

大規模 PC クラスタを用いた統一解法による 流れと熱伝導の連成シミュレーション

白崎実, 姫野龍太郎
理化学研究所

Numerical Simulation of Flow and Heat Transfer Using Unified Method on Large Scale PC-Cluster

by
Minoru SHIRAZAKI and Ryutaro HIMENO

ABSTRACT

Heat transfer between fluid and solid, which occurs in heat exchangers, steam generators and so forth, is one of the most important phenomena in the field of engineering. In this paper, a coupling phenomenon including flow of thermal fluid and heat transfer in a solid is analyzed using the finite element method on a large scale PC-cluster system, the RIKEN Super Combined Cluster (RSCC). To estimate thermal interaction between fluid and solid, both flow of thermal fluid and heat transfer in solid must be considered. As a unified method for the coupling analysis, a method based on the assumption that the solid is a virtual fluid in which the flow velocity is zero is selected. We can simulate flow of the thermal fluid and heat transfer in the solid by solving the same governing equations. Almost all processes of the computation can be parallelized because an exchange of thermal boundary conditions between the fluid and the solid is not necessary. High parallel efficiency is achieved on parallel environment. Internal and external thermal flows of a tube array are analyzed with consideration of heat transfer. Flows around a heatsink mounted on a CPU and heat transfer in the heatsink are also analyzed. It is confirmed that the computation of the coupling phenomenon can be achieved with high parallel efficiency on the large scale PC-cluster system using this approach.

1. はじめに

近年、熱交換器をはじめとする熱機器の小型化、高性能化の要求はますます高まっている。熱交換器では、固体を介した異なる流体間での熱交換がよく見られる¹⁾。このような熱交換においては、熱流体と固体との間の熱伝達とともに固体内部の熱伝導がみられ、詳細な数値解析のためにには、流れと熱の連成現象を正しく扱う必要がある。また、実際の熱機器の形状は複雑なことが多いため、複雑形状を取り扱う必要があり、その複雑形状に対する計算を行うためには、大規模解析への対応が求められる。この場合、多数のプロセッサを利用する並列環境において、効率よく計算できることは重要である。

著者らはこれまで、熱流体の流れと固体の熱伝達との連成解析を行う並列有限要素法コードを開発し、固体を介した複数の流体間での熱交換の解析を行ってきた²⁾。ここで、流れと熱の連成方法としては、固体を流速がゼロである仮想的な流体と考えて、流体と固体とを統一的に取り扱う方法^{3), 4)}を採用している。この連成方法では、流体—固体間ににおいて境界条件をやりとりすることなく、熱的な影響を自然に取り扱うことができる。解くべき方程式の規模は大きくなるものの、並列計算の際に効率の低下をまねくアイドリング時間の発生がなく、並列環境に適しているという特徴がある⁵⁾。ここでは、本手法の大規模な PC クラスタへの適合性を検証するとともに、大規模な流れと熱との連成シミュレーションを実施する。

2. 計算方法

熱流体の流れと固体内部の熱伝導とを同時に解くため、支配方程式として、次に示す非圧縮性流体に対する連続の式、Navier-Stokes 方程式、エネルギー方程式を用いる。なお、ここでは浮力は無視している。

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} = -\nabla p + \frac{1}{Re} \Delta \mathbf{v} \quad (1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (2)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) T = \frac{1}{RePr} \Delta T \quad (3)$$

\mathbf{v} , p , T はそれぞれ無次元化された流速ベクトル、圧力、温度であり、 Re , Pr は、Reynolds 数、Prandtl 数を表す。流体と固体とを分離せずにひとつの方程式系として扱うために、固体部分では常に流速は 0 であるとし、(1), (2)式の計算の際には流体部分の寄与のみが考慮されるようとする。ただし、図 1(A)に示すように、流体—固体の界面と要素界面を一致させて、この界面をまたぐ要素ができるないように格子を生成しておく。このような非構造格子では流体部分の要素と固体部分の要素に個別の物性値を与えることが可能である。固体領域において、(3)式の $RePr$ の値を適切に指定することにより、流体と固体の熱拡散率の違いを表現することができる。また、(3)式で他の熱的な効果を考慮する場合でも、流体、固体のそれぞれの要素において、0 あるいは 1 の値を持つマスキングパラメータを与えておけば、流体部分あるいは固体部分でのみ定義される項を導入することができる。

