GPU を用いた固体粒子を含む固気液三相流の大規模シミュレーション*

Large-Scale Simulation of Gas-Liquid-Solid Multiphase Flow on GPU Cluster

小野寺 直 幸** 青 木 尊 之**
ONODERA Naoyuki AOKI Takayuki

Abstract Numerical simulation of gas-liquid-solid interaction is one of the most challenging themes in CFD (Computational Fluid Dynamics). In order to understand the detail of the interface deformation and separation, it is necessary to carry out high-order accurate and large-scale CFD simulations. We have developed a CFD code based on a novel interface capture method, AMG-BiCGSTAB solver, 5th-order WENO scheme, and immersed boundary method (IBM). The code is written in CUDA, and the GPU kernel function is tuned to achieve high performance and good scalability on the TSUBAME supercomputer. It has become possible to carry out large-scale multiphase flow simulations. In a violent air-water flow, small splashes by collision of a particle are described clearly, and good performance scalability is also shown for multi-GPU computing.

Keywords: GPU, Large-scale simulation, Fluid-structure interaction, Multiphase flow

1. 緒 言

現在、様々な工学分野において固気液三相流の直接計算の必要性が高まっている。物体との相互作用による気液界面の変形・分離を高精度に解析するためには、非常に多くの計算資源と計算時間が必要であり、大規模高速計算が必須となる。GPU (Graphics Processing Unit) は非常に高い演算性能と広いメモリバンド幅を持ち、GPU を利用した科学技術計算を行う事で、今まで困難であった大規模計算が可能となる[1,2]。一般的に、複雑境界を取り扱う数値計算ソフトウェア等[3,4]においては、物体境界形状と格子配置が一致する非構造格子を用いた解析が広く行われている。しかし、非構造格子を用いた計算では、メモリアクセスが不連続であり、メモリの間接参照が必要となるため、計算効率の低下が懸念される。さらに、移動物体を含む問題においては、計算格子の再生成の必要があり、大きなオーバーヘッドを伴う。

格子配置が物体の形状に依存せず、直交格子点上に複雑物体境界が表現可能な手法として、Immersed

Boundary 法 (IBM) が開発されてきた[5,6]。IBM では、局所的なメモリ参照を行うため、計算効率が良く並列計算にも適している。

本研究では、IBM を適用した気液二相流の解析手法に対して、GPU を用いた高速化技術を導入する事で、高効率な大規模並列計算手法を提案する。東京工業大学のスーパーコンピュータであるTSUBAMEを用いた、大規模並列計算の性能測定を行うと共に、固気液三相流の連成解析を行い、今まで解析が困難であった大規模解析を実施する。

2. 気液二相流の解析手法

2.1 支配方程式および物理量配置

界面捕獲法を用いた気液二相流の解析手法として、非圧縮性 Navier-Stokes 方程式に対して、気相と液相で物性値を切り替える一流体モデルを用いた。計算中では気液両相は区別されず、単相の流体と同様に扱われる。気液界面の識別関数には流体率を、物体の識別関数には固体表面からの符号付き距離関数を用いて解析を行った。計算格子は

* 2013.11.7 受付

** 東京工業大学学術国際情報センター 〒152-8550 東京都目黒区大岡山 2-12-1-i7-3
TEL: (03)5734-3575 FAX: (03)5734-3276 E-mail: onodera@sim.gsic.titech.ac.jp

等間隔直交格子を設定し、速度等のベクトル量はセル境界面上に定義し、圧力・流体率・符号付き距離関数などのスカラー量はセル中心に定義する Staggered 変数配置を用いた。物体を符号付き距離関数により表現する事で、直交格子を用いた解析が可能となり、高い計算効率と並列化効率を達成できる。

2.2 空間離散化手法

計算手法として、自由界面の捕獲手法は気液界面の変形・分離を精度良く捉えることが可能な THIN/WLIC 法[7]を、速度場の計算手法として二相流解析において実績のある丹ら[8]の解析手法を採用した。具体的には、速度等の移流項には、安定かつ高精度な 5 次精度 WENO 法[9-11]を、非移流には 2 次精度の中心差分法を、表面張力項には Brackbill の CSF(Continuous Surface Model) モデル[12]を用いる。本研究では、それらの手法に対して複雑な物体形状と物体の運動が表現可能な IBM [5,6]を適用することで、固気液三相流の解析手法を構築した。

