

ハイパフォーマンス計算力学

櫻山和男(中央大), 寺田賢二郎(東北大), 松本純一(産総研), 岡澤重信(広島大),
木村一郎(北海道大), 岩下武史(京都大), 牛島 省(代表者: 京都大)

当研究課題では, 土木工学における固体材料力学から流体力学にわたる広範囲の計算力学分野の研究
成果を大規模計算へ適用し, 従来扱いが困難であった各種の問題を解決するための検討を進めてい
る. 本報告では, 1) トンネル覆工コンクリートのひび割れ特性を評価するための動弾性有限積分法
による波動伝搬計算, 2) Phase-Field モデルを用いた有限要素法による気液二相流計算, 3) 都市の
建物群を精密に表現した有限要素法による大気流れのシミュレーション, の3つの研究成果を示す.
いずれの研究においても, 当研究課題の共同研究体制を基盤として, HX600(京都大学)の1,024並
列規模の計算における有効性が確認され, 大規模計算における新たな展開が見い出されつつある.

1. 研究の意義と目的

(1) 共同研究分野・共同研究実施体制

本課題の共同研究分野は, 超大規模数値計算系応用
分野である. この研究グループでは, 土木工学分野に
おける計算力学研究者が中心となり, これに計算機科
学分野のメンバーを加えた連携体制に基づいて, 固体材
料力学から流体力学分野にわたる広範囲の大規模計算
利用の有効性を検討している. 土木工学・計算力学分
野の研究者は, 櫻山和男(中央大学), 寺田賢二郎(東北
大学), 岡澤重信(広島大学), 木村一郎(北海道大学),
松本純一(産業技術総合研究所), 牛島省(京都大学)で
あり, 並列化手法等のプログラム高度化支援を行う計
算機科学分野の研究者として, 岩下武史(京都大学)を
加えた共同研究体制としている.

本研究では「学際大規模情報基盤共同利用・共同研究
拠点」のネットワーク型拠点のうち, 京都大学を共同研
究先としており, 計算機環境としては Fujitsu HX600
(T2K オープンスパコン, 1,024 コア) を利用する.

(2) 当公募型共同研究の特色

当研究の特色は大きく以下の2点にある.

- 本研究では, 特定の計算対象を設定するのではな
く, 土木工学の広範囲にわたる複数の計算力学研
究者の連携体制をとっている. すなわち, 構造・材
料力学, 水理・流体力学など広範囲の応用対象を
有する分野横断的な研究者が協調して, 大規模計
算における支配方程式の離散化手法や演算アルゴ
リズム, 並列化手法や計算のプリ・ポスト処理な
ど, 分野共通技術に関する研究を進めている.
- 共同研究先の拠点である京都大学学術情報メデ
ィアセンターのプログラム高度化支援研究者を加え
ることにより, 計算力学分野の成果と大規模計算
に関わる最新技術の融合を図り, 研究基盤の高度
化と応用範囲の拡大を目指している.

2. 当拠点公募型共同研究として実施した意義

上記の共同研究体制に基づいて, 計算力学分野に共
通する並列演算処理, 大規模データハンドリング等に
関する以下のような成果を得た.

1. トンネル覆工の波動伝搬解析では, 計算対象を
CAD データとした後, ボクセルデータに変換し,
動弾性有限積分法により計算領域内の波動伝搬の
シミュレーションを行った. この計算では, HX600
のノード内で OpenMP によるスレッド並列, ノ
ード間で MPI によるプロセス並列計算を行うハイブ
リッド並列処理手法を導入している. この計算手
法は, 中畑准教授(愛媛大学)が提案する計算手法
に, プログラム高度化支援技術が導入されたもの
で, 当拠点研究型公募共同研究の実施体制が有効
に活用されている.
2. Phase-Field モデルを用いた有限要素法による気
液二相流計算では, Navier-Stokes 式に気液界面を
捕捉するための Cahn-Hilliard 方程式を用いて, ミ
ルククラウンの計算を行った. 四面体要素を用い
る有限要素法による計算を MPI により並列化し,
1億2千万自由度の問題を1,024並列演算で計算
している. 大規模計算における非構造格子の取り
扱いや, 計算結果の可視化手法に関して, 計算力
学分野の共通技術として重要な成果を得ている.
3. 都市部の大気流れの計算では, 非構造格子により
建物群を詳細に再現し, 空間フィルタリングがなさ
れた Navier-Stokes 式を安定化有限要素法により計
算した. 連立1次方程式の解法には, MPI により
並列化された Element-by-Element BiCGSTAB2
法を利用し, 1,024並列の計算を実施した. この研
究で得られた成果は, 固体力学や流体力学を対象
とする有限要素法による数値計算において, 広く
利用され得ると考えられる.

