

TSUBAME

ESJ.



マルチGPU計算による衛生陶器のための 気液二相流シミュレーション

Numerical simulation of air/water multiphase flows
for ceramic sanitary ware design by multiple GPUs

Liグラファイト層間化合物における Li拡散に対するハイブリッド量子古典シミュレーション

A Hybrid Quantum-Classical Simulation study on the Li Diffusion
in Li-Graphite Intercalation Compounds

建築分野の数値流体解析における大規模計算

A Large-scale Simulation on CFD in Construction Industry

大規模地震における強震動評価と 屋内収容物の被害評価

Estimation of strong ground motion and damage of indoor objects during giant earthquake

マルチGPU計算による衛生陶器のための気液二相流シミュレーション

池端 昭夫* 吉田 慎也* 肖鋒**

* TOTO株式会社・生産技術センター **東京工業大学・大学院総合理工学研究科

衛生陶器など住宅水まわり商品の開発において、様々な設計課題に対応するため気液二相流体解析コードを自社開発している。空気と水の複雑な界面を適切な精度で再現するためには、信頼性の高い計算手法を用いた大規模計算が必要であり、大きな課題となっている。当社では計算手法の改良を進めるとともに、実製品への適用において大規模計算を加速するためGPUシステムに適したコード開発を行っている。

今回、TSUBAME 2.0において並列GPGPUアーキテクチャを効率的に利用できる大規模シミュレーションコードを実装することで、飛躍的に計算性能とシミュレーション精度を向上させることができた。

はじめに

1

当社では、衛生陶器や浴室、キッチンなどのあらゆる水まわり住宅設備機器を開発し、国内外で販売している。増大する省エネルギーや節水へのニーズに直面しており、設計や製造プロセスにおいて高い品質基準をクリアする必要がある。そのため、CAE設計ツールとして高精度な流体解析技術を開発し効果的に利用することは大変重要となっている。

Navier-Stokes方程式に基づいて、気泡混入や薄膜流れのような空気と水が混在する流れを計算する数値計算モデルにおいて、移流項の計算手法は計算安定性や精度において重要な役割を果たす。MUSCL法^[10]は最も代表的な移流計算手法とされており、市販の流体解析ソフトウェアに広く採用されている。MUSCLは基本的に一次式による内挿関数を用い、また風上化やリミッタの利用により安定化および単調性を保持している。しかし後述するとおり、MUSCLは拡散的であり、流れ場において急激な値の変化や不連続性を解くことは難しいと考えられる。さらに例えば液柱が壁に垂直に衝突した際に、現象が等方的にも関わらずグリッド依存性を示して薄膜が不自然に広がり、妥当な結果を再現できないことがある。

他の手法として、CIP法^[1-3]がロバストかつよりグリッド依存性の小さい高精度な移流計算手法として提案されている。CIPではマルチモーメントの概念を用いており、物理量の点値のみならず勾配値も更新する。CIPは三次精度を持ち、さらにセミラグランジェ法と組み合わせて効率的に計算することが可能である。しかしながらCIPは保存性を保証しないため、多相流における小さい水滴や気泡、薄膜流れの計算など、質量もしくは体積保存性が必要条件となる多くの実例において問題を生じることが分かっている。

実際の商品設計に適用できる数値シミュレーションを目的として、保存型CIP法の一つであるUTI-VSIAM3法^[4]を提案するとともに、二相流シミュレーションコードを実装した。このコードはGPGPUシステムにも移植され、さらに大規模高精度シミュレーションのためにTSUBAME 2.0スーパーコンピュータに最適化された。

本稿では、多相流における数値計算手法の改良およびGPGPUハードウェアへのコード実装における最近の我々の取り組みを示す。

移流方程式の高精度化

2

以下の移流方程式について考える。

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + u \frac{\partial \phi}{\partial x} + v \frac{\partial \phi}{\partial y} + w \frac{\partial \phi}{\partial z} = 0 \quad (1)$$