本研究において、すべての物理量の時間発展計算は GPU 上にて行われ、反復計算が必要となる圧力 Poisson 方程式に対しては、みずほ情報総研株式会社の AMG-BiCGSTAB を GPU へ拡張したものを用いることで高速化を行った。

2.3 IBM による物体表現手法

IBM 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、Fig. 1 の様に物体境界($\phi=0$)が計算セル内にある場合を考える。ここで、ベクトル $\vec{n}$ 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。速度の境界条件として Dirichlet 境界条件が与えられ、物体内の物理量(q_s)は、

$$\frac{|\phi_f|q_s + |\phi_s|q_f}{|\phi_f| + |\phi_s|} = q_b \quad (1)$$

を満たす。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、

$$q_s = q_f \quad (2)$$

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。

2.4 時間積分法

非圧縮性流体の解析手法として、速度の時間発展と圧力 Poisson 方程式を分離した SMAC 型の解法を用いた。時間積分法として、3 段 3 次精度の TVD Runge-Kutta 法を採用し、各サブステップ中で、圧力 Poisson 方程式および物体の移動計算を行うことで連続の式が満たされ、高精度な解析が可能となる。

Fig. 1 Definitions of fluid and solid cells in the present immersed boundary method.

3. NVIDIA CUDA

3.1 GPU を用いたカーネル計算

科学技術計算を NVIDIA 製の GPU で行う場合、C 言語を GPGPU 用に拡張した CUDA[13,14]を用いてプログラムを開発する必要がある。GPU の特徴として、1 チップ数千個もの CUDA Core を搭載する SIMD 型の演算器を搭載しており、非常に高い演算性能と広いメモリバンド幅を持つ。CUDA で数値計算を行う場合、計算はスレッドという単位で実行され、スレッドはスレッドブロックとグリッドという単位で階層的に管理される。Fig. 2 にグリッドとブロックの概念図を描く。グリッドの中に基盤の目のようにブロックが配置されており。ブロックの中にスレッドが管理されている。GPU 演算を高効率で行うためには、局所的で例外処理のないデータアクセスとマルチスレッドのデータ並列処理が必要となる。本計算では、メモリ配置が連続的な x 方向と、次に連続的な y 方向に CUDA のブロックを設定し、z 方向は for ループを回すことでステンシル計算を行った。

3.2 複数 GPU を用いた並列計算

複数 GPU を用いた並列計算では、GPU 間のデータ転送が必要となる。CUDA 4.0 の仕様では計算機ノードをまたぐ GPU 同士の直接の通信を行う事ができないため、GPU→CPU、CPU→CPU、CPU→GPU のデバイス・ホスト間とホスト・ホスト間の MPI を用いた 3 ステップのデータ転送が必要となる。GPU 間のデータ転送の概略図を Fig. 3 に示す。本計算では、並列化手法として各 GPU に MPI のプロセスを 1 つ割り当てる Flat MPI による並列化を行った。

Fig. 2 The hierarchy of grids, blocks and threads in CUDA.

Fig. 3 MPI data transfer between GPUs.

4. TSUBAME 2.5 の GPU を用いた性能測定

東京工業大学のスパコン TSUBAME 2.0 は、4,000 個以上の GPU(NVIDIA TESLA M2050) を搭載し、LINPACK ベンチマークにおいて 1.192 PFLOPS を達成している[15]。更に、2013 年 9 月に GPU を NVIDIA K20X へと更新することで、TSUBAME 2.5 の理論演算性能は、単精度において 17 PFLOPS、倍精度で 5.7 PFLOPS となる。本章では、TSUBAME 2.5 を用いて二相流解析手法の実効性能測定を行う。

4.1 気液二相流コードの実効性能測定

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 4.8mm 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/s² を用いる。

Fig. 4 に液滴落下現象の計算結果を示す。計算格子は $(N_x, N_y, N_z) = (768, 768, 384)$ を設定し、1 GPU あたりの格子点数として (192, 192, 96)、計算資源として 64 台の GPU を用いた。ミルククラウンのフィンガーは衝突後 1.5 msec 程度で生成され、液滴の衝突によるジェット発生直後の不安定性により生じた凹凸がミルククラウンのフィンガーの種類となって成長していく様子が分かる。本計算では、

Fig. 4 Droplet impact to a thin milk layer.