3. 研究成果の詳細

3.1 トンネル覆工コンクリートの波動伝搬シミュレーション (東北大: 浅井佑介・京谷孝史・寺田賢二郎)

本研究では、トンネル覆工コンクリートのひび割れ特性評価法として、簡便に調査が行える衝撃弾性波法に着目し、波動伝搬シミュレーションと供試体実験からひび割れ評価法を構築し、ひび割れにおける定量的な健全度評価手法の確立を目的とする。そして、実覆工トンネルにこれらの手法を適用し、実測データと比較することにより、周波数の大きさや測定位置からひび割れを定量的に評価する手法の適用可能性について検討している。ここでは、京都大学学術情報メディアセンターのスーパーコンピュータを2010年11月8日9時から2010年11月15日9時まで利用し、得られた成果を報告する。

トンネル覆工コンクリートの数値解析モデルは実トンネルの図面を参考にしている。図-1に示すように、独立行政法人鉄道・運輸機構提供の2次元図面を参考にして、3次元CADデータを作成する。そして、ボクセル有限要素法の汎用ソフトであるVOXELCON(くいんと社)における、プリプロセッサ機能を利用して、CADデータから解析モデルを生成する。こうして得られたボクセル集合体の1ボクセルを、後述するEFIT(動弾性有限積分法)の1セルに整合させることで解析を実行する。最後にEFITにより解析し得られた結果を汎用可視化ソフトウェアAVS/Express(サイバネット社)を用いグラフィックス表示する。

本研究で採用した解析手法はEFIT(動弾性有限積分法)と呼ばれるもので、愛媛大学 中畑准教授提供による解析コード(以下、EFIT)を利用する。EFITでは、弾性波が伝搬する材料は等方性であるとし、3次元波動場の数値解析を行う。粒子速度を $v_i(x, t)$ 、応力を $\sigma_{ij}(x, t)$ とおいたとき、波動の伝搬を支配する波動方程式および構成式は以下ようになる。

$$\rho(\mathbf{x}) \dot{v}_i = \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + f_i \quad (1)$$

$$\dot{\tau}_{ij} = \lambda(\mathbf{x}) \frac{\partial v_k}{\partial x_k} \delta_{ij} + \mu(\mathbf{x}) \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) \quad (2)$$

ここで、総和規約を適用しており、 ρ は弾性体の密度、 f_i は弾性体に作用する物体力、 $(\dot{\quad})$ は時間 t に関する偏微分 $(\partial/\partial t)$ を表す。

また、 λ と μ はLamé定数であり、弾性体中の縦波音速 c_L および横波音速 c_T との間に次の関係式が成り立つ。

$$c_L = \sqrt{\frac{\lambda + 2\mu}{\rho}}, \quad c_T = \sqrt{\frac{\mu}{\rho}} \quad (3)$$

EFITの計算上の特徴として、式(1)と(2)を立方体領域で積分し、離散化することが挙げられる。これらを空間域および時間域の離散化を行うと次式を得る。

$$\{v_i\}^z = \{v_i\}^{z-1} + \Delta t \{\dot{v}_i\}^{z-1/2} \quad (4)$$

$$\{\tau_{ij}\}^{z+1/2} = \{\tau_{ij}\}^{z-1/2} + \Delta t \{\dot{\tau}_{ij}\}^z \quad (5)$$

