学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 公募型共同研究 平成30年度採択課題
10th Symposium
Joint Usage / Research Center for Interdisciplinary Large-scale Information Infrastructures
jh180035-NAH

青木尊之（東京工業大学 学術国際情報センター）

界面に適合するAMR法を用いた非圧縮性気液二相流の完全陽解法計算とGPU実装

研究背景と目的

水と空気が入り混じるような気液二相流は、流体力学において未解決の問題を多く含む分野として認識されている。その数値解析は、同じ物理条件において計算格子を細かくすると新たな水滴や気泡が発生し、数値計算の解の収束性が十分に満たされていない。しかし、格子幅を1/2にすると、均一な格子を用いた3次元計算では格子点数が8倍、（安定性の制限から）時間刻みを1/2にしなければならず、16倍の計算資源が必要になる。また、非圧縮性流体解析では、一般に非圧縮性条件を満足させるために圧力ポアソン方程式を線形行列解法で解き、その圧力により速度を修正する半陰解法が用いられている。水と空気のような気液二相流では、密度比が1000倍近くになり、密度が係数行列の非ゼロ要素に含まれるために極めて悪条件の疎行列となる。大規模になると、この疎行列計算はマルチグリッド法などの前処理を用いても反復計算の収束性が非常に悪化し、半陰解法を用いた手法では、100億点以上の高解像度気液二相流解析は絶望的と言える。それにも関わらず、液体燃料の噴射、オイル攪拌、燃料電池内の排水など、さまざまな分野で高解像度の気液二相流解析は必要とされている。

研究計画

高解像度の気液二相流計算をエクサフロップスのスパコンの候補であるNVIDIAのGPUを用いたスパコンで実装し、検証を行う。GPUはメモリ構造がCPUの場合と大きく異なりメモリ階層が多く、アドレスが固定されているためにAMR法の実装は困難とされているが、アプリ側でGPUのメモリの管理まで行うことにより、これまで計算されたことがない液膜等の大規模な気液二相流計算を実現する。

- 弱圧縮性近似に基づく完全陽解法による3次元GPU気液二相流計算コードと半陰解法の計算コードを用いてダム崩壊計算や気泡上昇計算を実行し、計算結果の詳細な比較を行う。
- 気液界面を高解像で計算するために、8分木による適合格子細分化法を導入したGPU実装を行い、デフラグメンテーションまでアプリ内まで行うことで実行性能の向上を図る。
- GPUのSharedメモリを用いたTemporal Blockingを導入し、デバイス・メモリへのアクセスを低減させることで演算密度を上昇および複数GPU時のスケーリング向上を図る。
- MPF法によるトポロジー最適化による動的領域分割(課題番号:jh180034)のプロトタイプを適用し、複数GPUによるAMR法を適用して初めて可能になる液膜の大規模シミュレーションを実行し、液膜の安定性やマランゴニ対流、液膜の破れ方などを明らかにする。

研究グループ

代表者	青木 尊之	（東京工業大学）
副代表者	白崎 実	（横浜国立大学）
課題参加者	小野寺 直幸	（日本原子力研究開発機構）
課題参加者	杉原 健太	（東京工業大学）
課題参加者	黄 遠雄	（東京工業大学）
課題参加者	渡辺 勢也	（東京工業大学）
課題参加者	長谷川 雄太	（東京工業大学）
課題参加者	松下 真太郎	（東京工業大学）
課題参加者	外丸 慎之介	（東京工業大学）

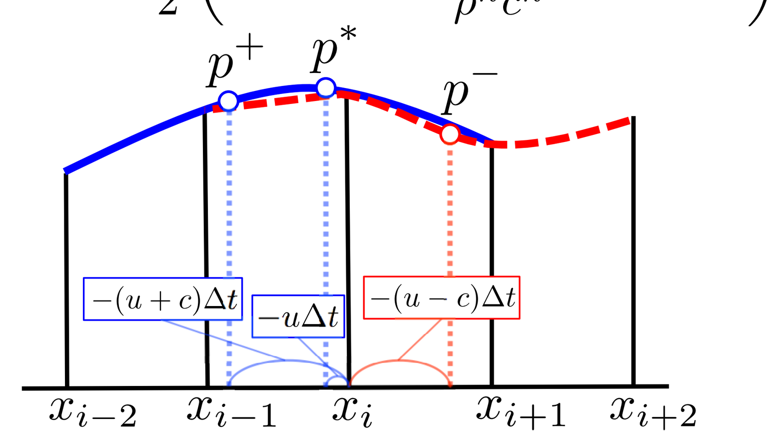
弱圧縮性近似に基づく完全陽解法計算

大きな課題であった連立一次方程式の疎行列解法の収束性に対して、ポアソン方程式を解かない完全陽解法の開発を進めている。非圧縮性流体としてみなされる領域（低マッハ数）において、僅かな圧縮を許容することにより完全陽解法の計算スキームの開発に成功している。 ナビエ・ストークス方程式をオイラー方程式と粘性項・重力項・表面張力項に分離し、オイラー方程式には方向分離解法を導入する。

