

共同利用(産業利用トライアルユース: 先端研究施設共用促進事業『みんなのスパコン』TSUBAME によるペタスケールへの飛翔) 成果報告書 平成 22 年度 課題種別

素反応過程を考慮した燃焼のシミュレーション技術の開発

Development of Simulation Technology on Combustion Considering Elementary Reaction Process

利用課題責任者

吉田 正典

Masatake Yosida

所属

株式会社 爆発研究所

Explosion Research Institute Inc.

<http://www.bakuhatsu.jp/>

素反応過程を考慮した化学反応計算では、その反応モデルの数に応じて膨大な計算時間がかかる。本課題では、水素と酸素の反応で混合物質が形成される様子をシミュレーションした。シミュレーションソフトウェアとしては、衝撃波や化学反応の解析に実績のある Metacomp 社の汎用流体解析ソルバーCFD++を使用した。その結果、大規模な化学反応モデル(格子数、最大 2500 万)における TSUBAME2.0 での大規模並列計算時の計算スケーラビリティを評価するに至った。

To achieve satisfying results when simulating combustion processes, computationally intensive reaction models are required, which also take elementary chemical reactions into account. The main task is to simulate the chemical reaction between oxygen and hydrogen for analyzing how both materials form and behave in the mixture. As for the simulation software, Metacomp Technologies general purpose fluid dynamics solver CFD++ has been utilized, which is well known for shock simulations and chemical analysis. The result has been achieved using the TSUBAME 2.0 highly parallel supercomputer, which can handle large-scale chemical reaction models with up to 25 Million elements.

Keywords: 燃焼、素反応、大規模数値シミュレーション

背景と目的

素反応過程を考慮した化学反応計算では、その化学種の数に比例して計算時間が膨大になるという問題点がある。今回、化学種 9 種、反応式 20 の化学反応モデルを使用して、商用ソフトウェア CFD++の大規模並列計算における計算スケーラビリティの評価を行った。

いるものの、大学・研究所レベルでの研究にとどまっておき、企業におけるシミュレーションのレベルには至っていない。本プロジェクトでは、一般の汎用性のあるプログラムを使って、乱流火炎やデトネーションといった高温/高圧火炎をより正確にシミュレートし、幅広い燃焼問題を解決するための技術を開発することを目的とする。

概要

燃焼現象を数値的に解析する技術は、現状でかなり進んでいるが、圧縮性かつ化学反応を伴う現象であることを考えると、燃焼現象を的確に捉え、汎用性のある誰でもが使えるプログラムというのはまだ無い。層流火炎についてはかなりシミュレートできるが、乱流現象をしっかり把握しなければならない乱流火炎、さらには高速火炎であるデトネーションにいたっては化学反応の素過程の圧力依存が最近やっと考慮されるようになってきて

結果および考察

今回使用した、素反応過程を考慮した化学反応モデルは化学種 9、反応数 20 の高圧水素の自着火問題であり、領域は二次元直方体形状、初期状態は常温空気で満たされており、領域内に高速で水素を流入させることで、内部空気との反応過程、それによって発生する乱流渦の状況などを再現するものである。格子数としては、50 万、1000 万、2500 万の 3 種類を用意し、まずは 2500 万格子での並列計算スケーラビリティの計測を行い、そ

(様式第 20) 成果報告書

の結果を考慮して 1000 万格子での高圧水素の自着火問題の解析を行った。

計測には 2500 万格子のモデルを使用し、計算ステップ数は 50step とした。(一部 500step でも検証行った) TSUBAME2.0 各 node の使用 core 数は 8 とし、並列数 16 から 512 までの計算を実施した。図 1 にグラフを示す。Clock Time は計算所要時間である。256 並列までは CPU Time とほぼ同じような数値を記録したが、512 並列で大きな違いが発生した。これは使用するノード数が多くなるにつれて、計算の前後に発生する node 間の通信などが無視できない大きさになっているためと考えられる。実際、並列数 16 と並列数 256 を比べると、並列数 16 倍に対して、計算効率は 13 倍となっているが、512 並列と比較すると、並列数 32 倍に対して、13 倍と計算効率がダウンする結果となっている。つまり今回の化学種 9、反応数 20、格子数 2500 万の化学反応モデルで 256 並列を採用することが望ましいことがわかる。

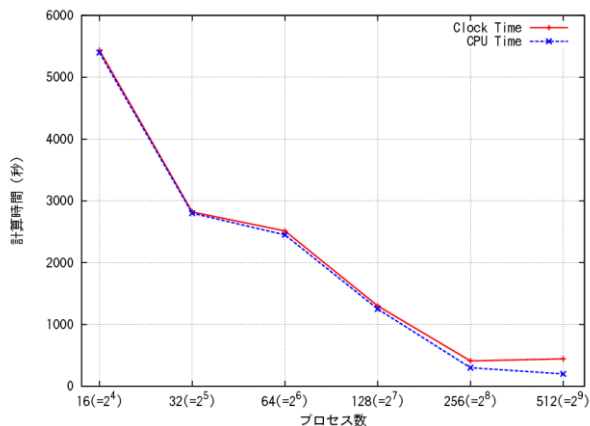


図 1 2500 万格子モデルの計算スケーラビリティ

並列数	step 数	Clock Time	CPU time	キュー
16	50	5435	5400	S96
32	50	2820	2800	S96
64	50	2513	2500	S
128	50	1300	1250	S
256	50	411	300	X
512	50	444	200	X
256	500	5695	5500	S
512	500	3628	3000	S

表 1 2500 万格子モデルの計算結果一覧

尚、TSUBAME の運用状況によって、使用するキューが異なるため(表 1 のキュー参照)、全く同じ環境での比

較ではないことに注意する。

次に格子数 1000 万のモデルに対して長時間の計算を実行した。並列方法は 32node(各 node 当たり 8core 使用)、合計 256 並列とした。ジョブは数回に分け、合計 70 時間弱のジョブを投入した。以下に可視化結果を示す。左側から高圧水素が噴出し、衝撃波が駆動されて右方向へと伝搬している。上下の壁面から乱れが生じ、反応が促進され出していることが分かる。



図 2 圧力 Contour、赤:高圧 ⇄ 青:低圧

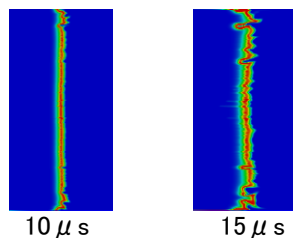


図 3 生成物の変化(H₂O)

まとめ、今後の課題

素反応過程を含む化学反応モデル(高圧水素の自着火問題)における大規模並列計算に関するスケーラビリティを計測した。その結果、化学種 9、反応数 20、格子数 2500 万のモデルに対して、最大 512 並列までの計算を実行し、そのスケーラビリティを評価した。今回のモデルでは 512 並列以上では効率が下がることが判明したが、今後、さらに規模の大きいモデルを使用することで(計算の前後で発生する通信時間よりも CPU Time が大幅に大きくなるようなモデル)、より多くの並列数でもスケーラビリティが発揮できる計算を実行できるはずである。また計算の規模が大きくなるにつれて、計算結果の保存に要する時間が増えるため出力タイミングに注意を要することも分かった。特に化学反応モデルでは化学種の数に応じた出力数となるため注意が必要である。実際、2500 万格子の計算では、主要出力データの出力に約 120 秒を要した。これは 256 並列でいうと 20step 分の計算時間に値する。

今後は 1024 並列以上の並列計算でスケーラビリティを向上させることが目標としてあげられる。