

GPU を用いた格子ボルツマン法による自由表面流れの数値解析

GPU implementation of lattice Boltzmann method for free-surface flow

- 小野寺 直幸, 海上技術安全研究所流体性能評価系, 東京都三鷹市新川 6 丁目 38 番 1 号, onodera@nmri.go.jp
大橋 訓英, 海上技術安全研究所流体性能評価系, 東京都三鷹市新川 6 丁目 38 番 1 号, k-ohashi@nmri.go.jp
Naoyuki Onodera, National Maritime Research Institute, 6-38-1, Shinkawa, Mitaka-shi, Tokyo, JAPAN
Kunihide Ohashi, National Maritime Research Institute, 6-38-1, Shinkawa, Mitaka-shi, Tokyo, JAPAN

Free surface flows are very important in many fields. 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 LBM (Lattice Boltzmann Method) with a single-phase free-surface model. Since a violent air-water flow are turbulent with high Reynolds number, the LES (Large-Eddy Simulation) model, named coherent-structure Smagorinsky model, is introduced to solve the LBM equation. The code is written in CUDA, and the GPU kernel function is tuned to achieve high performance and good scalability on the TSUBAME 2.5 supercomputer. We achieved 809 MLUPS (Mega lattice update per second) using 1000 GPUs in single precision. It has become possible to carry out large-scale multiphase flow simulations. We demonstrate the breaking dam problem with $1024 \times 512 \times 176$ mesh, and small splashes are described clearly.

1. 緒言

船舶の推進性能の解析など気液界面を含む製品の設計において、高性能な非定常解析の必要性が高まっている。空気と水のように密度差が大きな流体の解析では、液体の運動のみを解けば十分な精度の近似解を得られる問題も存在しており、計算効率や安定性の面からも自由表面流解析は重要である。物体と液体の相互作用による気液界面の変形等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。格子ボルツマン法 (LBM: Lattice Boltzmann method) は流体を仮想粒子の集合体として近似し、離散化されたボルツマン方程式を解くことで流体運動を記述する手法である。LBM は単純なアルゴリズムで局所的なメモリアクセスを行うため、複雑物体を含む流れや大規模並列計算に非常に適している⁽¹⁾⁽²⁾。界面が激しく乱されるような自由表面流の解析は乱流状態になるため、ラージェディ・シミュレーション (LES) による乱流モデルを導入する必要がある。現在良く使われている SGS モデルとして動的スマゴリンスキー・モデル⁽³⁾⁽⁴⁾があげられるが、モデル定数を決定するために各格子点で広領域の平均操作が必要になり大規模計算には極めて不向きである。コヒーレント構造スマゴリンスキーモデル⁽⁵⁾はモデル係数を局所的に求める事ができるため、大規模計算に適している。本研究では、LES を適用した格子ボルツマン法に自由表面モデルを適用することで、大規模な自由表面流解析を実施した。また、気液界面の捕獲手法として Level set 法と VOF 法に基づく THINC-WLIC 法を適用し、計算の比較を行った。計算コードは NVIDIA の GPU を利用する言語である CUDA を用いて書かれており、東京工業大学のスーパーコンピュータ TSUBAME 2.5 に対して最適化が行われている。単精度実行性能として、1000 台の GPU を用いた解析においては 809 MLUPS (0.875 sec/step) を達成すると共に、良いスケールリングが得られた。さらに、3次元の自由表面流解析としてダム崩壊計算を行い、約 1 億格子点 ($1024 \times 512 \times 176$) の計算においても安定に計算を実施できることを確認した。

2. 格子ボルツマン法

格子ボルツマン法 (LBM) は連続体である流体を格子点上を並進・衝突する仮想的な粒子の集合と仮定し、格子上の粒子の速度分布関数について時間発展方程式を解く手法である。空間は等間隔の格子上で離散化され、有限個の速度を持つ粒子は並進運動により 1 タイムステップ後に格子点上に位置するため、補間に伴う離散化誤差を含まない。粒子の衝突過程は、BGK モデル⁽⁶⁾を用いて、粒子分布が単一時間内で局所平衡状態へと緩和すると仮定する。ここで、時刻 t 、位置 x において、速度 c_i に対

応する粒子の分布関数 $f_i(x, t)$ の時間発展は以下の式で表される。

$$f_i(x + c_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i(x, t) - \frac{1}{\tau} (f_i(x, t) - f_i^{eq}(x, t)). \quad (1)$$