ϕ は移流される物理量を表し、 u 、 v 、 w は三次元流速場の各成分を表す。

一次元の保存型CIP法であるCIP-CSL法^[5]では、計算する変数として少なくとも二種類のモーメントを用いる。多次元化する定式化は種々考えられているが、メモリ容量や計算量が比較的小さい方法として、図1に示すように体積積分平均値VIA (Volume Integrated Average) および面積積分平均値SIA (Surface Integrated Average) の二種類のモーメントのみを用いる方法が提案された^[6]。この方法では、各軸方向に分割して順に計算する次元分割法を用いる。各軸の計算では、一次元の保存型CIP法を用いる。一つのセルにおいて二次関数もしくは有理関数による補間多項式を構成することで、気液二相流れのような不連続性を持つ複雑な流れ場に適用できる。本手法では各軸方向にVIAとそれをはさむ二つのSIAで直ちに補間多項式を求めることができる。SIAはセミラグランジェ法で更新し、VIAは一般的な有限体積法同様のフラックスの収支計算で更新するため、保存性が保証される。このマルチモーメント法はVSIAM3 (Volume/Surface Integrated Average based Multi-Moment Method) とよばれ、移流方程式のみならず一般的な流体解析ソルバー全体の定式化として提案されている^[6]。

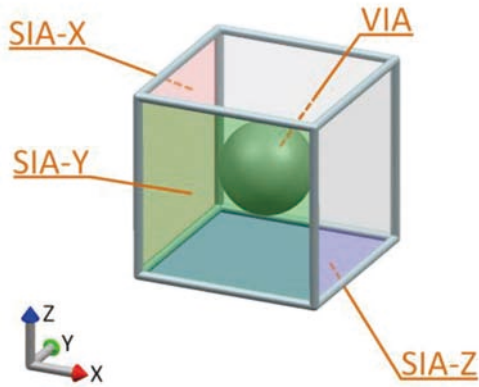


図1 VIAおよびSIAの定義

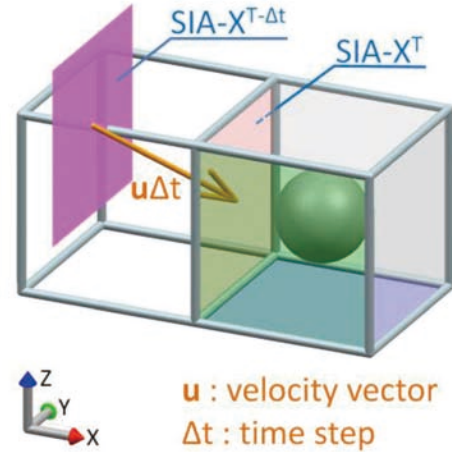


図2 SIAの非次元分割計算

もとのVSIAM3では、多次元計算において一次元移流方程式計算を繰り返す簡易な方法を用いている。別の手法として、次元分割することなく多次元計算を行う以下の手法を提案する。

図2に示すようにSIA-Xの移流計算について考える。移流方程式を、以下のように二つのステップに分割する。

ステップ1:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + u \frac{\partial \phi}{\partial x} = 0 \quad (2)$$

ステップ2:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -\frac{\partial v \phi}{\partial y} - \frac{\partial w \phi}{\partial z} + \phi \left(\frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) \quad (3)$$

ステップ1では、式(2)から面の法線方向、すなわちX軸方向について一次元保存型CIP法を用いてSIA-Xの中間値を計算する。次にステップ2では、式(3)から面内方向、すなわちY、Z軸方向について中心差分を用いてSIA-Xの中間値を更新し、次の時刻ステップのSIA-Xとする。SIA-Y、SIA-Zについても同様の手順で求められる。VIAについては、数値積分にて各流入面のフラックスを計算し、有限体積における収支計算によって更新する。数値積分点の値は上記SIAの計算方法を流用できる。この手法はUTI-VSIAM3 (Unsplit Time Integration VSIAM3) とよばれ、本質的に各次元方向について完全対称な定式化である^[4]。

移流計算手法の精度を検証する。初期値分布として、TOTOの"T"の字の内部を1、外部を0と設定し、反時計回りの剛体回転速度場とする。図3に一回転後の数値計算結果を示す。VSIAM3とUTI-VSIAM3はMUSCL法よりも明らかに高精度な結果である。本テストではVSIAM3とUTI-VSIAM3に明確な差は現れていないが、UTI-VSIAM3の次元対称性は実際の適用問題において良好な結果を期待できる。

