

3

圧縮性流体のMPPによる数値シミュレーション

Numerical MPP Simulation on Compressible Fluid

大西橋平¹, 金沢英寿², 和田安弘³, 小川哲³, 福田正大³

NEC, Fundamental Research Labs.¹, NEC, Informatec Systems Ltd.², National Aerospace Laboratory³

ABSTRACT

The computational fluid dynamics(CFD) has an increasingly important role in the design and development of aeronautical and space vehicles. It is well known the costs of the design of aerospace vehicles can be greatly reduced by using the CFD technique. Recent trend of CFD is the computations around more complex and realistic configurations. Considering the limitation of the cost performance of single processor shared memory machine, progress is being made in the direction to the application of massively parallel processor(MPP) architectures. In this presentation, we introduce the CFD calculation using the message passing interface(MPI) in the NAL MPP system, Intel Paragon XP/S25(336 nodes). Discussions are focused on the MIMD(Multiple Instruction of Multiple Data) type treatment for the TVD scheme code of 2-D Euler equations. The numerical higher order scheme is the 5 points difference one. The numerical simulations of shock diffraction around a 90° corner are performed. The numerical region is divided into regular small regions which correspond to MPP nodes: each node takes care of local numerical calculations with different boundary conditions. In the present situation, the local region is categorized into 9 types. Any small region belongs to one of them. Boundary values with two additional meshes are transferred with each other using MPI in different configurations. Moving wave front are visualized by applying the MPI in the standard MIMD treatment. The efficiency against the space complexity will be discussed by changing mesh size and number of nodes.

1 はじめに

最近の超並列処理と情報ネットワークの発展に伴い計算流体力学においても超並列計算技術の重要性が認識されてきている。計算対象の複雑化および乱流等の微細構造のより詳細な把握のため、空間メッシュの細分化など問題の計算サイズの増大に伴う大容量データに対応する必要がある。コストパフォーマンスの点から従来の共有メモリ型大型計算機では対処しきれないため、プロセッサとメモリを分散化し、それらを通信でネットワーク化するという超並列計算機の特徴を生かして問題解決にあたらなければならない。とくにMIMD(Multiple Instruction Multiple Data)型計算機においては、プロセッサ間通信(MPI(Message Passing Interface))を計算スキームの中にあらわな形で取り入れなければならず、問題ごとに個別にMPIを対処させるようなプログラム開発のスタイルをとりなければならない。このためには従来とは異なる発想で計算コードの開発に取り組まなければならないが、計算機にマッチした計算手法の開発が新たな可能性を秘めていることも意味しているわけである。このような観点から、本論文では2次元圧縮性流体計算のTVDコードを応用して、336ノードのParagon XP/S25におけるMPPシステムにおいてMPIを用いてMIMD型計算を行った例(ノード数14~224)を紹介する。

2 計算スキーム

数値計算は2次元Euler方程式を使い、基本的問題の一つである衝撃波の90°コーナーにおける回析問題にたいして行っている。計算スキームは和田[1]によるリーマンソルバーを使いMUSCLタイプの高精度化をおこなったものを使っている。数値流束の決め方として、FDS(Flux Difference Splitting)法及びFVS(Flux Vector Splitting)法が知られているが、ここではFVS法に従って数値流束を求めている。

保存則を表す式はEuler Equations

$$\begin{aligned}\frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} &= 0 & \mathbf{q} = (\rho, \rho u, E)^t \\ \Rightarrow \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + \mathbf{A} \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial x} &= 0 \\ \mathbf{A} = \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{q}} &= \mathbf{T} \mathbf{A} \mathbf{T}^{-1}\end{aligned}$$

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} u & 0 & 0 \\ 0 & u+c & 0 \\ 0 & 0 & u-c \end{pmatrix}$$

FVS法セル界面でのフラックス F_M (カラーフォント) を

$$F_L = F_L^+ + F_L^- \quad F_R = F_R^+ + F_R^-$$

$$F_M = F_L^+ + F_R^-$$

$$F^+ = \begin{cases} F & \text{if } a > 0 \\ 0 & \text{if } a < 0 \end{cases} \quad F^- = \begin{cases} 0 & \text{if } a > 0 \\ F & \text{if } a < 0 \end{cases}$$