Δt は時間刻み、 τ は緩和時間係数、 $f_i^{eq}(x, t)$ は局所平衡状態における粒子分布である。平衡分布関数は以下の式で表される。

$$f_i^{eq} = w_i \rho \left(1 + \frac{3c_i \cdot u}{c^2} + \frac{9(c_i \cdot u)^2}{2c^4} - \frac{3u^2}{2c^2} \right) \quad (2)$$

c_i は離散化粒子速度、 ρ は密度、 u は速度、 w_i は重み係数である。離散的粒子速度として 3次元 27 速度 (D3Q27) モデルを採用した。D3Q27 モデルの離散化粒子速度および重み係数は以下の式で表される。

$$c_i = \begin{cases} (0, 0, 0) & i = 0 \\ (\pm c, 0, 0), (0, \pm c, 0), (0, 0, \pm c) & i = 1 \sim 6 \\ (\pm c, \pm c, 0), (\pm c, 0, \pm c), (0, \pm c, \pm c) & i = 7 \sim 18 \\ (\pm c, \pm c, \pm c) & i = 19 \sim 26 \end{cases} \quad (3)$$

$$w_i = \begin{cases} \frac{8}{27} & i = 0 \\ \frac{2}{27} & i = 1 \sim 6 \\ \frac{1}{54} & i = 7 \sim 18 \\ \frac{1}{216} & i = 19 \sim 26 \end{cases} \quad (4)$$

密度 ρ と運動量 ρu_i の保存は成り立ち、以下の式で表される。

$$\rho = \sum_i f_i, \quad \rho u = \sum_i c_i f_i. \quad (5)$$

衝突過程での緩和時間 τ は動粘性係数を用いて以下の式で表される。

$$\tau = \frac{1}{2} + \frac{3\nu}{c^2 \Delta t}. \quad (6)$$

物体境界の与え方として、物体からの距離関数を用いることで複雑形状が表現可能な Yu らによって提案された Bounce-Back (BB) 境界条件⁽⁷⁾を与えた。

3. ラージエディ・シミュレーション

LES は格子で解像できる物理量 (GS:grid scale) に対して直接計算を行い, 格子解像度以下の成分 (SGS:sub-grid scale) に対してはサブグリッド・スケール (SGS) モデルによりモデル化を行う. 渦粘性に基づいた SGS モデルでは, SGS 以下の変動が分子粘性と同様に作用すると仮定し, 渦粘性 ν_{SGS} を導入する.

$$\nu_{SGS} = C\bar{\Delta}^2 |\bar{S}|, \quad (7)$$

$$\bar{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right). \quad (8)$$

ここで C はモデル係数, $\bar{\Delta}$ はフィルター幅, \bar{S}_{ij} はひずみ速度テンソルとなる.

3.1 コヒーレント構造スマゴリンスキー・モデル

SGS モデルとして, スマゴリンスキー・モデル (8) や動的スマゴリンスキー・モデル (DSM) (3)(4) が提案されているが, 複雑物体を含む流れ場に対して正確な渦粘性が導入できない事や, モデル係数を決定するために各格子点で広領域の平均操作が必要になり, 大規模計算には極めて不向きといった問題点があげられている. コヒーレント構造スマゴリンスキー・モデル (CSM) (9) は乱流のコヒーレント構造からモデル係数 C_{CSM} を決定することで, 複雑物体を含む流れ場に対しても高精度に計算を行う事ができる (5). モデル係数は速度勾配テンソルの第 2 不変量 (Q) と速度勾配テンソルの大きさ (E) から求められるコヒーレント構造関数 F_{CS} により決定される.

$$C_{CSM} = C' |F_{CS}|^{3/2}, \quad (9)$$

$$F_{CS} = \frac{Q}{E} \quad (-1 \leq F_{CS} \leq 1), \quad (10)$$

$$Q = -\frac{1}{2} \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j}, \quad (11)$$

$$E = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right)^2. \quad (12)$$

C' は係数であり, 本研究では平行平板間乱流計算によって得られた最適な係数 $C' = \frac{1}{20}$ を用いる. 乱流モデルを適用した LBM の緩和時間 τ_* は以下の式で表される.

$$\tau_* = \frac{1}{2} + \frac{3\nu_*}{c^2 \Delta t}, \quad (13)$$

$$\nu_* = \nu_0 + \nu_{SGS}. \quad (14)$$

4. 格子ボルツマン法による自由界面解析

4.1 自由界面捕獲手法

多相流体の解析では異なる流体の間にある界面を識別して追跡する必要がある. 格子ボルツマン法で用いる直交格子では, 界面からの符号付き距離関数を用いて界面を表現する Level Set 法や気液界面を流体率で表現する VOF (Volume of Fluid) 法などが代表的である. 本計算では Level Set 法として 3 次精度の WENO 法 (10) を, VOF 法として保存型の THINC-WLIC 法 (11), (12) を採用し, 自由界面解析手法とそれぞれを組み合わせて解析を実施した.