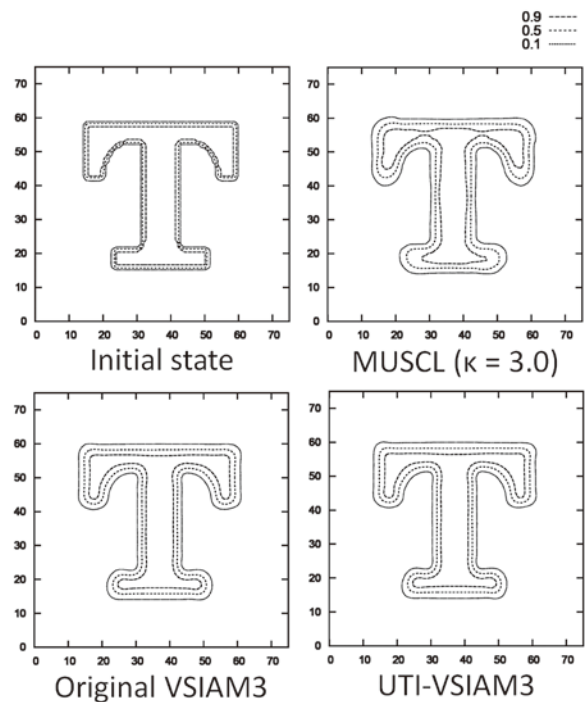


図3 移流方程式計算ベンチマーク

気液界面の追跡解法

3

気液二相流れにおいて、オイラー格子法では、各格子の流体体積占有率、すなわち流体率はもともと気液界面を認識するのに適した物理量である。VOF法では、気液界面の追跡のためにこの流体率を直接計算する。この方法では、他の粒子法ベースの界面追跡法と異なり、気泡や液滴の分裂・合体など界面形状トポロジーの変化に柔軟に対応でき、様々な気液二相流れに汎用的に利用可能である。またVOF法では流体率の保存性が保証されているのも実際の適用問題において大きな利点であり、気液界面追跡手法として最も広く用いられてきた。従来型のVOF法では、流体率を更新する際に用いるフラックス計算のために界面の形状を表す関数を再構築する必要がある。近年ではフラックスの計算精度を上げるため、PLIC型の界面再構築がよく用いられている^[9]。しかしながらPLICは一般にアルゴリズムが複雑であり、実装は容易ではない。

一方我々は気液界面追跡をより高精度かつ効率的に行うため、STAA法 (Surface Tracking by Artificial Anti-diffusion) を提案している^[7]。STAA法は保存型CIP法等と組み合わせられ、流体率の移流計算後に、数値拡散補正のための後処理を行う。保存型CIP法は高い移流計算精度を持つものの、流体率は気液界面近傍で急激に値が変動するため、他の高次精度解法と同様に数値拡散が生じ、このままでは気液界面の追跡には利用できない。そこで界面の不連続性を終始一定に保つため、移流計算の後に、人工的な反数値拡散フラックスを発生し流体率に補正を加える。その際に流体率からレベルセット関数を生成し、界面法線ベクトルを計算する。補正量はその法線ベクトルに沿って界面方向に強制的に移流される。これにより、界面形状の忠実性を損なうことなく界面のコンパクトさを回復することができる。このようにSTAA法は極めて効率的かつ実装が容易な手法である。図4にSTAA法での前述の移流方程式計算結果を示す。界面形状の忠実性において、PLIC法より優れた計算結果であることが明らかである。界面近傍の遷移部分の厚みがPLIC法よりも厚いが、しきい値の設定で制御可能であり、設定値よりも広がっていくことはない。STAA法は実際の問題への適用においても計算が破綻することはなく、極めて実用的な方法である。

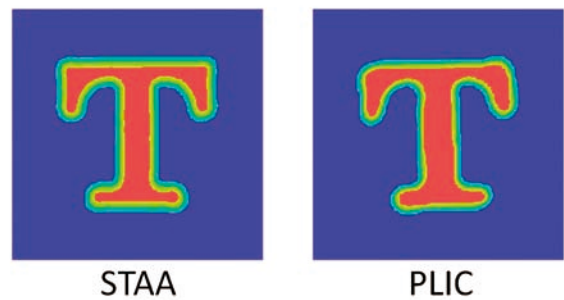
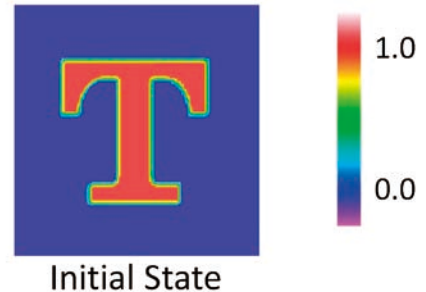