のように分割する。Euler 方程式の場合、この方式を表現すると

Roe の FDS 方式は

$$\mathbf{F}_M = \frac{1}{2} [\mathbf{F}_L + \mathbf{F}_R - |\bar{\mathbf{A}}| \Delta \mathbf{q}]$$

$$\bar{\mathbf{A}} \Delta \mathbf{q} = \Delta \mathbf{F}$$

$$|\mathbf{A}| = |\mathbf{T} \mathbf{A} \mathbf{T}^{-1}| = \mathbf{T} |\mathbf{A}| \mathbf{T}^{-1}$$

Steger-Warming's の FVS は、

$$\mathbf{F}_M = \mathbf{F}_L^+ + \mathbf{F}_R^-$$

$$\mathbf{F}^\pm = \mathbf{T} \mathbf{A}^\pm \mathbf{T}^{-1}$$

$$q \mathbf{A}^\pm = \frac{\mathbf{A}^\pm |\mathbf{A}|}{2}$$

和田-Liou's の FVS は、Roe 法, HLLE 法等が抱えている膨張波も不連続な波と近似してしまう膨張衝撃波の問題を克服するために膨張波の領域において Entropy 条件を満足させた形で勾配を持った領域に設定しなおす手順で導かれたもので、HLLE 法の数値粘性 $F_{LR,HLLEM}$ に対し以下のように与えられる。

$$\mathbf{F}_{LR} = \mathbf{F}_{LR,HLLEM}$$

$$-\frac{1}{4} U_{LR} \left\{ 1 - \min \left(1, \frac{|b_R|}{U_{LR}} \right) \right\}^2 (\mathbf{q}_R - \bar{\mathbf{q}}_2)$$

for $(U + c)_L < 0 < (U + c)_R$

$$U_{LR} \equiv \frac{1}{2} \min \{ \Delta(U + c), b_R - b_L \}$$

$$= \mathbf{F}_{LR,HLLEM}$$

$$-\frac{1}{4} U_{LR} \left\{ 1 - \min \left(1, \frac{|b_L|}{U_{LR}} \right) \right\}^2 (\mathbf{q}_1 - \bar{\mathbf{q}}_L)$$

for $(U - c)_L < 0 < (U - c)_R$

$$U_{LR} \equiv \frac{1}{2} \min \{ \Delta(U - c), b_R - b_L \}$$

3 超並列計算

3.1 計算領域とのマッチング

図 1 に示されているような計算領域と境界条件に対して、局所的な矩形領域をそれぞれのプロセッサに対応させる。陽解法であるから、それぞれのプロセッサが独自に差分計算を行うことができるようにするために、各局所領域は隣接領域と境界条件とのマッチングを行うために実空間メッシュより余分に 2 行 2 列の縁領域を持っていて、それらを MPI によってデータ交換を行う。図 1 の形状では図 2 に示されているような全部で 9 種類のタイプの異なった MPI を行う局所領域を考慮すればよいことになる。図 2 にはその MPI のタイプに応じて T_0 から T_8 までの、それぞれが持っている境界条件と縁領域のデータ交換のパターンが示されている。図 1 には実空間に対して、それらをタイル張りのようにプロセッサが空間分割を行った例が同時に示されている。