特性線解法に基づく定式化

$$p^{n+1} = \frac{1}{2}\left(p^+ + p^- + \rho^n c^n (u^+ - u^-)\right)$$

$$u^{n+1} = \frac{1}{2}\left(u^+ + u^- + \frac{1}{\rho^n c^n}(p^+ - p^-)\right)$$

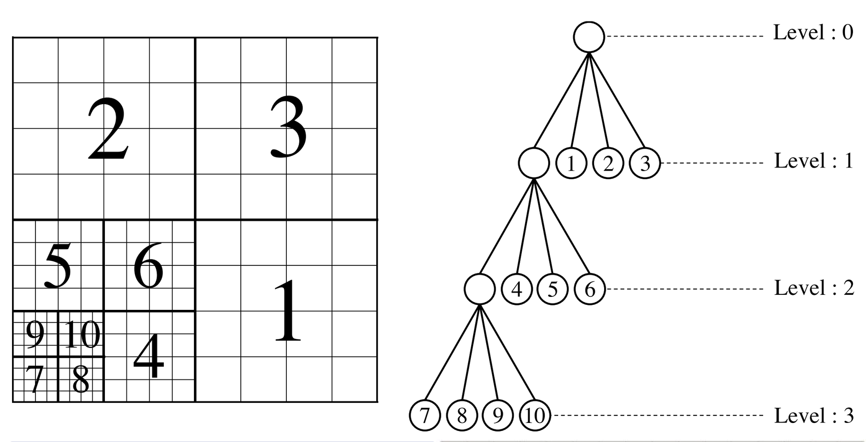


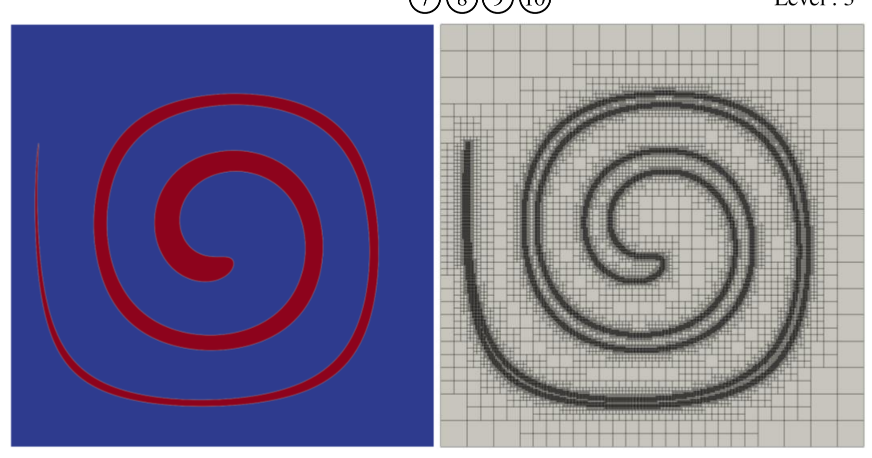
各次元に特性線法を適用することで、高い空間精度と時間精度を1段で計算可能な演算効率の非常に高いセミ・ラグランジュ法を適用することができる。