ここで Δt は時間ステップであり、上付き文字 z は整数次または半整数次の時間ステップを示している。

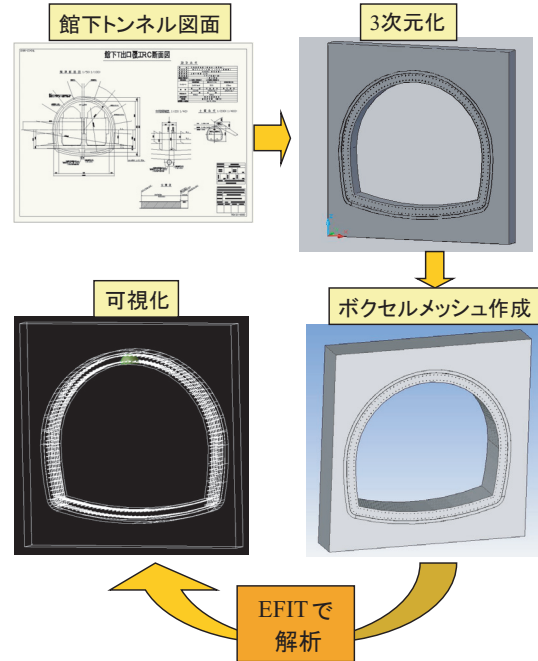


図-1 数値解析モデルの構築

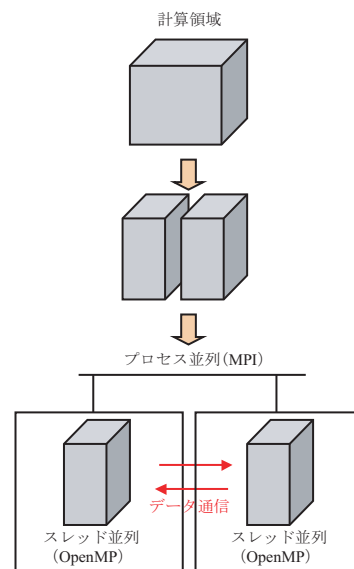


図-2 ハイブリッド並列による並列化

EFITでは、MPIとOpenMPを併用したハイブリッド並列処理を行うことによって、3次元EFITを高速に実行している。ハイブリッド並列処理は、ノード内でスレッド並列(OpenMP)、ノード間でプロセス並列(MPI)を実行する。プロセス並列による並列化では計算領域を分割しそれぞれのノードで計算する方法を用いている。例として、2ノードを使用した時の並列化を図-2に示す。

中心周波数25kHzのリッカー波が入射されたときのトンネル覆工コンクリート縦断方向における波動場のスナップショットを図-3に示す。トンネル覆工の数値解析範囲は6m×11m×3mである。図-3では、8000ステップ(1000μsまで)の時間領域を計算したうちの300μsにおける変位を表示している。図-3から、鉄筋が配置されている場合には配置されていない場合に比べ、波動が鉄筋により乱されて伝播している。また、2次覆工コンクリートと吹き付けコンクリートの間に防水シートが弱層として挟み込まれているため、波動は防水シートを貫通せず、反射して伝播している。なお、解析条件および解析で用いた京都大学学術情報メディアセンターのスーパーコンピュータ資源を表-1、表-2に示す。今回の数値解析モデルではひび割れを配置していないが、トンネル全断面での波動伝搬シミュレーションが可能であることが示された。

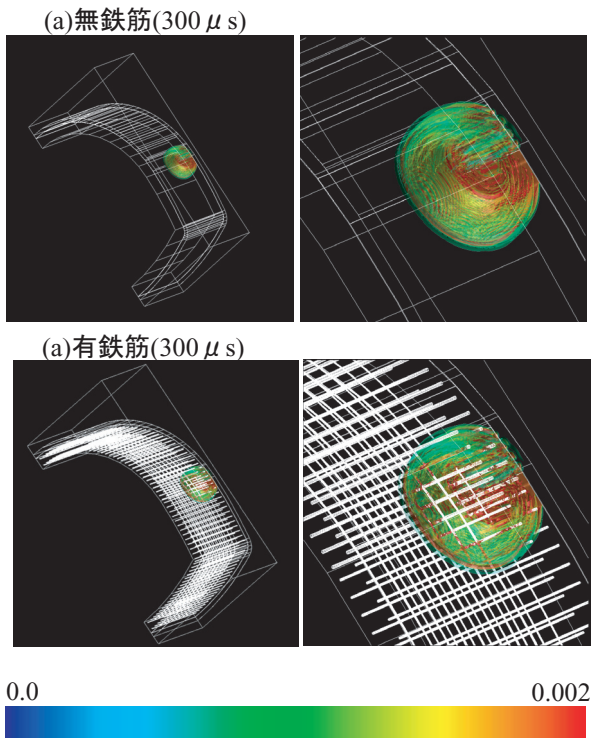


図-3 トンネル覆工における波動伝搬

表-1 解析条件

要素の大きさ	要素数	$\Delta t(\mu s)$	解析時間
10(mm)立方体	約92百万	0.125	0.001(s)