4.2 格子ボルツマン法での自由界面モデル

自由表面流解析 (13), (14) では気液二相の流れに対して, 質量の重い液体部分のみ時間発展を行い, 気体部分の解析は行わない. 計算セルの種類は流体率 (VOF 率) より定められ, 通常の LBM と同様の計算を行う (i) 流体セル, 計算を行わない (ii) 空隙セル, 気液の境界面に存在する (iii) 境界セル, の 3 種類のセルに分類される. それぞれ

のセルの判定として, 気液界面からの符号付き距離関数の値が液体側のセルを (i) 流体セル, 気体側のセルを (ii) 空隙セルと判定した後に, 空隙セルに隣接している (空隙セルを参照する) 流体セルを (iii) 境界セルと判定した. 境界セルは空隙セルに接しているため, 気液界面の境界条件を与える必要がある. 具体的には LBM の streaming step において, 空隙セル ($x + c_i \Delta t$) を参照する粒子分布関数 f_{-i} に対して, 以下の様な境界条件を与える.

$$f_{-i}(x, t + \Delta t) = f_i^{eq}(\rho_A, u_B) + f_{-i}^{eq}(\rho_f, u_B) - f_i(x, t). \quad (15)$$

ここで ρ_A は大気圧で与えられる密度 ($\rho_A = 1$), u_B は境界セルの速度である. また, 空隙セルの従属変数である速度 u_j は, 隣接する流体セルの値から補外して求める.

5. TSUBAME での実効性能測定

東京工業大学のスーパーコンピュータ TSUBAME 2.5 は, 4000 台以上の GPU (NVIDIA K20X) を搭載し, LINPACK ベンチマークにおいて 2.78 PFLOPS を達成している. 本計算では複数 GPU を用いた並列計算手法として MPI の計算領域にそれぞれ 1 GPU を割り当てるフラット MPI を採用した. MPI での GPU-GPU 間のデータ交換として, GPU-CPU (cudaMemcpyDeviceToHost), CPU-CPU (MPI), CPU-GPU (cudaMemcpyHostToDevice) の 3 ステップのデータ転送を行った (図 1). 計算手法は D3Q27 モデルに自由表面モデルを適用し, 自由界面捕獲手法として Level set 法 (再初期化 3 回/ステップ), 境界モデルとして Bounce-back 境界条件を採用した. 1GPU あたりの格子点数は (N1, N2, N3) = (192, 192, 192) を設定した. 並列計算は $2^3 \cdot 10^3$ 台の GPU を用いて測定を行い, 各 GPU に割り当てる計算領域は 3 次元方向に均等になるように配置した.

図 2 に弱スケーリングの単精度実効性能を示す. 横軸が GPU 数, 縦軸が 1 秒間に更新できる格子点数 (MLUPS: Mega-lattice update per second) である. 計算結果より, 8 台の GPU では 70 MLUPS (0.809 sec/step), 125 台の GPU では 109 MLUPS (0.815 sec/step), 512 台の GPU では 428 MLUPS (0.846 sec/step), 1000 台の GPU では 809 MLUPS (0.875 sec/step) となる. 以上の結果より, 1000 GPU を用いた 70 億格子の解析においても, 8 GPU の解析と比較して約 7.5% ほどの性能低下が見られるものの, 良いスケールングが得られていることが確認できる. この性能低下は MPI 通信のオーバーヘッドによるものと考えられ, 更なる高速化のためには GPU 計算と CPU による MPI 通信のオーバーラップ計算 (15) やノード内の GPU-GPU の直接通信, 計算カーネルの最適化が必要となる.

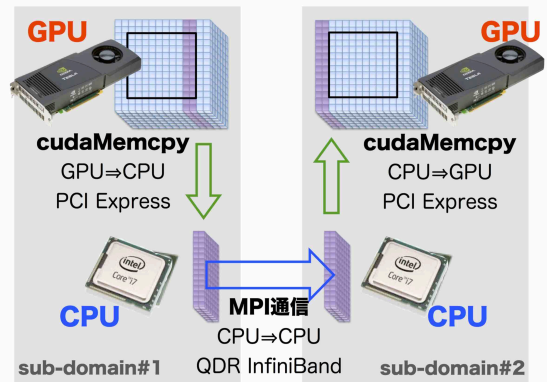


Fig. 1: MPI data transfer between GPUs.

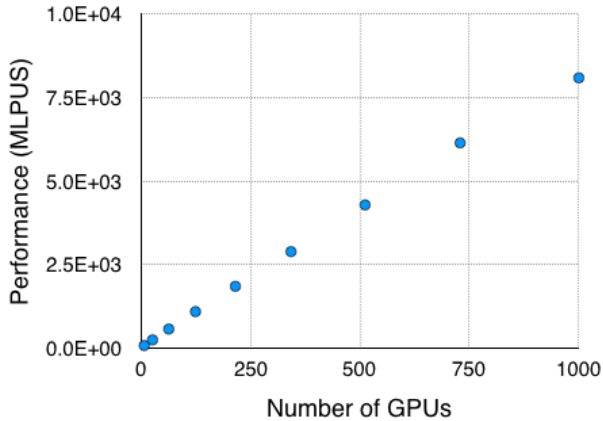


Fig. 2: Weak scalability on TSUBAME 2.5.