界面に適合する AMR法

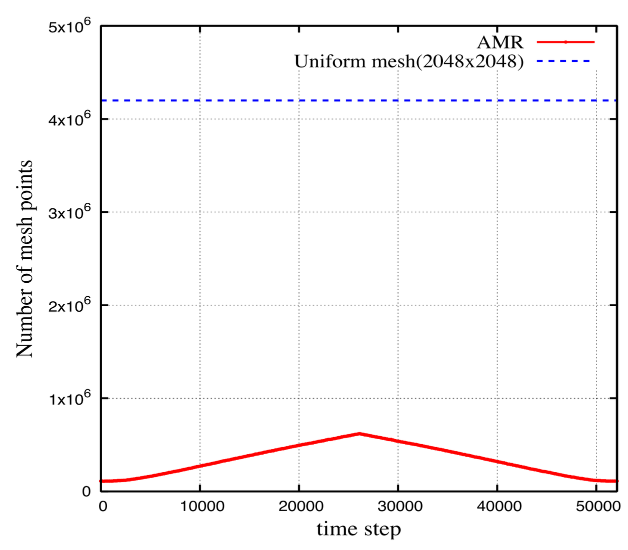
木構造に基づく適合細分化格子

気液二相流計算では、計算領域中で気液界面などでは他の領域より圧倒的に高解像で計算する必要がある。GPUで効率的に計算するために直交格子を木構造に基づき再帰的に細分化するAMR法を適用する。二次元の場合一つの葉(リーフ)に対応する領域が細分化されると4つのリーフが生成される四分木のデータ構造となる。3次元の場合は八分木となる。GPU計算を効率的に行うために，リーフを 8×8×8 や16×16×16格子とし、メモリアクセスの局所的な連続性を担保する。





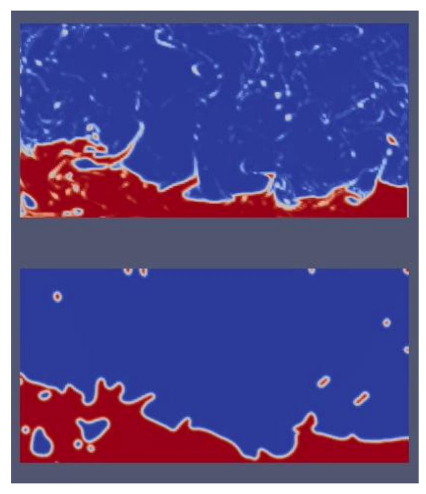
界面移流のベンチマーク問題の一つであるSingle vortex問題をCPUで計算し、AMR法の効果を検証した。界面の符号付距離関数を元に格子細分化を行うことで時間と共に動く界面近傍に常に細かい格子を割り当てることが可能である。右中図のように、界面近傍に非常に細かい格子が集まっている。黒線はリーフ境界線を表しており、各リーフには4×4の格子が含まれている. 最粗格子64×64均一格子相当、最細格子2,048×2,048均一格子相当となるような格子細分化を行い、均一2,048×2,048格子と比較して1/12.3の格子点数削減、9.26倍の計算時間短縮を達成した。



保存形Allen-Cahn方程式による界面捕獲

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\boldsymbol{u}\phi) = \bar{\gamma}\left[\epsilon \nabla \cdot (\nabla \phi) - \nabla \cdot \left\{\phi(1-\phi)\frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|}\right\}\right]$$

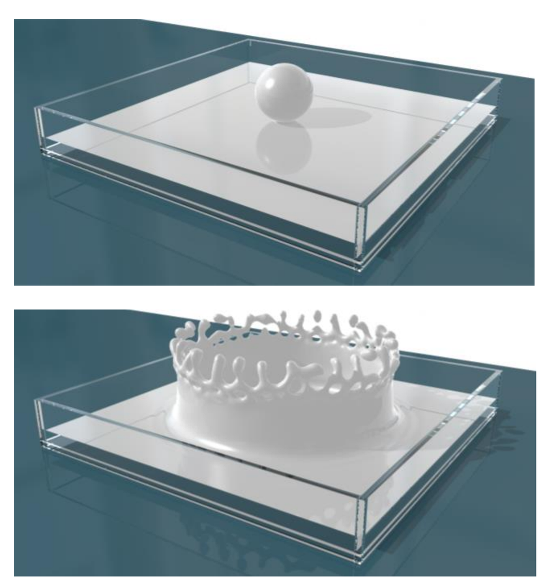
定常状態がtanh関数で表される Diffuse Interface Modelの一種である保存形Phase-Field法を用いて界面を表現する。広く用いられているVOF法と異なる点として，左辺の流束項に加えて右辺の拡散・逆拡散の効果を持つ項を解くことによって、界面プロファイルを一定に保つ効果が働き，過剰な界面拡散を防ぐ。