図4 気液界面移流方程式計算ベンチマーク

並列 GPGPU システムでの流体解析

4

Navier-Stokes流体計算は、フラクショナルステップ法により実行する。すなわち移流方程式を解いた後、非移流項である粘性項や重力項、表面張力項を計算し、最後に圧力ポアソン方程式を解いて次の時間ステップの流速に更新する。圧力ポアソン方程式を除き、いずれのステップの計算も陽的なベクトル計算で構成されているため、並列計算システムにおいてコードを実行することは容易である。今回、GPGPUアクセラレータで構成された分散メモリ型並列計算システムに適応させるため、MPIおよびOpenCLライブラリを用いてコードを実装した。またOpenCLを実行するデバイスは当面nVIDIA社のCUDAアーキテクチャを想定しているが、AMDやIntel等の他のデバイスや将来のシステムにも対応する上で、OpenCLライブラリを利用することは柔軟性において利点がある。ただし現在のCUDAアーキテクチャでは、原因は不明であるがOpenCLコードはCUDAコードに対し十〜数十%程度計算速度が遅いことが分かっており、コンパイル時にマクロによって、OpenCLライブラリをCUDA Driver APIに変換することでネイティブ動作を実現している。さらに複雑なOpenCL関数を簡易化し流体計算コードをコンパクトかつ見やすく保つため、独自の簡易なラッパー関数を定義し、通常はラッパー関数をコールすることで透過的にOpenCL関数を実行する方法を採用している。

図5に、圧力ポアソン方程式解法のCPU計算とGPU計算との比較を示している。計算の収束性を考慮し、全て倍精度演算を使用している。GPGPU化により、コア単体比較で約8倍、4コア比較で10倍弱の計算速度向上が得られた。

衛生陶器のシミュレーション結果の一例を図6に示す。複雑な境界形状に沿った流れが、浮遊物体の相互作用とともに適切に再現されている。浮遊物体は、気液界面の識別と同様に各格子の物体体積占有率で表している^[8]。レベルセット関数を生成して物体同士の面の距離を算出し、ばねモデルを利用して接触、反発の計算を行っている。これらの計算も全て並列GPGPU化しているため、高速に計算可能である。このような従来であればスパコンレベルの高性能計算システムが必要であった固気液三相流解析が、GPUボードを挿した1台の低価格PCで短時間で手軽に計算できるようになり、これらのPCを複数台利用することで、商品設計時に必要な多くのケーストライを短時間で実施可能となった。

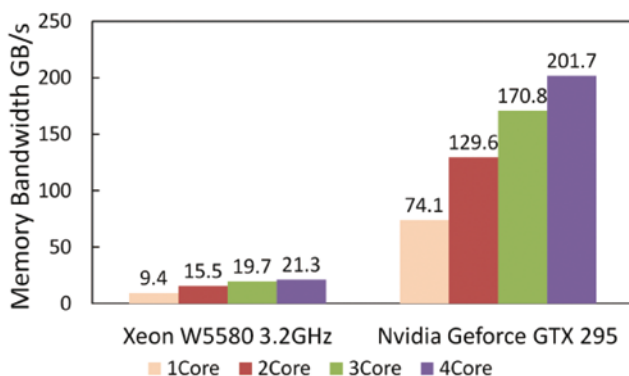


図5 PCG法による圧力方程式解法のCPUおよびGPU計算速度比較

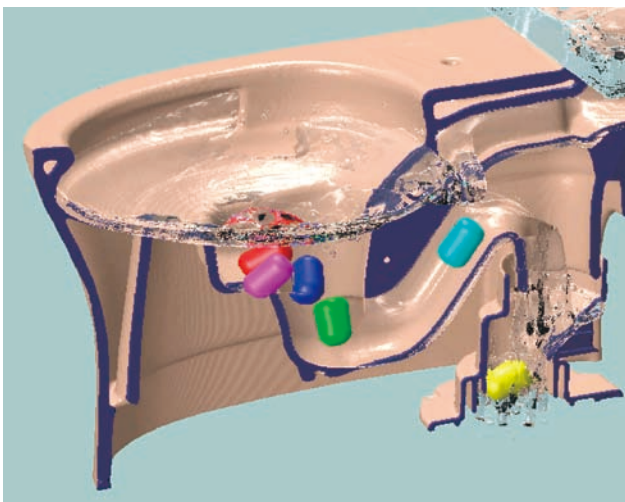


図6 衛生陶器シミュレーション結果

近年、住宅水まわり設備機器は、ほぼ例外なく節水のニーズが高まっている。このためそれら機器において少ない水をいかに有効に利用して機能を発揮するかが大きな課題となっている。それに伴い、薄膜流れや微小気泡など計算精度を特に要求する事例が増加している。例えば2ミリ程度の薄膜流れを再現するためには、膜厚方向に数～十数程度のメッシュ分割が必要であり、1mm未満の格子幅が必須となる。このような現象が機器の広い範囲で同時多発的に発生するような場合、全体で数千万メッシュ以上の計算規模となり、従来のPCベースシステムでは対応が困難である。そこで東京工業大学のGPGPUスパコンTSUBAME2.0を用い、大容量高精細メッシュでの混相流シミュレーション技術を開発している。