6. 自由界面解析手法による計算

6.1 2次元ダム崩壊テスト

2次元ダム崩壊テストを行い, Martin と Moyce の実験値⁽¹⁶⁾と比較した. 自由界面捕獲手法として3次精度のWENO-LF法を用いたLevel set法(非保存型)およびVOF法としてTHINC-WLIC法(保存型)を採用した. 初期条件を図3に示す, ここで, 初期プロファイルのパラメータを $a = 0.05715m(2.25inch)$, $n = 1$ と設定した. 重力加速度は $9.8m/s$ を与え, 表面張力や壁面の濡れ性等は考慮していない.

図4に界面プロファイルの時間発展過程((a) 0.1, (b) 0.2, (c) 0.3, (d) 0.4s)を示す. 等値面として流体率(0~1)の値が0.5を示しており, 等値面に囲まれている領域に対して時間発展を行っている. 計算結果より, Level set法と比較して, VOF法の界面先端位置がより遠くに到達していることが確認できる. 一方で, Level set法を用いたものではVOF法と比較して, より滑らかなプロファイルが得られた.

図5,6は水柱高さや先端到達距離の時間変化を示す. x軸方向の格子点数を $N_x = 320, 512, 1024$ と設定し, Martin と Moyce の実験値⁽¹⁶⁾と比較した. ここで座標軸の変数は無次元化されており, それぞれ $H = \eta/(an^2)$, $\tau = t\sqrt{g/a}$, $Z = z/a$, $T = nt\sqrt{g/a}$ である. 図5のダム高さ位置の結果においては, VOF法で若干不連続な結果が得られたものの, Level set法と共にすべての格子解像度で実験結果と良く一致していることが確認できる. 図6の先端到達位置の結果においては, 低い格子解像度で遅く, 高い格子解像度で速くなる傾向が見られる. これはLevel set法でより顕著に見られ, 自由界面の移流・再初期化により流体率が保存されていないため, 先端到達位置がより遅くなると考えられる. いずれの結果においても, 格子解像度を上げることで実験結果に一致していく事が確認できる. 以上により, 本流体解析コードの妥当性が示された.

6.2 3次元ダム崩壊テスト

3次元の自由界面解析手法のテストとして, 水面の巻き込みと砕波が激しく生じる浅い水面へのダム崩壊解析を実施した. 計算条件は $0.72m \times 0.36m \times 0.12m$ の計算領域に $1.8cm$ の水面を設定し, 計算領域の端から $0.15m$ の領域に水柱を設置した. 計算格子解像度は $(N_1, N_2, N_3) = (1024, 512, 176)$ の $0.703mm$ 格子を設定した. 計算結果を図7に示す. 左図がLevel set法による結果, 右図がVOF法による結果であり, 時間が(a) 0.2, (b) 0.3, (c) 0.4, (d) 0.5 secとなる. 計算結果より, Level set法とVOF法は大きめに同じプロファイルが得られているものの, 液中に取り込まれた気泡部分(空隙領域)に大きな違いが見られる. これは, 非保存のLevel set法では細かな

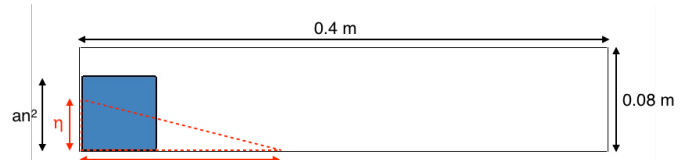


Fig. 3: Computational condition of breaking dam.

気泡を捉えられないことが主な原因と考えられる. VOF法では液中に取り込まれた気泡の圧縮が見られるものの, 流体率が保存されるため液中の気泡は消滅しなかった. Level set法では気泡の消滅が確認されたものの, VOF法と比較してより滑らかな結果が得られた. 参考までに, 時間が $s = 1$ の時点での流体部分の体積として, Level set法では27%の増加, VOF法では0.4%の減少が見られた. 以上の結果より, 自由表面解析手法では局所的な流体率の保存が重要であり, Level set法を適用する場合においては, 保存型の手法を用いることが望ましいと考えられる.

6.3 物体を含む自由表面流れ解析

物体を含む自由表面解析手法のテストを実施した. 計算条件は前節の3次元ダム崩壊テストと同様に設定し, 物体として, 直方体 $3.6cm \times 10.8cm \times 4.8cm$ の物体の左端をx軸から $46.8cm$ の位置に設置した. 物体は, 三角形の頂点と法線ベクトルからなるSTLデータを基に, 符号付き距離関数を作成し表現した. VOF法を用いた計算結果を図8に示す. 物体により液面が激しく乱され非常に多くの気泡が液中に取り込まれていることが確認できる. 時間が $s = 1$ の時点での流体部分の体積として, 4%の減少が見られたものの非常に良い体積保存性が示された. このような気泡を激しく巻き込む条件においても, 本解析手法は安定に計算を実施できることが確認された.