上側：THINC/WLIC法を用いたダム崩壊計算
下側：保存形Allen-Cahn方程式を用いたダム崩壊計算

ミルククラウン形成過程のシミュレーション

液相と気相にはそれぞれミルクと空気の物性値を用いて厚さ0.9mmの液膜に直径D=4.8mmの液滴を衝突させ、ミルククラウン形成過程を計算した。

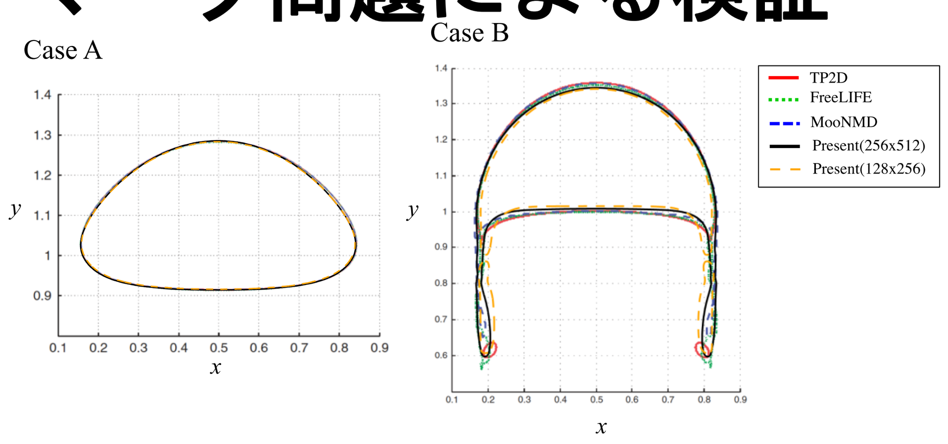


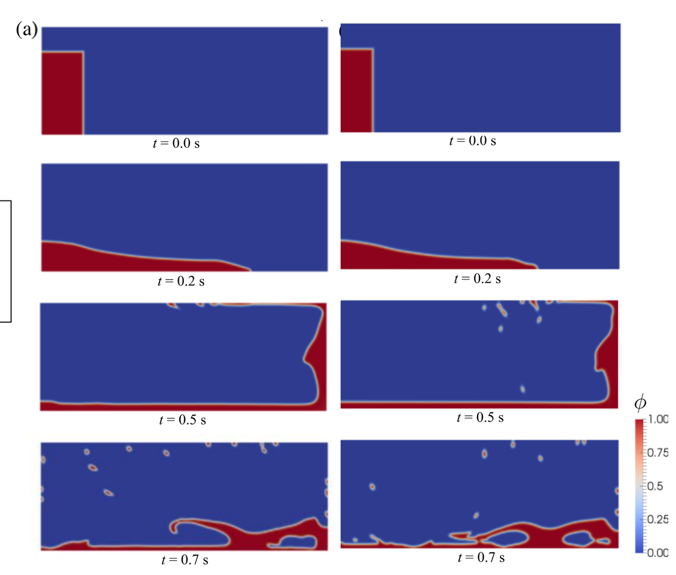
計算領域5.5D×5.5D×2.0を格子数297×297×107で計算した。初期速度2.8m/sを重力加速度と同じ向きに設定した。