以上により、固体部分に対しては実質的に熱伝導方程式のみが解かれ、流体との界面での熱伝達の効果は自然に考慮されることになるため、境界条件の交換について考慮する必要がなくなる。また、並列計算を行う際に、本手法では、与えられたプロセッサ全てを常に使用することが可能であり、高い並列化効率のもとでの計算が可能となる⁵⁾。

これらの支配方程式を Fractional Step 法⁶⁾により時間方向に分解し、圧力を陰的に、速度と温度は陽的に取り扱い、有限要素法にもとづいて空間の離散化を行う。この際、複雑形状への適応性を考えて、四面体一次要素を用いる。また、解析領域はグラフ分割ツール METIS⁷⁾により、要素をベースとして領域分割し、それぞれの部分領域の計算は各プロセッサが必要に応じて通信を行いながら並列に処理する。このメッセージパッシングのための通信ライブラリとしては MPI (Message Passing Interface) を使用する。なお、

圧力 Poisson 方程式の求解には、共役勾配法(CG 法)を用いる。

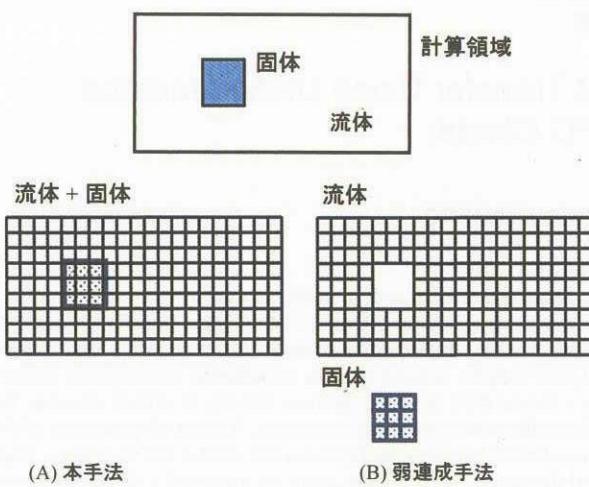


図 1 計算格子の概念図

3. 大規模 PC クラスタへの適合性

3.1 RSCC (RIKEN Super Combined Cluster)

著者らの所属する理化学研究所では、2004 年 3 月にスーパーコンピューターシステムを従来のベクトル並列型 (VPP700E/160 プロセッサ) を中心としたものから、PC クラスタを中心とした新システムへの置き換えを行った。この新システムは、RIKEN Super Combined Cluster (RSCC) と呼ばれ、2,048CPU の Linux クラスタシステム（総演算性能 12.4TFLOPS）を中心核に、単一プロセスで大量メモリが必要な計算用の大規模メモリ計算機（共有メモリ型ベクトル計算機 NEC SX-7/32、主記憶 256GB、282.5.GFLOPS）、フロントエンド、高速磁気 DISK 装置（20TB）、テープライブラリシステム（200TB）から構成される複合的なシステムである。特に、Linux クラスタシステムは、1 ノード 2CPU (Intel Xeon 3.06GHz) の 1,024 ノードから成り、5 つのセグメントで構成されている。最大のセグメントは 512 ノード 1,024CPU で、各ノード間を InfiniBand (双方向通信可能で片方向 8Gbps) ネットワークで内部接続されている。残りのノードは 128 ノード毎に 4 つのセグメントを構成しており、InfiniBand が 1 セグメントで、他の 3 つのセグメントは Myrinet(双方向通信可能で片方向 2Gbps) ネットワークで内部接続されている（表 1）。今回は、この RSCC にお

いて、InfiniBand により接続された 512 ノード 1,024 プロセッサからなるセグメントを用い、128 プロセッサまでについて、計算、測定を行った。

3.2 ベンチマーク問題

計算サイズの変更を容易にするために、ベンチマーク問題として図 2 に示すような立方キャビティ内の流れと固体の熱伝導の問題を設定した。上面に一様な流速を与える、ひとつの側面は加熱、それと向かい合った側面は冷却された立方キャビティがある。この内部にやはり底面を加熱された固体の立方体が置かれており、この固体がキャビティ内部の流体と熱交換を行うという状況である。6,000,000 要素（約 600 万要素）、10,368,000 要素（約 1,000 万要素）、24,576,000 要素（約 2,400 万要素）からなる 3 つのモデルに対してプロセッサ数を変えて計算を行い、速度向上比を求めた。図 3 は、 $Re=100$ 、 $Pr=0.71$ とした場合の $y=0.5$ 断面における等温線図である。キャビティの 2 つの壁、固体立方体の加熱底面、そしてキャビティ内部の流れによって温度場が決定されていることがわかる。