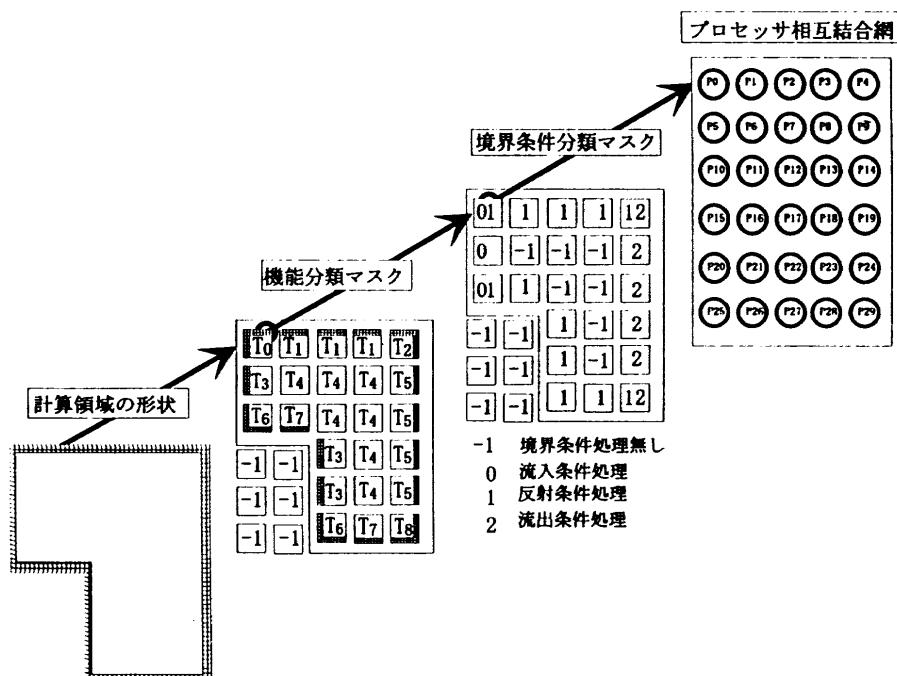


図 1 計算領域と PE との対応

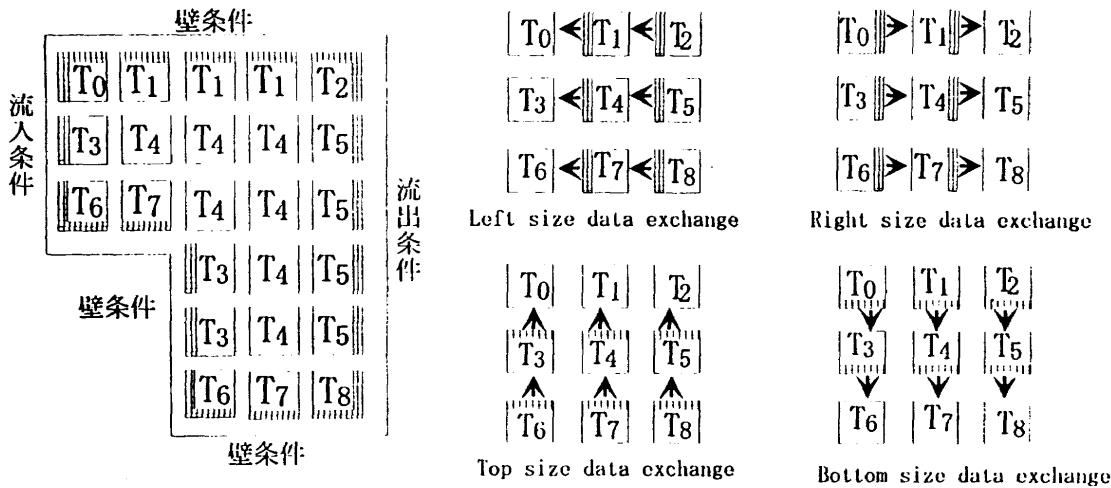


図2 PE間のデータ交換のパターン

3.2 並列化効率

計算格子は1プロセッサあたり 71×71 を基本に固定している。図3はPE数と計算時間、図4はPE数と速度向上比の関係を示したものである。特徴的なことは、PE数が30以下程度と少ない場合は、通信負荷

のため並列化効率は低いがそれ以上では境界条件のやりとりは、メッシュ上での差分計算に比べ無視できる程度になっていることである。5点差分スキームでは、並列化効率が極めてよいことが示されている。