7. 結言

格子ボルツマン法にコヒーレント構造スモギリンスキーモデルを適用したLES手法に, 自由表面モデルを組み合わせることで, 複雑物体を含む自由表面流の解析手法を構築した. TSUBAME 2.5を用いた弱スケーリングの結果では, 1000台のGPUでは809 MLPUS(0.875 sec/step)と70億点を用いた解析においても良いスケーリングを達成した. 自由表面解析の検証問題として, 2次元ダム崩壊計算を行い, Martin と Moyce の実験結果と比較したところ, 実験結果と良く一致することが確認された. 3次元解析においても, 気泡を激しく巻き込む条件においても安定に計算が可能であることが確認され, 本解析手法が大規模自由表面流解析手法の一つとして有効であることが示された.

8. 謝辞

本研究の一部は科学研究費補助金・若手研究(B)課題番号F-15K20996「GPUスパコンによる固気液多相流の大規模計算」から支援を頂いた. 記して謝意を表す.

参考文献

- (1) A. Rahimian, I. Lashuk, S. Veerapaneni, A. Chandramowliswaran, D. Malhotra, L. Moon, R. Sampath, A. Shringarpure, J. Vetter, R. Vuduc, et al. Petascale direct numerical simulation of blood flow on 200k cores and heterogeneous architectures. In *Proceedings of the 2010 ACM/IEEE International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis*, pages 1–11. IEEE Computer Society, 2010.
- (2) 小野寺直幸, 青木尊之, 下川辺隆史, 小林宏充. 格子ボルツマン法による1m格子を用いた都市部10km

四方の大規模 les 気流シミュレーション. *情報処理学会論文誌*, 53(2):1–9, 2012.

- (3) M. Germano, U. Piomelli, P. Moin, and W.H. Cabot. A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model. *Physics of Fluids A: Fluid Dynamics*, 3:1760, 1991.
- (4) DK Lilly. A proposed modification of the germano subgrid-scale closure method. *Physics of Fluids A: Fluid Dynamics*, 4:633, 1992.
- (5) H.Kobayashi, F. Ham, and X. Wu. Application of a local sgs model based on coherent structures to complex geometries. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 29(3), 2008.
- (6) Q. Zou and X. He. On pressure and velocity flow boundary conditions and bounceback for the lattice boltzmann bgk model. *Arxiv preprint comp-gas/9611001*, 1996.
- (7) S.K. Kang and Y.A. Hassan. The effect of lattice models within the lattice boltzmann method in the simulation of wall-bounded turbulent flows. *Journal of Computational Physics*, 2012.
- (8) JS Smagorinsky. General circulation model of the atmosphere. *Monthly Weather Review*, 164:91–9, 1963.
- (9) H. Kobayashi. Large eddy simulation of magneto-hydrodynamic turbulent channel flows with local subgrid-scale model based on coherent structures. *Physics of Fluids*, 18:045107, 2006.
- (10) C.W. Shu and G.S. Jiang. Efficient Implementation of Weighted ENO Schemes. *Journal of Computational Physics*, pages 202–228, 1995.
- (11) F. Xiao, Y. Honma, and T. Kono. A simple algebraic interface capturing scheme using hyperbolic tangent function. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 48(9), 2005.
- (12) K. Yokoi. Efficient implementation of THINC scheme: A simple and practical smoothed VOF algorithm. *Journal of Computational Physics*, 226(2):1985–2002, 2007.
- (13) U Rude and N Thurey. Free surface lattice-boltzmann fluid simulations with and without level sets. In *Vision, Modeling, and Visualization 2004: Proceedings, November 16-18, 2004, Standford, USA*, page 199. IOS Press, 2004.
- (14) Nils Thurey, C Korner, and U Rude. Interactive free surface fluids with the lattice boltzmann method. *Technical Report05-4. University of Erlangen-Nuremberg, Germany*, 2005.
- (15) T. Shimokawabe, T. Aoki, T. Takaki, T. Endo, A. Yamanaka, N. Maruyama, A. Nukada, and S. Matsuoka. Peta-scale phase-field simulation for dendritic solidification on the tsubame 2.0 super-computer. In *Proceedings of 2011 International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis*, page 3. ACM, 2011.
- (16) JC Martin and WJ Moyce. An experimental study of the collapse of liquid columns on a rigid horizontal plane. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 244(882):312–324, 1952.