クラウン状の界面生成を再現することに成功し、非圧縮性ソルバーの結果および実験結果との定性的な一致を確認した。

非圧縮性二相流計算ベンチマーク問題による検証

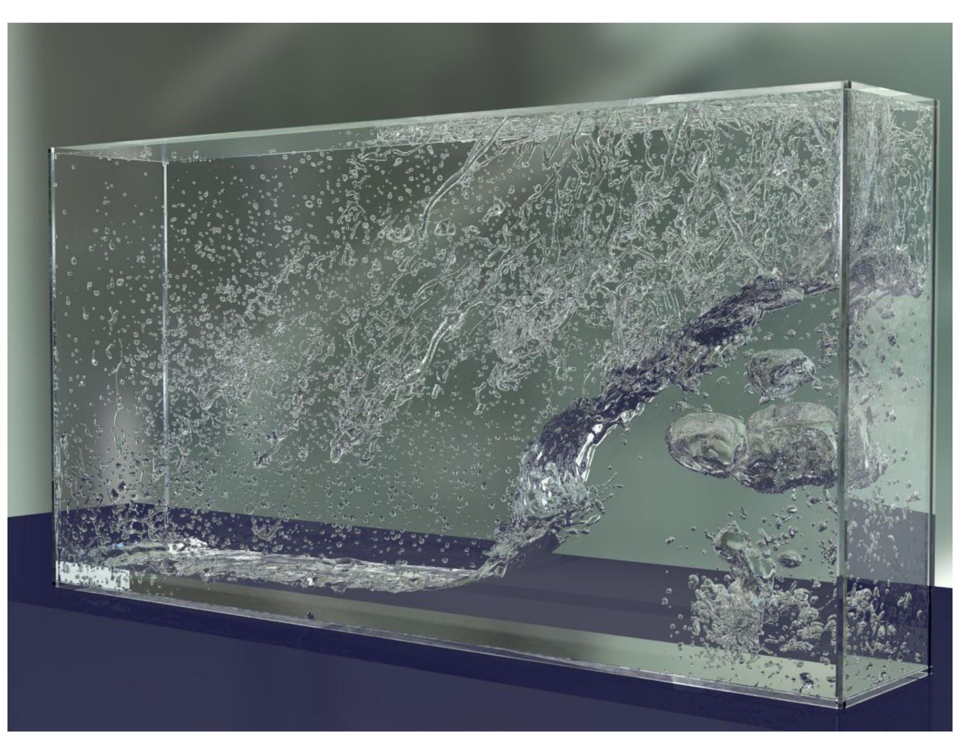
弱圧縮性気液二相流ソルバーが非圧縮性領域の二相流計算へ適用可能であるか確認するため、気泡上昇問題、ダム崩壊計算といったベンチマーク問題を解いた。2次元/3次元の気泡上昇計算やダム崩壊計算で非圧縮性ソルバーの結果および実験値とよく一致する結果を得ており、弱圧縮性近似に基づく気液二相流計算手法が非圧縮性領域の気液二相流に対して十分な精度で計算可能であることを確認した。