3.3 速度向上比

1 プロセッサでの計算に要した時間を T_1 、 n プロセッサでの計算に要した時間を T_n とした場合、 n プロセッサに対する速度向上比 S_n は、

$$S_n = \frac{T_1}{T_n} \quad (4)$$

で与えられる。しかし、ここでは、問題の規模が大きく、1 プロセッサでの計算時間を算出することができないため、16 プロセッサでの計算に要した時間 T_{16} を基準にし、

$$S_n = \frac{T_{16} \times 16}{T_n} = \frac{T_1^*}{T_n} \quad (5)$$

として、速度向上比を算出している。

図 4 に、それぞれの各モデルに対する速度向上比を示す。横軸はプロセッサ数であり、縦軸は(5)式で定義される速度向上比である。この図から、約 600 万、1,000 万、2,400 万要素のいずれの計算モデルでもほぼ同様の傾向であることがわかる。

ここでは、用いたコードに特別なチューニングや通信隠蔽等は行っていない。このため、まだ改善の余地は残っているが、それでも、流体部分と固体部分を統一的に同一の方程式を扱っていることから、領域分割法を用いた通常の流体解析コードと同程度の、まずまずの並列化効率は得られていることがわかる。

今回利用した RSCC のシステム上では、ここで取り扱っ

表 1 RSCC システムの PC クラスタ

	Linux Cluster 1	Linux Cluster 2-5
CPU 数	512 nodes / 1,024 CPUs	512 nodes / 1,024 CPUs (in total)
CPU	Inter Xeon 3.06 GHz	Inter Xeon 3.06 GHz
Memory	2TB (4GB×512)	2TB (4GB×512)
OS	Redhat + SCore	Redhat + SCore
HDD	74.7TB(146GB×1×512)	74.7TB (146GB×1×512)
Interconnect	InfiniBand (1way 8Gbps)	InfiniBand (1way 8Gbps) 1 システム Myrinet XP (1way 2Gbps) 3 システム

た 600 万要素程度の計算規模があれば 128 プロセッサでも理論的な速度向上比のおよそ 75%程度、つまり 96 台分程度の速度向上を達成できることがわかった。

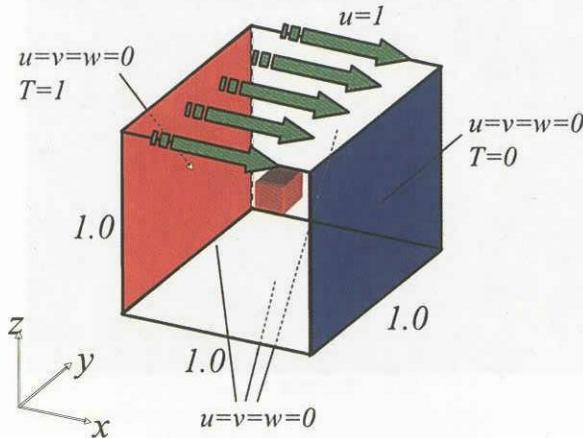


図 2 ベンチマーク問題

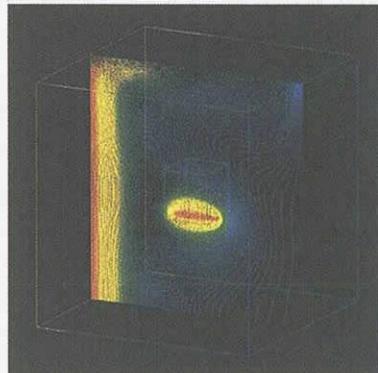


図 3 ベンチマーク問題の計算結果

4. 大規模解析

図 5 は、比較的大きい解析例として、 $L/D=2$ (L : 中心間距離, D : 円管直径) の 4×4 円管群の内部を流れる高温流体と外部を流れる低温流体の熱交換について解析したものである。総要素数は 4,379,697, 総節点数は 745,148 である。Reynolds 数は、円管内外ともに 100 であり $t=35$ における温度分布を示している。

さらに、複雑形状を有する熱機器の大規模解析の例として、図 6 に示すような、ヒートシンクおよびファン (CPU クーラー) を取り扱う。図 7 は、ヒートシンクの部分の CAD データであり、このデータをもとにメッシュジェネレーターを用いてヒートシンクと外部領域に四面体メッシュを生成したのが図 8 である。この有限要素メッシュは、14,800,760 要素、2,477,307 節点からなっている。ここでは、簡易的に、初期に $T=0$ の流体およびヒートシンクに対して、ヒートシンク底面の CPU が接する位置で $T=1$ を与え、ファンから鉛直下向きに一様流が流れ込んでいるとしており、Reynolds 数は 100 としてある。また、解析領域の 4 つの側面では流出条件を与えている。図 9 は計算開始直後のヒートシンクの表面の温度分布であり、図 10 は $t=80$ の $z=\text{const.}$ 面における流速ベクトルの分布を表している。