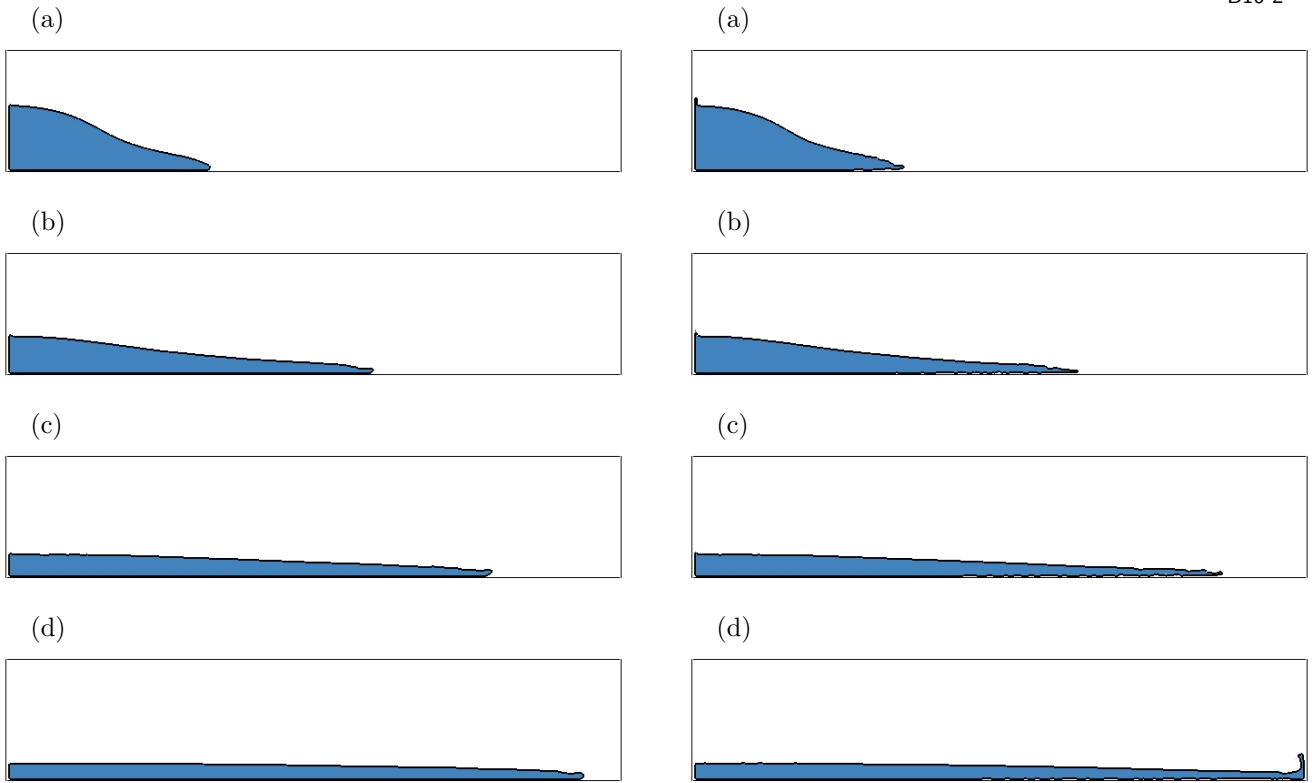


Fig. 4: The process of the 2d-breaking dam at time (a) 0.1, (b) 0.2, (c) 0.3, and (d) 0.4 sec. Left: Level set method; right: THINC-WLIC scheme (512×102 cells).

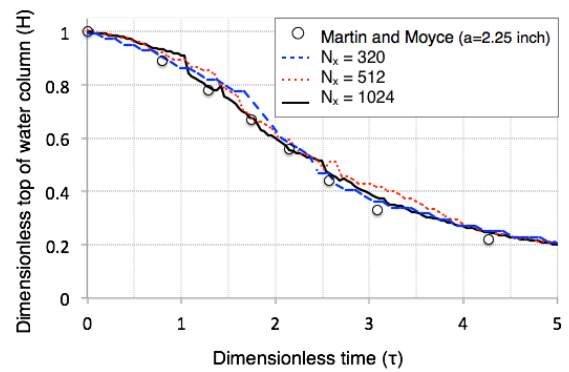
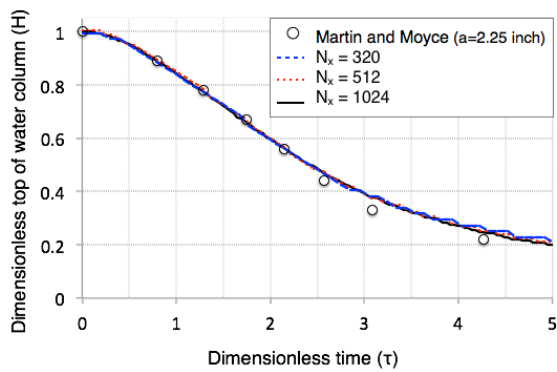


Fig. 5: Comparison of numerical and experimental results for the position of the water column top. Left: level set method; right: THINC-WLIC scheme.