表-2 京都大学スーパーコンピュータ環境

プロセス数	1プロセスのメモリ量(MB)
1024	1800
総使用メモリ(TB)	解析経過時間
約1.51	約2.5時間

3.2 Phase-Fieldモデルに基づく気液二相流解析によるミルククラウンの一億自由度計算(産総研:松本純一)

(1) 並列効率の評価

はじめに、京都大学学術情報メディアセンターのT2Kオープンスパコン(Fujitsu HX600:64ノード×16コア=1024コア)を使用した際の並列性能の検証を目標とし、ベンチマーク問題を設定して並列効率の評価を行った。

ベンチマーク問題としては、Phase-Fieldモデルに基づいた気液二相流れを扱い、ミルククラウンの計算を行った。

・3次元気液二相流解析(ミルククラウンの計算)
 Navier-Stokes方程式(N-S方程式):流速、圧力
 Cahn-Hilliard方程式(C-H方程式):界面関数

・流速と圧力の分離にはSMAC法に準じた陰解法を採用
 流速(運動方程式):Bi-CGSTAB法(Crank-Nicolson法)
 圧力(圧力Poisson方程式):CG法
 界面関数(C-H方程式):Bi-CGSTAB法(Crank-Nicolson法)

・四面体要素(有限要素法)
 流速:気泡関数要素, 圧力:一次要素, 界面関数:気泡関数要素

気泡関数要素

一次要素

図-4 気液二相流解析の説明

図-4に示すPhase-Fieldモデルに基づいた気液二相流解析では、未知量(連立一次方程式で求める自由度)として流速、圧力、界面関数があり、それぞれの連立一次方程式の行列のタイプ(x は未知量, b は既知量を示す)は以下になる。

流速: $Ax = b$ A は非対称行列

圧力: $Ax = b$ A は対称行列

界面関数: $(A + B^T C)x = b$

A は非対称行列 B, C は対称行列

流速, 圧力, 界面関数の連立一次方程式のタイプは, それぞれ流体解析, 構造解析, その他の数値解析で現れる典型的な形式をしており, 本検証で得られる結果の傾向は, 流体解析のみならず構造解析などの他の数値解析にも有る程度おき換えて議論することができるものと考えられる. 連立一次方程式の解法としては, 流速, 界面関数には Bi-CGSTAB 法, 圧力には CG 法による反復法を採用している. 行列の格納方法には CRS (Compressed Row Storage) 法, 各反復解法の前処理には対角スケーリングを用いた.

有限要素法による非構造格子 (四面体要素) を用いたベンチマーク問題として, 以下に示す 3 ケースのミルクラウンの計算を実施した.

【Case1】

節点数: 4,888,521, 要素数: 28,800,000

流速: $4,888,521 \times 3 = 14,665,563$
(約 1 千 5 百万自由度)

圧力: 4,888,521 (約 4 8 9 万自由度)

界面関数: 4,888,521 (約 4 8 9 万自由度)

【Case2】

節点数: 16,398,781, 要素数: 97,200,000

流速: $16,398,781 \times 3 = 49,196,343$
(約 4 千 9 百万自由度)

圧力: 16,398,781 (約 1 千 6 百万自由度)

界面関数: 16,398,781 (約 1 千 6 百万自由度)

【Case3】

節点数: 38,753,041, 要素数: 230,400,000

流速: $38,753,041 \times 3 = 116,259,123$
(約 1 億 2 千万自由度)

圧力: 38,753,041 (約 3 千 9 百万自由度)

界面関数: 38,753,041 (約 3 千 9 百万自由度)

表-3, 図-5 に 16~1024 コアまでの計算時間と記憶容量の並列効率の結果を示す. MPI を使用してプログラムの並列化を実行した.

表-3(a)~(c) の計算時間は流速, 圧力, 界面関数の各未知量を実際に求めた場合の合計時間である. 各ケースとも 16 コアから 32 コアの計算効率は約 100 % と高い並列効率となっている. 図-5(a) をみると計算速度の効率は, どのケースも 1024 コアまで並列効率が上がり続け, 自由度の増加に伴い並列効率が向上する傾向にあることから, より大きな自由度の計算では, さらなる計算効率の向上が望めると考えられる.