大規模並列GPGPU計算での問題として、GPGPU計算は通常のCPU計算よりも1プロセスあたりの計算速度が飛躍的に速いため、分割領域間の通信のオーバーヘッドが見かけ上大きくなってしまい、並列化効率が上がりにくくなることが挙げられる。一方実製品への適用では、単なる矩形領域ではない複雑な流路をもっており、流路に沿った要素分割では、理想的なスケーラビリティを達成することは難しい。しかし流路を無視して全体を矩形領域に要素分割する方法では、流路のみを要素分割する場合と比較して計算要素数が数倍から十数倍となる場合が多く、実用的とはいえない。

そこで、さまざまな制約の中で実用的な計算時間で実製品のシミュレーションを可能にするという観点より、図7に示す境界不整合な三次元領域分割の計算手法を提案する。本手法は流路格子をZ軸→Y軸→X軸方向に順に、各々の分割領域の要素数なるべく等しくなるように自動分割する。したがって領域間の隣接部は不整合になり、通信手順が極めて複雑となる。そこで図8のようにオーバーラップ通信と組み合わせ、領域間の通信を同期させずに、あらかじめ決めておいた通信マップにしたがって非同期送信、受信コマンドを一齐に発行する。そしてMPI_Waitallにより、全ての通信が完了するまで待つ。どの順番で実際の通信が行われ、完了するかは全てシステム側に任せる。

図9にTSUBAME2.0上での実製品シミュレーションにおけるポアソン方程式のベンチマーク結果を示す。約1.5億の計算要素数の実製品モデルにおいて、100GPUで80倍以上、150GPUで100倍以上の高速化を達成し、提案手法の妥当性を示すことができた。流体計算においては、大半の計算時間が圧力ポアソン方程式の求解に費やされるため、今回のベンチマーク結果から、高効率な大規模二相流体シミュレーションをTSUBAME2.0上で実現できたといえる。

図10に当社製品のシミュレーション結果を示す。いずれの画像もTSUBAME2.0上でPOV-Rayを利用して出力した。トイレブース全体の画像で示すようにタンク式の衛生陶器であり、計算条件と

マルチGPU計算による衛生陶器のための 気液二相流シミュレーション

してはタンクに規定水量を貯めて、固体モデル化したタンク内バルブを規定速度で開くことでタンクの水が落下し、陶器内に流れ込むようにした。計算結果では、タンクからの給水の過程で水路の空気を巻き込みながら無数の気泡を発生させ陶器内を上昇していくようすが捕捉できている。TSUBAME 2.0上の計算でメッシュを細分化したことで、ミリ単位の気泡、薄膜、飛沫の再現性が飛躍的に向上した。これにより衛生陶器の洗浄性能をより精度よく評価できるようになった。