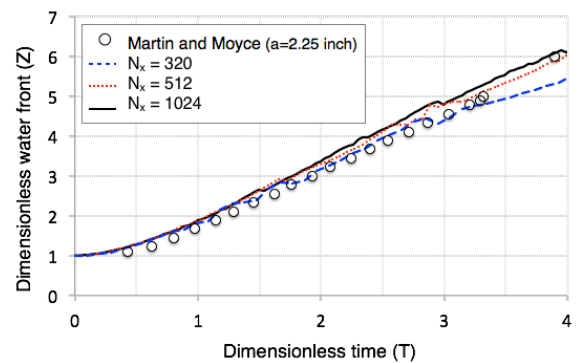
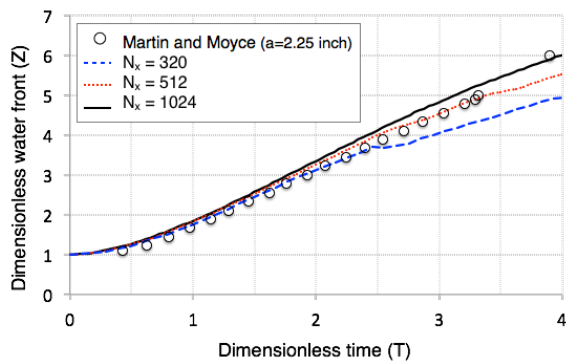


Fig. 6: Comparison of numerical and experimental results for the position of the surge front. Left: level set method; right: THINC-WLIC scheme.

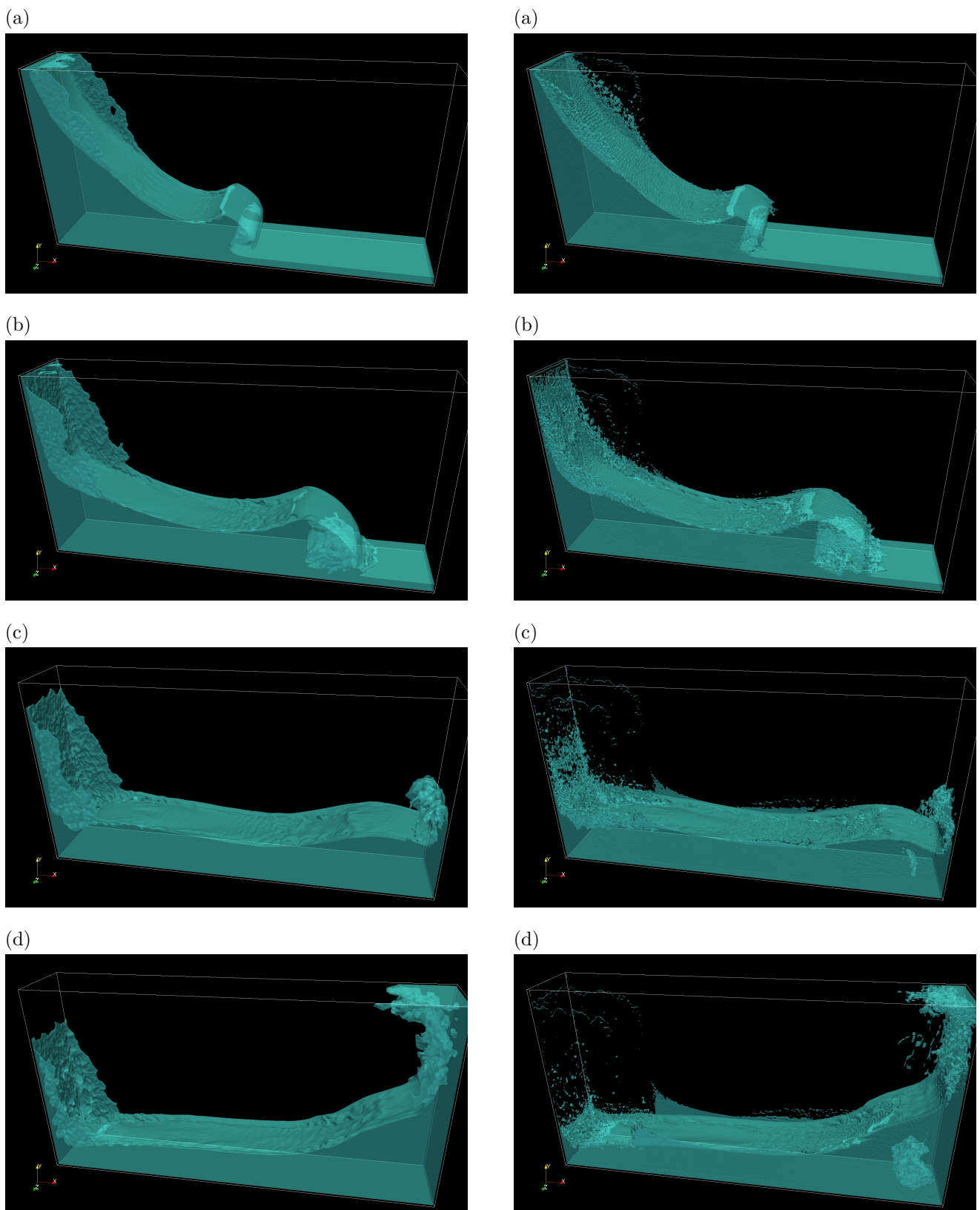


Fig. 7: The process of the 3d-breaking dam at time step (a) 0.2, (b) 0.3, (c) 0.4, and (d) 0.5 sec. Left: Level set method; right: THINC-WLIC scheme ($1024 \times 512 \times 176$ cells).