表-3 計算時間と記憶容量の並列効率

(a) Case1: 約 1 千 5 百万自由度

コア数	計算時間(秒)	計算速度(倍)	計算効率(%)
16	272.344	1.00	100.00
32	134.969	2.02	100.89
64	69.560	3.92	97.88
128	35.154	7.75	96.84
256	19.615	13.88	86.78
512	13.208	20.62	64.44
1024	10.337	26.35	41.17

(b) Case2: 約 4 千 9 百万自由度

コア数	計算時間(秒)	計算速度(倍)	計算効率(%)
16	995.257	1.00	100.00
32	497.363	2.00	100.05
64	255.801	3.89	97.27
128	127.640	7.80	97.47
256	78.519	12.68	79.22
512	44.727	22.25	69.54
1024	29.307	33.96	53.06

(c) Case3: 約 1 億 2 千万自由度

コア数	計算時間(秒)	計算速度(倍)	計算効率(%)
16	2891.100	1.00	100.00
32	1404.478	2.06	102.92
64	708.279	4.08	102.05
128	358.486	8.06	100.81
256	215.953	13.39	83.67
512	123.587	23.39	73.10
1024	76.071	38.01	59.38

(d) Case1: 約 1 千 5 百万自由度

コア数	記憶容量(MB)	減少量(倍)	メモリー効率(%)
16	1404.987	1.00	100.00
32	708.008	1.98	99.22
64	358.071	3.92	98.09
128	180.606	7.78	97.24
256	92.154	15.25	95.29
512	46.897	29.96	93.62
1024	24.174	58.12	90.81

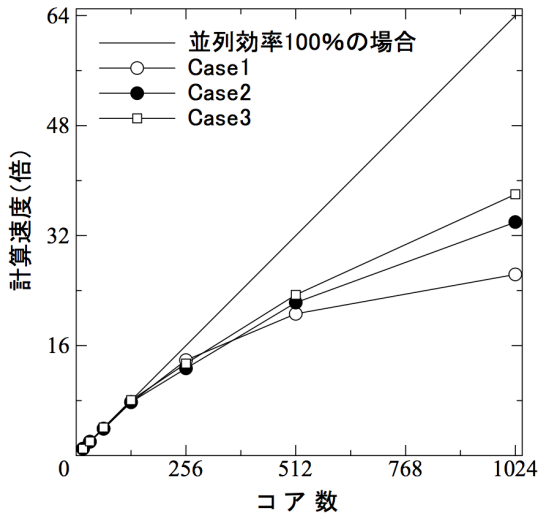
(e) Case2: 約 4 千 9 百万自由度

コア数	記憶容量(MB)	減少量(倍)	メモリー効率(%)
16	4677.410	1.00	100.00
32	2362.493	1.98	98.99
64	1189.744	3.93	98.29
128	600.610	7.79	97.35
256	303.921	15.39	96.19
512	153.519	30.47	95.21
1024	78.217	59.80	93.44

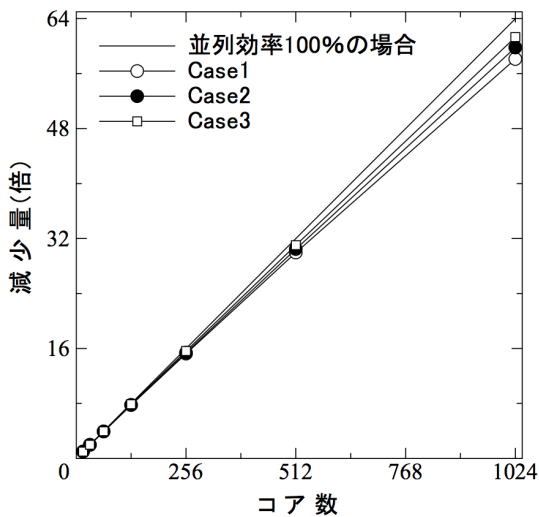
(f) Case3: 約 1 億 2 千万自由度

コア数	記憶容量(MB)	減少量(倍)	メモリー効率(%)
16	11124.011	1.00	100.00
32	5587.948	1.99	99.54
64	2811.215	3.96	98.93
128	1409.804	7.89	98.63
256	711.730	15.63	97.68
512	358.423	31.04	96.99
1024	181.432	61.31	95.80

表-3(d)~(f)の記憶容量の効率(メモリー効率(分散率))も、計算速度の効率と同じく、どのケースにおいても1024コアまで並列効率が上がり続け、図-5(b)に示すように自由度の増加に伴い並列効率が向上している。また、各ケースとも1024コア使用時においてもメモリー効率が90%以上となっており、非常に効率が高く、メモリー的には、より大きな規模の計算が可能であることが考察できる。



(a) 計算時間の並列効率(時間ステップ3回当たり)