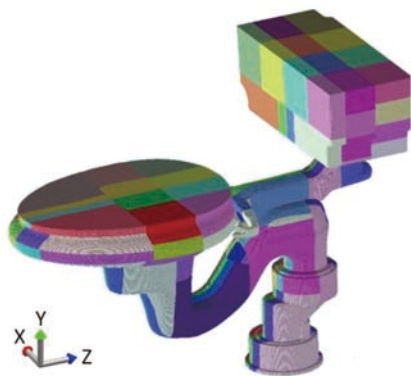


図7 三次元境界不整合領域分割（概念図）

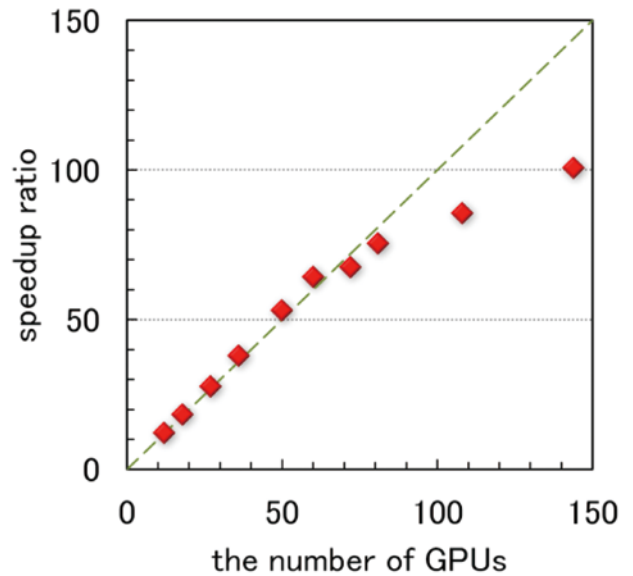


図9 PCG法による圧力方程式解法の複数GPU実行性能

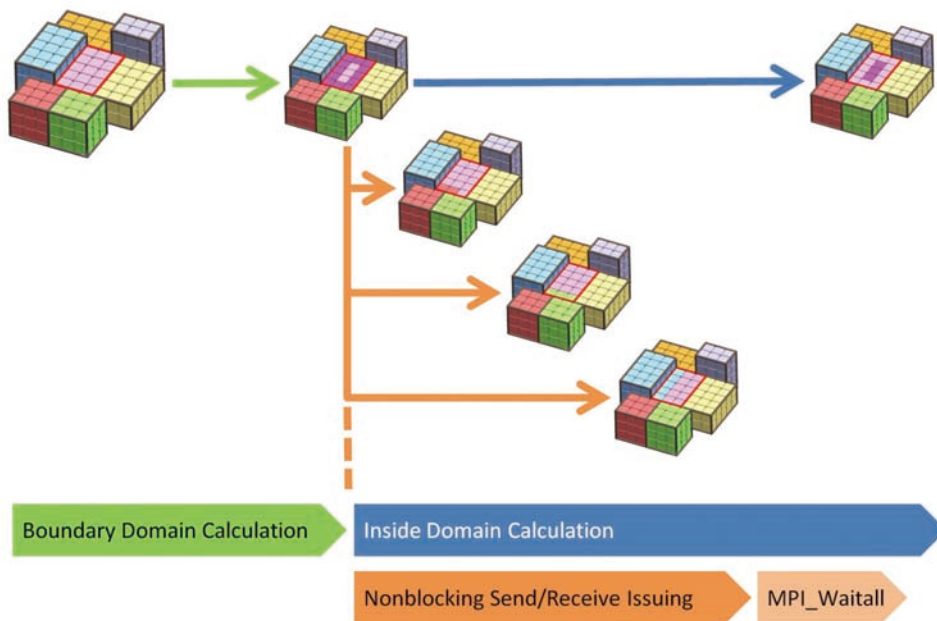


図8 オーバーラップ通信

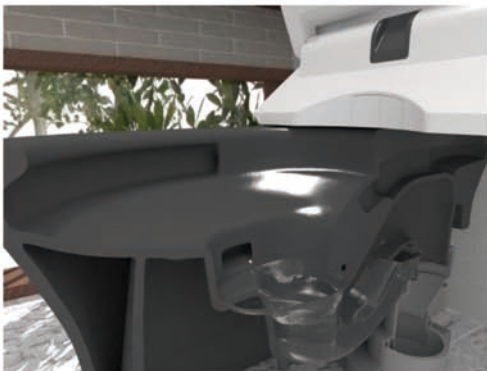


図10 TSUBAME2.0での衛生陶器シミュレーション能

おわりに

6

衛生陶器設計に必要な精度および計算速度の気液二相流体解析を実現するために、UTI-VSIAM3およびSTAA法に基づく計算手法を開発した。さらに境界不整合三次元領域分割により大規模並列GPGPU計算を高効率に実行できるようにした。その結果、実製品の適用においてTSUBAME2.0上で数ミリオーダーの気泡、飛沫、薄膜流れを捕捉できるようになった。今後はさらなる高速化のために、圧力方程式解法の収束性を向上させていくとともに、濡れ性を始めとする細部の流体計算モデルを精度向上させ、実製品の設計への適用を加速させていきたい。