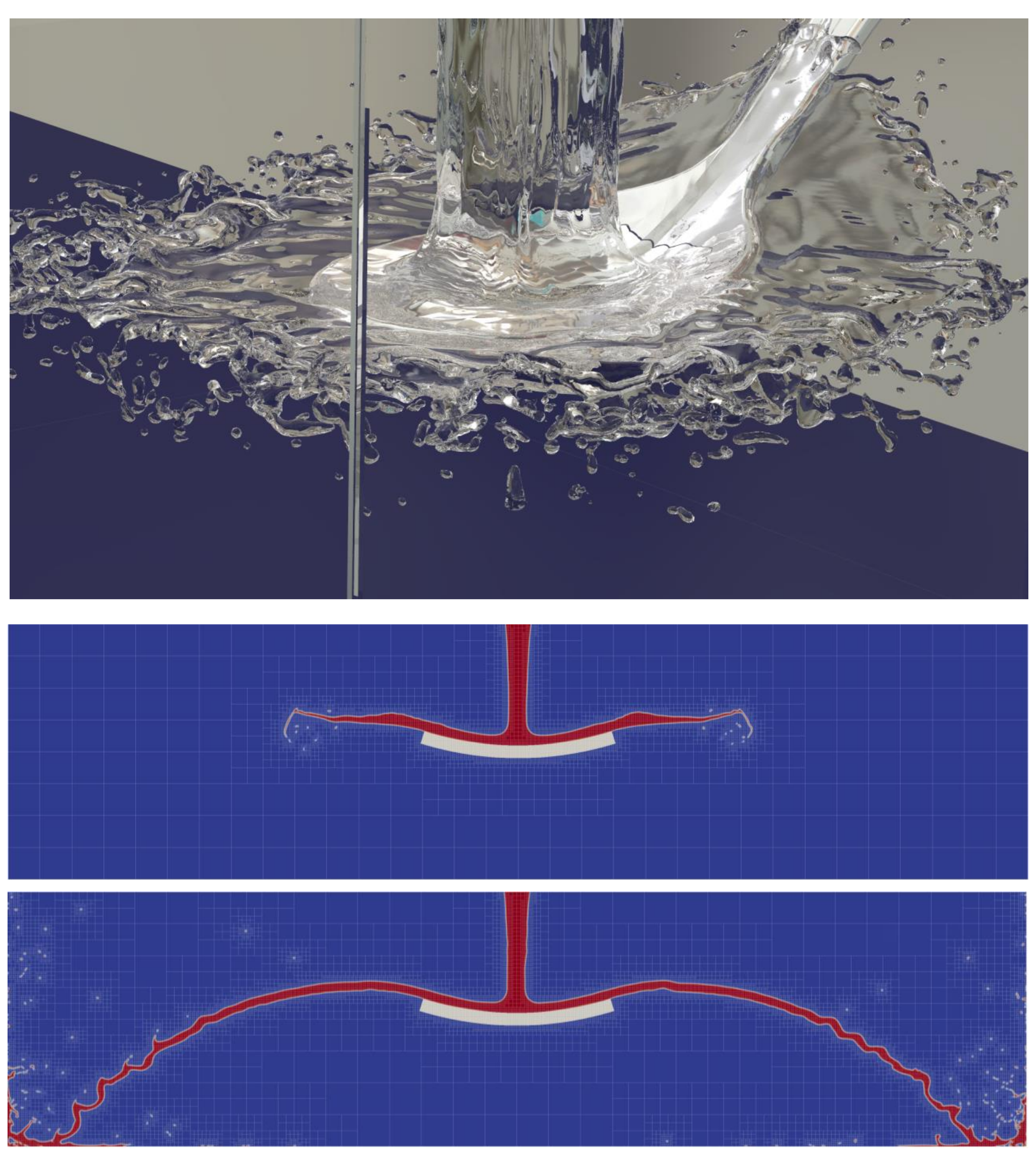




濡れた床へのダム崩壊

16GPUによる1,152×576×192の1.27億均一格子を用いた濡れた床へ浸水するダム崩壊計算。浅い水面を設定すると水面を巻き込みながら砕波を生じ、非常に激しい流れとなる。ポアソン方程式を解かずにこのような非常に激しい気液二相流計算を安定に実行し，非常に細かい液滴や気泡を捉えることができた。



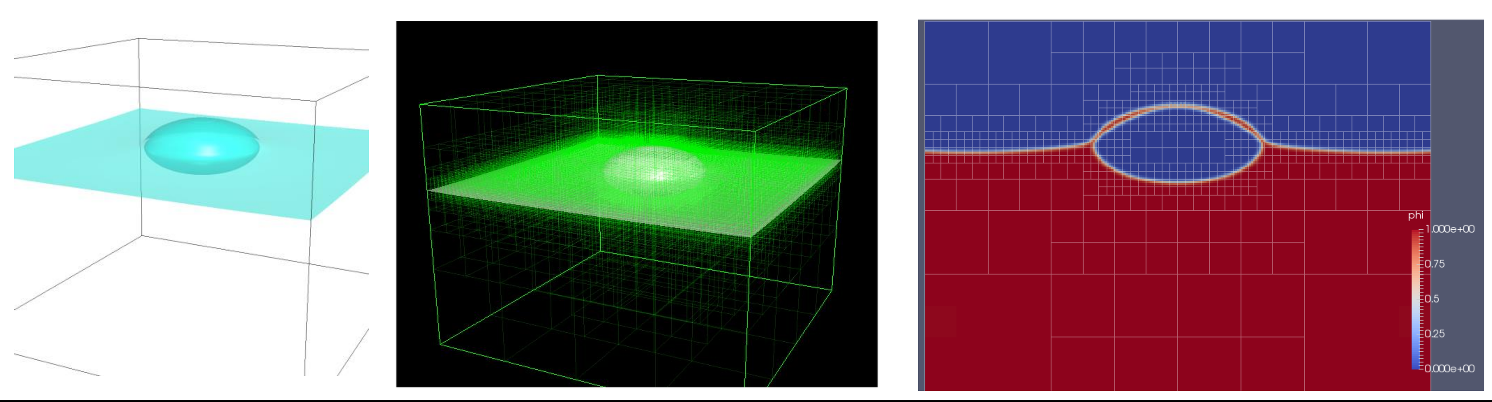


スプーンの衝突による液膜形成

弱圧縮性流体解析手法とAMR法を組み合わせ、スプーンを模した物体形状に水を衝突させた流れ計算をCPUで実行した。計算領域16cm×4cmに重力のもとで流速0.5m/sで水を流入させた。最も細かい格子を均一格子で解像した場合2048×512格子に相当する。非常に細かい水滴が飛散するような問題でも適切に格子が集まっており、少ない格子点数で液膜の解像している。

界面で液膜を形成する気泡上昇

気泡が上昇し、液面上で液膜が生成されるシミュレーション。日常でよく目にする液面上での液膜の生成・維持という現象を流体シミュレーションで実現するためには、非常に薄い液膜を解像するために非常に細かい格子が必要となる。AMR法を用いて界面に細かい格子を集めることで薄い液膜の生成を再現した。最も細かい格子を均一格子で計算した場合256×256×192格子に相当する。



JHPCN 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 第10回シンポジウム
Japan High Performance Computing and Networking plus Large-scale Data Analyzing and Information Systems
2018年7月12日, 13日
THE GRAND HALL（品川）