いずれも定性的には妥当な結果を得ている。しかし、薄い管壁や CPU 用ヒートシンクの各のフィン内部の詳細な温度分布を調べるためにには、より細かい要素分割が必要である。

5. おわりに

流れと熱の統一的な連成手法の大規模 PC クラスタ環境への適合性を検証した。その結果、大規模な PC クラスタ環境においても、効率よく計算できる手法であることがわかった。さらに、実際に複雑な形状を有する対象について、比較的計算規模の大きい解析例として、CPU 用ヒートシンク内部および外部の流れと熱の解析を約 1,500 万要素の規模で実施した。今後、実験を実施し、計算結果との比較を行っていく予定である。

参考文献

- 1) 例えば、日本機械学会、伝熱工学資料・改訂第 4 版
- 2) M. SHIRAZAKI and R. HIMENO, Parallel finite element analysis of flow and heat transfer on PC-cluster, *The 4th ASME/JSME Joint Fluids Engineering Conference (CD-ROM: FEDSM2003-45445)*, Honolulu, Hawaii, U.S.A., July 6-11, 2003
- 3) 水俣圭子他、流体－固体熱連成問題の有限要素解析構造工学における数値解析法シンポジウム論文集 15 (1991) 41-44
- 4) 奥田洋司、大城勝史、熱流体／構造系連成問題の統一解析およびそのデータ並列化に関する研究、日本計算工学会論文集, *Transactions of JSCES*, 1, Paper No. 19990023 (1999)
- 5) 白崎実他、工学的な設計のための流れと熱の数値シミュレーション、日本流体力学会誌「ながれ」, 22, 3 (2003) 247-259
- 6) Donea J. et al.: Finite Element Solution of The Unsteady Navier-Stokes Equations by A Fractional Step Method, *Comput. Methods in Appl. Mech. Eng.* 30 (1982) 53-73
- 7) <http://www-users.cs.umn.edu/~karypis/metis/>