(b) 記憶容量の並列効率(記憶容量1コア当り)

図-5 計算時間と記憶容量の並列効率の比較

(2) ミルククラウンの一億自由度計算

図-6に、2010年11月2日9時~8日9時に行った1024コアを用いた約1億2千万自由度の計算結果の一例を示す。時間増分量は12μ秒を採用し0.012秒までの計算を行った。計算時間は約6時間35分であった。図-6をみると液滴が水面に落下し、その衝撃で水面が円筒状に上昇してゆき、上昇した水面の先端部においてクラウン状の水面形状が発生しているのが確認できる。

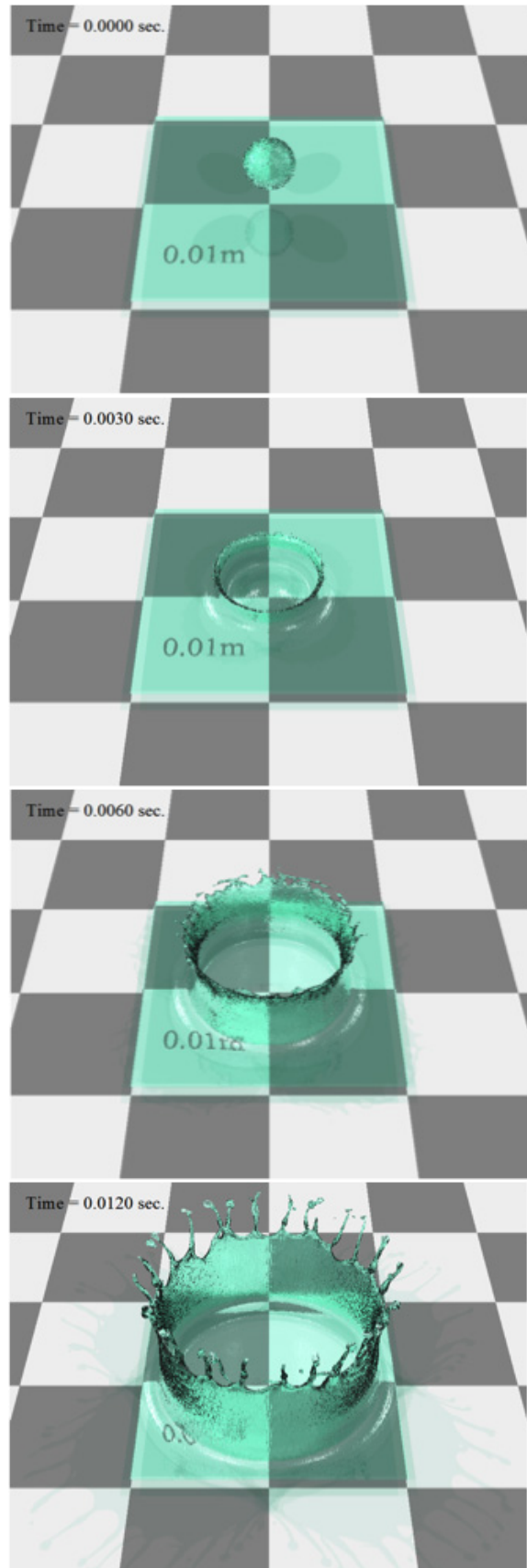


図-6 1024コア使用時のミルククラウンの計算結果(約1億2千万自由度、可視化にはPOV-Rayを使用)

3.3 大規模計算システムによる大気流れ解析 (中央大: 石坂俊輔・櫻山和男)

(1) 扱っている問題

近年、都市域においてヒートアイランド現象やビル風等、大気環境に関する問題が顕著になっており、これらの現象のメカニズムの解明には、数値シミュレーションが広く用いられるようになってきている。しかし、広領域の都市域を解析対象とする場合、大規模計算となるため計算時間が膨大となる。

そこで都市域の大気環境流れを、安定化有限要素法を用いた領域分割に基づく並列計算手法を用いて、省メモリーかつ高速に解析を行った。

また、本システムの有効性を検討するために、日本橋周辺の大気環境流れに適用した (図-7 と図-8 を参照)。



図-7 日本橋周辺の形状モデル

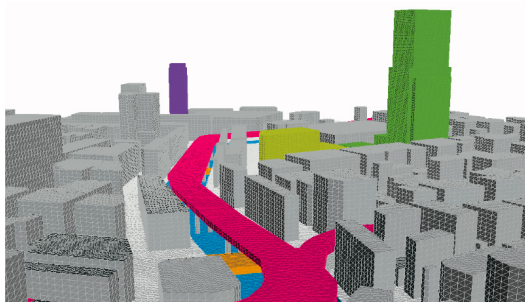


図-8 表面メッシュ

(2) 基礎方程式

基礎方程式には、非圧縮性粘性流体を仮定した Navier-Stokes 方程式を用いる。空間フィルタリング処理を施した運動方程式、連続式はそれぞれ式 (6)、(7) で表される。