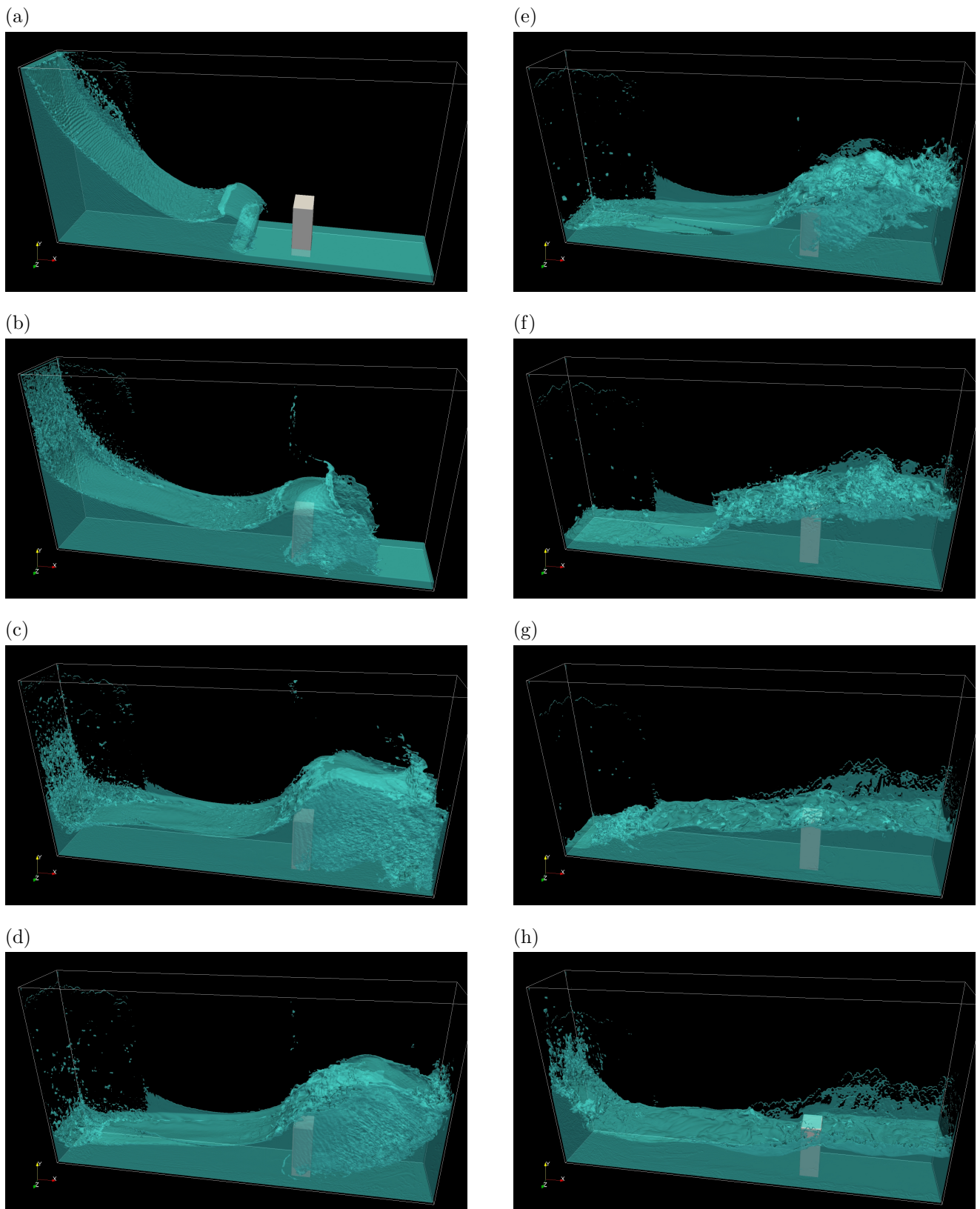


Fig. 8: The process of the 3d-breaking dam with a obstacle at time step (a) 0.2, (b) 0.3, (c) 0.4, (d) 0.5, (e) 0.6, (f) 0.8, (g) 1.0, and (h) 1.2 sec. THINC-WLIC scheme ($1024 \times 512 \times 176$ cells).