商品を安く早く提供できるようにしていく必要がある.