参考文献

- [1] T. Yabe, T. Aoki: A Universal Solver for Hyperbolic-Equations by Cubic-Polynomial Interpolation 1. One-Dimensional Solver, *Comp. Phys. Comm.*, Vol. 66, pp.219 (1991)
- [2] T. Yabe, T. Ishikawa, P. Y. Wang, T. Aoki, Y. Kadota, F. Ikeda: A Universal Solver for Hyperbolic-Equations by Cubic-Polynomial Interpolation 2. 2-Dimensional and 3-Dimensional Solvers, *Comp. Phys. Comm.*, Vol. 66, pp.233 (1991)
- [3] T. Aoki: Multi-dimensional Advection of CIP (Cubic-Interpolated Propagation) Scheme, *CFD Journal*, Vol. 4, pp.279 (1995)
- [4] A. Ikebata, Y. Muraoka, F. Xiao: Multiphase Fluid Simulations on a Multiple GPGPU PC Using Unsplit Time Integration VSIAM3, *Progress in Nuclear Science and Technology*, Vol.2, pp.491 (2011)
- [5] T. Yabe, R. Tanaka, T. Nakamura, F. Xiao: Exactly Conservative Semi-Lagrangian Scheme (CIP-CSL) in One Dimension, *Mon. Wea. Rev.*, Vol. 129, pp.332 (2001)
- [6] F. Xiao, A. Ikebata, T. Hasegawa: Numerical Simulations of Free-interface Fluids by a Multi-integrated Moment Method, *Computers and Structures*, Vol. 83, pp.409 (2005)
- [7] A. Ikebata, F. Xiao: Development of Conservative Front Capturing Scheme and Applications to Multi-fluid Simulations, *Proc. Annual Conference of Japan Society of Mechanical Engineering*, 3, pp.301 (2002) (in Japanese).
- [8] F. Xiao: A Computational Model for Suspended Large Rigid Body in 3D Unsteady Viscous Flow, *J. Comp. Phys.*, Vol. 155, pp.348 (1999)
- [9] W.J. Rider, D.B. Kothe: Reconstructing Volume Tracking, *J. Comp. Phys.*, Vol. 141, pp.112 (1998)
- [10] B.V. Leer: Towards the Ultimate Conservative Difference Scheme Part V: A Second Order Sequel to Godunov's Method, *J. Comp. Phys.*, Vol. 32, pp.101 (1979)

Liグラファイト層間化合物における Li拡散に対するハイブリッド量子古典シミュレーション

大庭 伸子* 尾形 修司** 河野 貴久*** 旭 良司*

* (株) 豊田中央研究所 ** 名古屋工業大学 *** 東京大学・物性研

Li-グラファイト層間化合物におけるLi拡散過程を、ハイブリッド量子古典シミュレーション法により調べた。本シミュレーションでは、挿入Liとその周辺グラファイトの炭素原子を電子状態計算 (=量子) 領域とし、他の炭素原子は経験的原子間相互作用モデルを用いる古典領域とする。量子領域はLiの移動に伴って再選択する。一定温度でグラファイトの平均層間距離を様々に設定した一連のシミュレーションにより、ゼロ圧力あるいは少し伸張された場合には、層間が圧縮された場合に比べ拡散が速くなり、ホッピング的な拡散に加え弾道的に移動することもあることを確認した。さらに、グラファイト層間の中央付近にLiが位置する瞬間に、Liが速く動くことも分かった。そこで、電場を用いて層間におけるLi位置を制御することを検討した結果、適切な電場強度と周波数によってLiの面内熱拡散が促進される可能性を見出した。

はじめに

1

グラファイトに代表される層状物質はその層間にイオンなど他の物質を取り込み、層間化合物を形成する。特に、層間にリチウム(Li)が挿入されたLi-グラファイト層間化合物(Li-GIC)はリチウムイオン電池の負極にも実用化されている材料である。リチウムイオン電池における基本原理は、電解質相を介して正負極間でLiが移動することであり、電池性能の観点からは、グラファイト中Liの拡散速度は電池から取り出すことができる出力に直接対応する。Li-GICではLi挿入に伴い層間距離がおおよそ10%伸張することが確認されており、グラファイトの構造変化により生成する応力場は、Li拡散に影響を及ぼすと考えられる。このような系をシミュレーションで取り扱う際には、長距離まで作用する応力場を考慮することが重要となる。

そこで本研究では、ハイブリッド量子古典シミュレーション法を用いて、まず、グラファイトの平均層間距離とLi拡散の関係について調べた。ハイブリッド量子古典シミュレーション法では、電子状態の変化が重要となる領域には並列性能が良い実空間表現での密度汎関数法(DFT)などの量子力学計算法を適用し、その他には経験的相互作用モデルに基づく古典分子動力学(MD)法を適用する。これにより、着目する化学反応に対し、周囲の歪緩和を考慮した系の形状および大きさを取り入れた現実的な大規模原子系のシミュレーションがTSUBAME2.0のような多数コアのスパコンで可能となる。特に、Li-GICに本手法を適用する利点は以下の通りである。