Krechetnikov らの実験結果[16]と同様の結果が得られ、実験を良く再現できている。

Figs. 5-7 に 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

Fig. 5 Weak scalability in double precision.

Fig. 6 Strong scalability of the case 1 in double precision.

Fig. 7 Strong scalability of the case 2 in double precision.

スケーリングを示す。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。

Fig. 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。

Figs. 6, 7 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。また、Case 2 においては、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。

GPU を用いた並列計算に、大規模計算に適した反復解法である AMG-BiCGSTAB 法を用いることで、1 億格子を超える二相流解析の実施が可能であるものの、このような収束性の悪化は今後の大きな課題である。

5. 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 軸方向を高さを割り当て、領域サイズ $(L_x, L_y, L_z) = (0.5\text{m}, 0.5\text{m}, 0.5\text{m})$ に対して、格子点数 $(N_x, N_y, N_z) = (512, 512, 512)$ 、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 42 rpm と 210 rpm に設定した。

Figs. 8, 9 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。このよう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する事が可能である。

6. 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 $(L_x, L_y, L_z) = (0.3\text{m}, 0.3\text{m}, 0.3\text{m})$ に対して、格子点数 $(N_x, N_y, N_z) = (480, 480, 480)$ 、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 [17] 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。

Figs. 10, 11 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、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。

7. 結 言

本研究では、GPU を用いた二相流解析手法に対して、直交格子上に複雑物体が表現可能な IBM を適用することで、非常に高速な固気液三相流解析手法の開発を行った。

液滴落下計算においては、計算格子 (N_x, N_y, N_z)

Fig. 8 Fluid-structure interaction of rotating plates at 42 rpm. (left : isosurface, right : VOF)

Fig. 9 Fluid-structure interaction of rotating plates at 210 rpm. (left : isosurface, right : VOF)

= (768, 768, 384 : 約 2 億格子) の計算において、液滴衝突後に形成されるミルククラウンのフィンガーを再現した。また、二相流計算手法の弱スケリングの測定を行った結果、液滴が界面に衝突した直後の非常に厳しい条件下(Case 2)において、512 台の GPU を用いた格子点数約 18 億の結果では、82 MLUPS と 8 台の GPU を用いた結果に対して 14 倍程度的高速化しか得られなかった。しかしながら、10 億を超える格子点数においても二相流計算が可能であることを示した。

移動物体と気液界面を含む固気液三相流解析では、回転板による気液界面の攪拌計算においては 64 台の GPU を用いて格子点数 512^3 (約 1 億 3 千万) の計算を、球体と気液界面の連成問題においては 27 台の GPU を用いて格子点数 480^3 (約 1 億 1 千万) の計算を行い、GPU を用いた並列計算を行うことで 1 億格子点程度の流体アプリケーションが容易に実施可能であることを示した。

しかしながら、今後実施される数百億以上の格子点を用いたペタスケールのアプリケーションにおいて、行列の反復計算が大きなネックとなる事が予測され、新たな二相流解析手法の提案が必要である。

謝 辞

GPU 用の AMG-BiCGSTAB ライブラリを提供して頂いたみずほ情報総研株式会社の永野勝尋氏に深く感謝する。

本研究の一部は科学研究費補助金・若手研究(B) 課題番号 25870226 「次世代スパコンの高密度実装に向けた超大規模乱流熱伝達計算」、科学研究費補助金・基盤研究(B) 課題番号 23360046 「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」、科学技術振興機構 CREST 「次世代テクノロジーのモデル化・最適化による低消費電力ハイパフォーマンス」および「ポストペタスケール高性能計算に資するシステムソフトウェア技術の創出」から支援を頂いた。記して謝意を表す。

Nomenclature

FLOPS : floating-point operations per second

MLUPS: mega lattice-updates per second [Grid/s]

Greek letters

μ : viscosity [Pa·s]

Fig. 10 Fluid-structure interaction of a falling sphere(top view).

