

CFDにおけるパラメータマイニングについて

Parameter Mining in CFD computations

白山 晋, 東大大学院, 東京都文京区本郷 7-3-1 工学系研究科環境海洋工学専攻, sirayama@nakl.t.u-tokyo.ac.jp

竹森恵一, 東大工, 東京都文京区本郷 7-3-1 システム創成学科

大和裕幸, 東大大学院, 東京都文京区本郷 7-3-1 新領域創成科学研究科環境学専攻

太田高志, 日本 IBM, 神奈川県大和市下鶴間 1623-14 大和事業所内 B 館 4F 東京基礎研

Susumu SHIRAYAMA, Dept. of Environmental & Ocean Engineering, School of Engineering, the University of Tokyo

Keiichi TAKEMORI, Dept. of Systems Innovation, School of Engineering, the University of Tokyo

Hiroyuki YAMATO, Graduate School of Frontier Sciences, the University of Tokyo

Takashi OHTA, Tokyo Research Laboratory, IBM

Recently, we can access many kinds of CFD codes to compute a flow field. However, selecting the suitable code for the purpose of the computation is not easy for users have not knowledge of CFD and no concern about the feature of computer system. In additions, it is quite difficult to determine the appropriate computational parameters even if a well-established CFD code is utilized. In this study, we propose a framework for the selection process of the parameters using distributed resources such as computer, database and knowledge.

1. はじめに

CFDが発展するとともに、多くの計算プログラムが生み出されている。そのほとんどが、制御構造が単純であるというプログラム上の特徴をもつ。大枠となる数値解法が60年代にほぼ確立されているためである(圧力方程式をベースにするものなど)。従って、プログラム自体は構造化されているものが多く、部分的な書き換えによって基礎研究の成果を盛り込むことができた。これが、淘汰されることが少なく、プログラムが増え続けている一つの理由である(例えば、複雑現象を含まない非圧縮性流体に対するプログラムは、研究者コードと呼ばれるものを含めると数十、あるいは百を超えるといわれている)。この結果、ユーザーが目的に適した計算プログラムを選択することが難しくなっている。また、あるプログラムを選択できたとしても、問題解決のために最適な計算パラメータを決定することは非線形性のために容易ではなく、効率的な計算を行うためには、流体力学以外の高度な専門知識が必要になる。

本研究の目的は、問題解決に適したパラメータを推薦するシステムを構築することである。この際、計算プログラムの種類もパラメータと見なす。本稿では、最適なパラメータを探索するためのフレームワークとルール抽出のためのものを提案する。前者は、主として計算量を制約条件とした本計算の前段階としてのパラメータの絞り込みに対応する。後者は未知の数理的制約条件を補うためのものである。

2. パラメータの階層的マイニング

先述したように同一の計算対象に対して適用可能な計算プログラムは多く存在する。はじめに計算プログラムをいくつかの項目に従ってコード化し、第一のパラメータ空間を形成する。次にあるプログラムが選択された場合の計算パラメータを第二のパラメータ空間として定義する。さらに計算環境をパラメータに加え、すべてのパラメータ空間

の中から最適なものを階層的に探索する。

3. 遺伝的アルゴリズムによるパラメータとルール抽出

探索空間は、計算手法などの離散のパラメータ、時間刻み幅などの連続的なものから構成され、CFL条件などの数理的拘束条件から探索から除外される部分を持つ。また、ユーザーが与える目的関数は簡単なものであっても強い非線形性をもつことが予想されるため、一般的な最適化手法を使うことは得策ではない。本稿では、遺伝的アルゴリズムを採用し、スキーマ解析によってルール抽出を行う。

4. 並列計算環境の利用

コストパフォーマンスの観点から、計算環境としてPCクラスタの利用を考える。この場合、PC間が高速回線で結ばれている必要はない。将来動向も考慮し、Fig.1に示す無線LANによるノートパソコンを用いたクラスタシステムを構築し、パラメータマイニングを行う。



Fig.1 Wireless Cluster Personal Computing system (WCPC) using Note PC.

5. おわりに

CFDの適用問題が拡大するとともに、CFDの専門家以外の利用が更に増えるものと予想される。流体力学が難しいことは変わらないが、提案するシステムによって、結果の解釈に至る工程を短縮することは可能であろう。