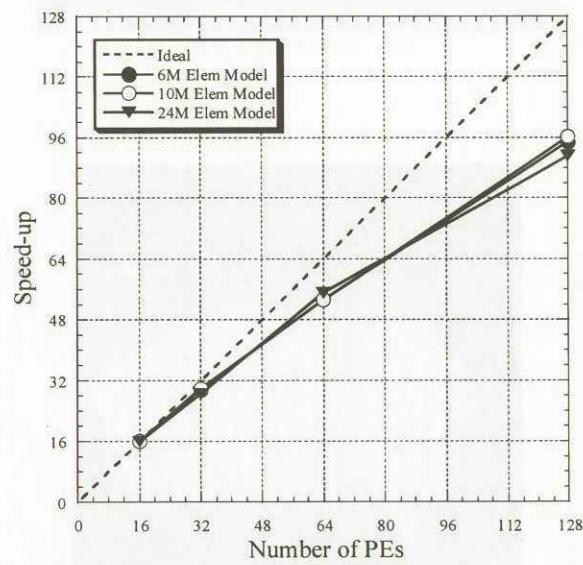


図 4 速度向上比

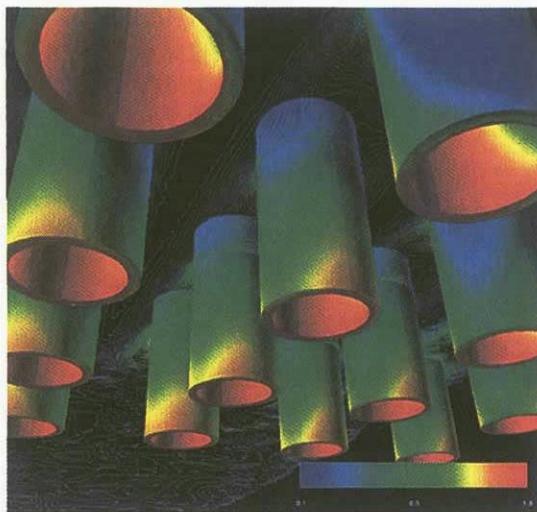


図 5 円管群内外の温度分布

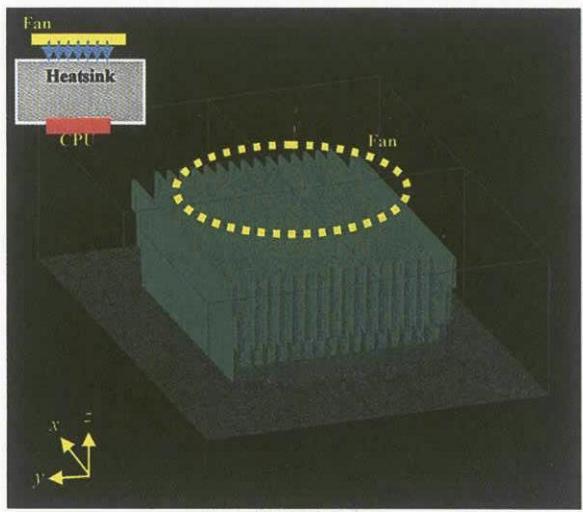


図 8 有限要素メッシュ

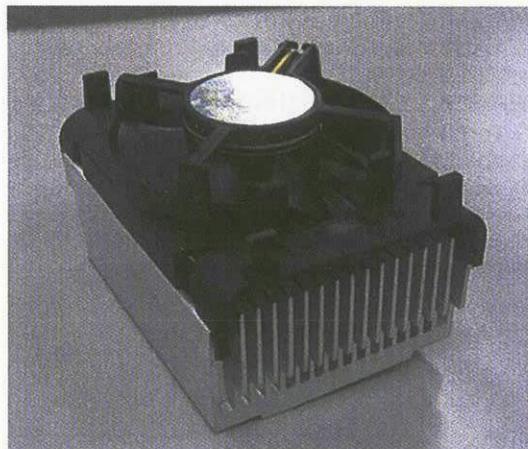


図 6 CPU クーラー(実物)

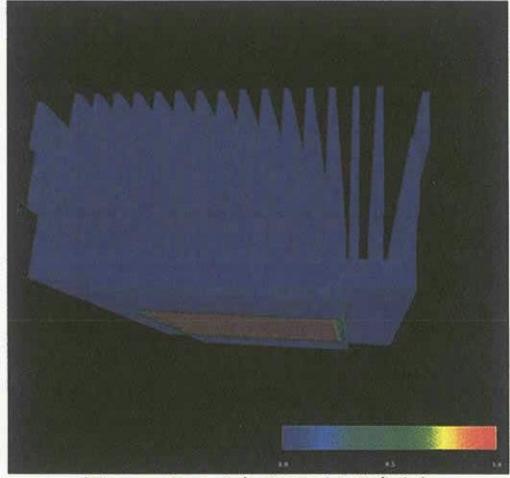


図 9 ヒートシンク表面における温度分布

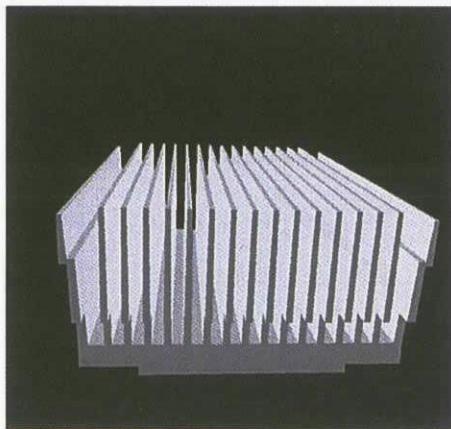
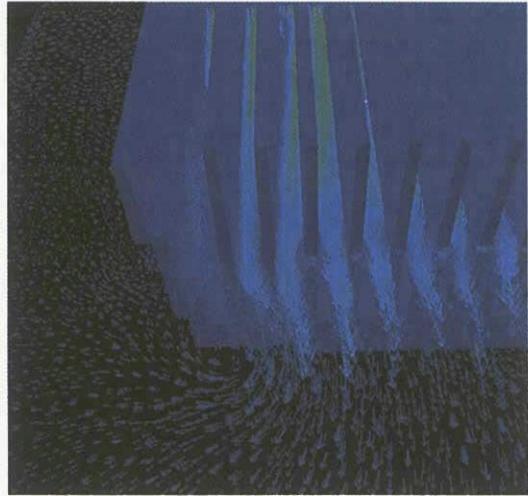


図 7 ヒートシンクの CAD モデル

図 10 $z=\text{const}$ 面における流速ベクトル分布 ($t=80$)