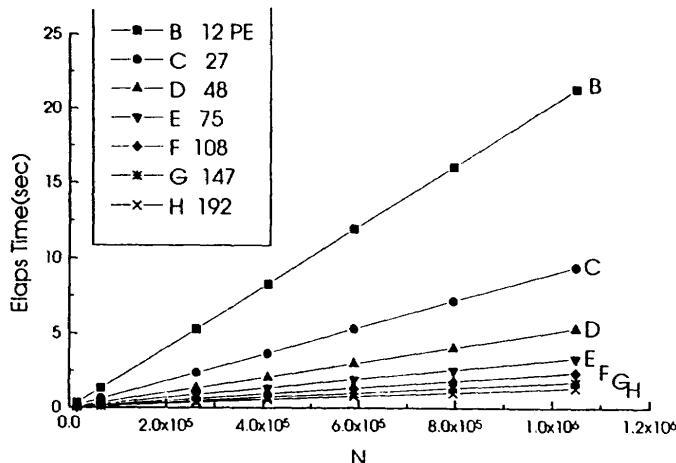


図3 計算時間とPE数との関係

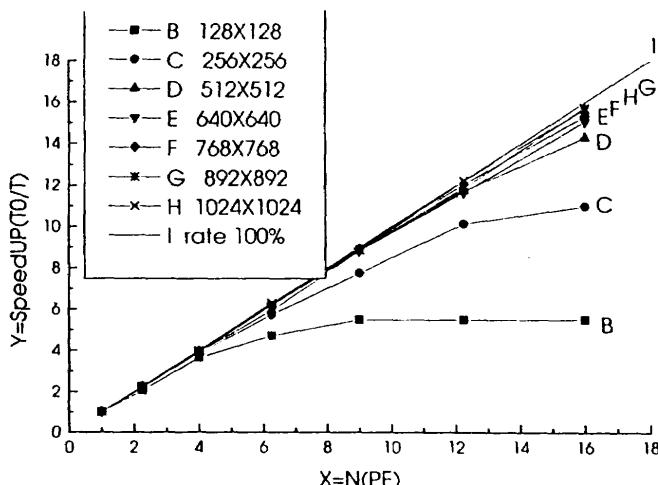


図4 速度向上比とPE数との関係

3.3 可視化

物理量の可視化は、各プロセッサの持っているビットマップデータを計算領域に対応させ一個の表示専用プロセッサにマルチキャスト的にデータを集めx-window上で表示できるように設計した。これによって計算部分とプロセッサの1対1対応が実現されプログラム開発の効率をはかった。

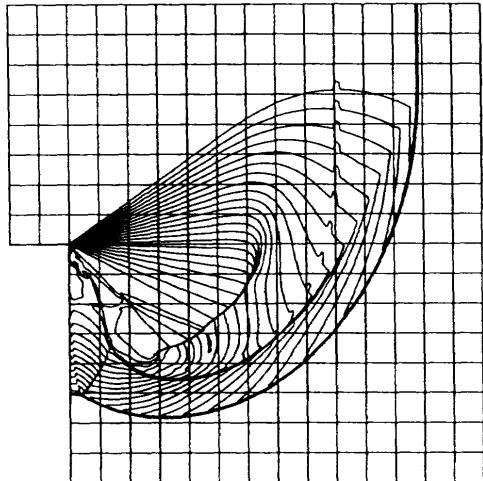


図5 密度分布

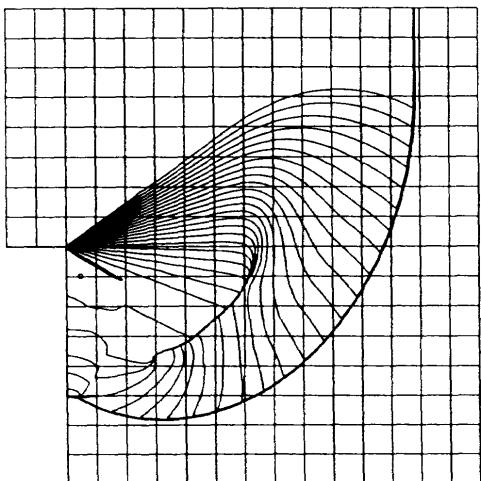


図6 圧力分布

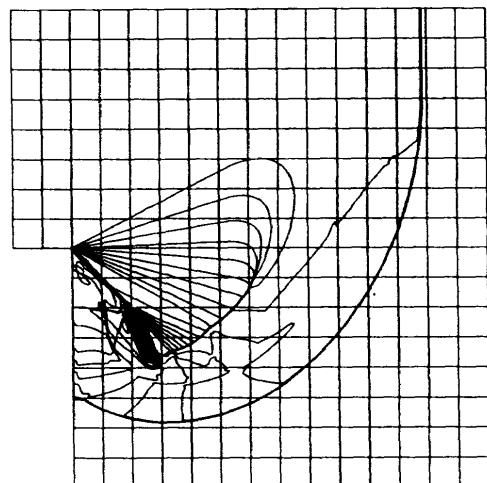


図7 速度分布

3.4 計算結果

図5, 図6, 図7, にそれぞれ密度分布, 圧力分布, 速度分布の等高線図が示されている。

4 終わりに

Paragonによる2次元圧縮性流体の超並列計算の特徴は、境界条件に応じて各PEのMPIのタイプを規定することによって、並列化の効率を著しく向上することが実証できたことである。このような取扱い方を発展させることによって、オブジェクトオリエンティド型の計算手法を複雑な境界など局所部分に適用することができ、場所に応じたヘテロな計算スキームを導入できることになる。

参考文献

- [1] Y.Wada, AIAA 94-0083,1994.