Fig. 11 Fluid-structure interaction of a falling sphere(side view).

ρ : density [kg/m³]

σ : surface tension [N/m]

Subscripts

G : gas phase

L : liquid phase

参考文献

- [1] Shimokawabe, T., Aoki, T., Takaki, T., Endo, T., Yamanaka, A., Maruyama, N., Nukada, A., and Matsuoka, S., Peta-scale Phase-Field Simulation for Dendritic Solidification on the TSUBAME 2.0 Supercomputer, In Proceedings of 2011 International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis, 1-11 (2011).
- [2] Shimokawabe, T., Aoki, T., Muroi, C., Ishida, J., Kawano, K., Endo, T., Nukada, A., Maruyama, N., and Matsuoka, S., An 80-fold Speedup 15.0 TFlops Full GPU Acceleration of Non-Hydrostatic Weather Model ASUCA Production Code, In High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis, 1-11 (2010).
- [3] Open FOAM, <http://www.openfoam.com>
- [4] Hablaa, F., Marschalla, H., Hinrichsen, O., Dietsch, L., Jasak, H., and Faverod, J.L., Numerical Simulation of Viscoelastic Two-Phase Flows using openFOAM, Journal of Computational Physics, Vol. 66(22), 5487-5496 (2011).
- [5] Kim, J., Kim, D., and Choi, H., An Immersed-Boundary Finite-Volume Method for Simulations of Flow in Complex Geometries, Journal of Computational Physics, Vol. 171(1), 132-150 (2001).
- [6] Peskin, C.S., The Immersed Boundary Method, Acta Numerica, 479-517 (2002).
- [7] Yokoi, K., Efficient Implementation of THINC Scheme: A Simple and Practical Smoothed VOF Algorithm, Journal of Computational Physics, Vol. 226(2), 1985-2002 (2007).
- [8] Tan, N., Aoki, T., Inoue, K., and Yoshitani, K., Numerical Simulation of Two-Phase Flow Driven by Rotating Object, Transactions of the Japan Society of Mechanical Engineers Series B, Vol. 77(781), 1699-1714 (2011).
- [9] Jiang, G.S., and Shu, C.W., Efficient Implementation of Weighted ENO Schemes, Journal of Computational Physics, Vol. 126(1), 202-228 (1995).
- [10] Shu, C.W., Essentially Non-Oscillatory and Weighted Essentially Non-Oscillatory Schemes for Hyperbolic Conservation Laws, NASA/CR-97-206253 ICASE Report, 97-65 (1997).
- [11] Sugihara, K. and Aoki, T., Acceleration of Large Scale High Accurate Advection Calculation for Multiple GPUs and Its Strong Scalability, Transactions of JSCES, Paper No.20100018, (2010).
- [12] Brackbill, J.U., Kothe, D.B., and Zemach, C., A Continuum Method for Modeling Surface Tension, Journal of Computational Physics, Vol. 100(2), 335-354 (1992).
- [13] NVIDIA CUDA, <http://www.nvidia.co.jp/object/cuda-jp.html>
- [14] Sanders, J. and Kandrot, E., CUDA by Example: An Introduction to General-Purpose GPU Programming, Addison-Wesley Professional (2010).
- [15] Endo, T., Nukada, A., Matsuoka, S., and Maruyama, N., Linpack Evaluation on a Supercomputer with Heterogeneous Accelerators, IEEE International Parallel & Distributed Processing Symposium (IPDPS), 10-23 (2010).
- [16] Krechetnikov, R. and Homsy, G.M., Crown-Forming Instability Phenomena in the Drop Splash Problem, Journal of Colloid Interface Sci., Vol. 331, 555-559 (2009).
- [17] Thrust, <http://thrust.github.io>