運動方程式；

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \bar{u}_j \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} - \frac{1}{Re} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} = 0 \quad (6)$$

連続式；

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_i} = 0 \quad (7)$$

SGS 応力；

$$\tau_{ij} = \overline{u_i u_j} - \bar{u}_i \bar{u}_j \quad (8)$$

ここで、 \bar{u}_i 、 \bar{p} はそれぞれ空間フィルタリングを施した流速、圧力であり、 Re は Reynolds 数を表している。また、 τ_{ij} は SGS (Sub Grid Scale) 応力を表す。格子で捉えきれない SGS の乱れによる GS (Grid Scale) の流れ場への影響は、 τ_{ij} を通じて運動方程式に組み込まれる。なお、SGS モデルには、Smagorinsky モデルを用いた。

(3) 離散化手法

基礎方程式、式 (6)、(7) に対して SUPG/PSPG 法に基づく安定化有限要素法を用いて空間方向の離散化を行う。時間方向の離散化には、Crank-Nicolson 法により離散化を行い、連立 1 次方程式の解法には Element-by-Element Bi-CGSTAB2 法を用いた。

(4) 計算結果

大規模計算を省メモリーかつ高速に解析するために、領域分割に基づく並列計算手法を適用した。領域分割法に基づく方法を導入することにより、各プロセッサは割り当てられた領域のデータのみを記憶するので、省メモリーに計算を行うことが可能になる。図-9 に解析領域、また図-10 に 64 分割の領域分割図を示す。なお、並列化には、移植性の高い MPI (Message Passing Interface) を用いた。また、並列計算機には、京都大学学術情報メディアセンターの HX600 クラスタ (Thin SMP クラスタ) を使用した (表-4 参照)。

表-4 計算システム概要

ノード数	416
コア数	6656
理論ピーク演算性能	61.2TFlops
総メモリー容量	13TB
総ノード間通信性能	3.3TB/s
OS	RHEL AS V4
プロセッサ	AMD64(x86-64)
タイプ	Quad Core AMD Opteron

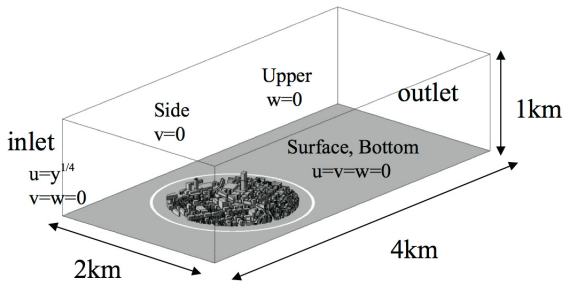


図-9 解析領域

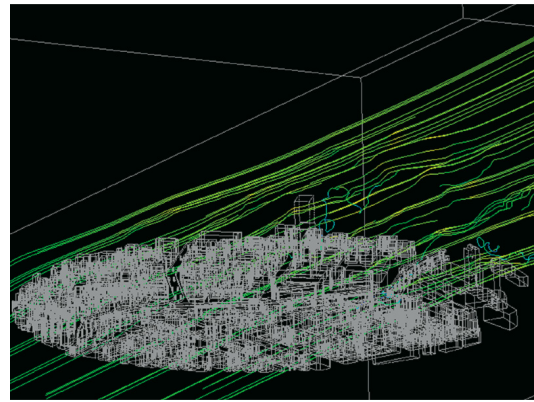


図-12 流線図

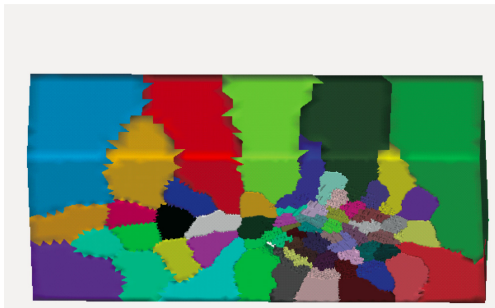


図-10 領域分割図 (例：64 分割)

(5) 大規模並列計算

図-11 と図-12 に、スピードアップのグラフとある時間ステップにおける流線図を示す。1024 コアを使用した場合においては、1 コアを用いた場合と比較して約 500 倍のスピードアップを確認することができる。また、コア数が増えるに従って、並列効率が悪くなっていくことが確認できる。

$$\text{スピードアップ} = \frac{\text{基準ノード使用時の実行時間}}{N \text{ ノード使用時の実行時間}}$$

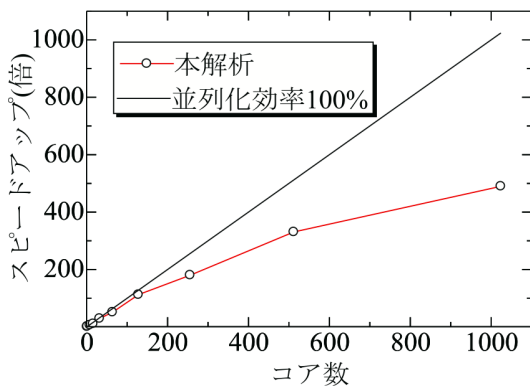


図-11 スピードアップ図

4. これまでの進捗状況と今後の展望

4.1 トンネル覆工コンクリートの波動伝搬シミュレーション (東北大: 浅井佑介・京谷孝史・寺田賢二郎)

コンクリート構造物に存在する様々な欠陥の中から特にひび割れを対象とし、いくつかのモデルを設定し、実験、解析の両方からそれぞれに関して、測定特性(伝搬状況、伝搬速度)、および周波数特性(入力周波数、フーリエ振幅スペクトルの減衰)の分析を行っている。現在、ひび割れ深さを特定するために、周波数特性に着目し数値実験から得られる結果の比較・考察を行っている。12月末に行う供試体実験の結果と数値解析により得られた知見を比較することにより、ひび割れ評価法を構築し、ひび割れにおける定量的な健全度評価手法の確立に寄与する。そして、今回の解析により、トンネル全断面での解析が可能であることが明らかになったため、トンネル覆工モデルにひび割れを配置した場合の弾性波伝播挙動についても解析を行うことができる。トンネル覆工における実験と解析結果を比較することで、実構造物における適用性について検討する。

4.2 Phase-Field モデルに基づく気液二相流解法によるミルククラウンの一億自由度計算 (産総研: 松本純一)

並列効率の評価では、1024 コア使用時において、計算速度および記憶容量の並列性能を向上させながら 1 億自由度以上の気液二相流解析が可能であることを実証した。並列性能の検討結果からは、より大きな規模の数値解析において、さらなる計算速度と記憶容量の並列効率が望める傾向を示唆する結果が得られ、今後の共同利用・共同研究拠点に対する有用な計算データの取得が出来たと考える。

ミルククラウンの一億自由度計算においては、本計算で重要となる表面張力項の評価の検討と

改良，計算領域をより広域にした場合の計算を行い，実験結果（例えば，郡司博史・石井秀樹・斉藤垂矢・酒井敏：ミルククラウドに関する研究，日本流体力学会「ながれマルチメディア」，2003，<http://www2.nagare.or.jp/mm/2003/gunji/index.ja.htm>）との比較検証を遂行する所存である．

また，より多くの計算時間と記憶容量を必要とする，最適制御理論を用いた非定常 3 次元流体解析における形状最適化問題への着手に努める予定である．

4.3 大規模計算システムによる大気流れ解析 (中央大: 石坂俊輔・榎山和男)

都市域の大気流れを，安定化有限要素法を用いた領域分割に基づく並列計算を行い以下の結論を得た．

- 1024 コアで約 500 倍のスピードアップが確認出来た．
- コア数が増えるほど並列効率の減少が見られ，最大 5 割ほどの結果となった．

今後は，熱収支を都市域に考慮した大規模流れ解析を行う予定である．

5. 研究成果リスト

- [1] 松本純一・高田尚樹・松本壮平: Phase-Field モデルを用いた一億自由度気液二相流有限要素解析, 第 60 回理論応用力学講演会, 2011 (発表予定) .
- [2] 石坂俊輔・榎山和男: AD/GIS/VR 技術を用いた都市域における大気環境流れの大規模計算システム, 土木学会 平成 22 年度全国大会 第 65 回年次学術講演会.