- (i) ハイブリッド量子古典シミュレーションでは、リーズナブルな計算コストで、まわりの多数のC原子の影響を考慮したLi拡散過程を調べることができる。古典MDでは、LiとC原子の間の電荷移動(化学反応)を高精度で取り扱うことができないし、第一原理MDで大規模計算を行うには計算コストがかかり過ぎる。
- (ii) ハイブリッド法では、古典系の層間ポテンシャルとしてグラファイト層間に働く弱い分子間力(分散力)を容易に考慮することができる。通常のDFTでは分散力を再現することができない。

- (iii) 古典MDで必須となるLiとC原子間のポテンシャルモデルを作成する必要がない。(後で述べるが、)Li拡散の活性化エネルギーはかなり小さく、高精度のLi-C間ポテンシャルモデルを作成することは容易ではない。

さらに、層間におけるLi位置と拡散挙動についての詳細を解析し、外的擾動、たとえば、電場を用いて層間におけるLi位置を制御することによる拡散の促進・抑制可能性について検討した。

計算方法

2

2.1 境界部分のモデル化

ハイブリッド量子古典シミュレーションにおいて、量子力学計算が行われる領域と古典MD計算のみで取り扱われる領域の境界では、原子間の結合が切断され境界表面にあたる原子にダングリグボンドが形成される。本来、このダングリグボンドは存在しないはずのものであるので、領域内部の電子状態や結合距離等に対するその影響を取り除くことが必要となる。しかし、ダングリグボンドを単に連結原子で終端するだけでは、表面原子の緩和に伴う表面再構成の影響が全系の原子にも及び、本来保持すべき構造から大きなずれを生じる場合がある。そこで本研究では、量子領域と古典領域の境界部分のモデル化に関して、Ogata^[1]によって考案されたbuffered cluster法を用いた。Buffered cluster法では、領域の境界表面で切断された結合を終端するために付加的な原子(buffer atom)を置く。その位置は古典MD計算によってのみ決定され、量子力学計算を行う際に緩和されない。さまざまな対象系に対して表面再構成によるひずみが生じないことが実証されており、計算コストも低い、高精度で汎用的な結合モデルであるといえる。

2.2 量子力学計算

量子力学計算には、計算の大規模化に対応しやすく、さらに境界条件を柔軟に設定できることから、実空間密度汎関数法を用い

た。計算プログラムの詳細は文献[2、3、4]を参照されたい。電子と原子核との相互作用には、Troullier-Martins型ノルム保存擬ポテンシャル^[5]を用いて価電子のみを考慮した。交換相関エネルギー項には、部分内殻補正^[6]を取り入れ、一般化密度勾配近似 (Generalized Gradient Approximation:GGA) を適用し、Perdew, Burke 及びErnzerhofらによって導入された表式(PBE)^[7]を用いた。Kohn-Sham軌道とHartreeポテンシャルを、実空間直交座標系の格子点上の値で離散化^[8]し、二階微分は四次の有限差分法により近似した。

空間格子を計算ノードごとの小領域に分割した並列化を行い、計算の高速化のため格子点上のデータを計算ノード毎に保存した。波動関数の空間分布における長波長成分の収束性加速にはマルチグリッド法^[9]を使用している。空間分割のメッシュサイズとして、 $h=0.45$ a.u. (1a.u. $\sim 0.5292\text{\AA}$) を用いた。これは、波動関数の平面波展開におけるカットオフエネルギーに換算すると $(\pi/h)^2 \sim 49\text{Ry}$ ($1\text{Ry} = 13.6\text{ eV}$) に相当する。なお、原子核近傍では擬ポテンシャルの為にさらに細密なメッシュ ($h/3$) を用いた。

外部電場 E が印加された場合、密度汎関数理論におけるKohn-Sham方程式は以下となる。

$$\left[-\frac{\Delta}{2} + v_{\text{eff}} + E \cdot r\right] \psi_i = \varepsilon_i \psi_i \quad (1)$$

ただし、 ψ_i 、 ε_i はそれぞれ、固有軌道および固有エネルギーであり、 v_{eff} は外部電場が無い時の有効ポテンシャルである。外部電場項により i 番目の原子に働く力は $F_i = Z_i E$ (Z_i は価電子数) となる。

2.3 古典分子動力学計算

古典MD計算では、周期境界条件を課し、ニュートンの運動方程式の数値積分に速度ベルレの方法を用い、時間刻みを 0.97fs とした。また、C原子間ポテンシャルとしてブレンナ型ポテンシャル^[10]を適用した。本計算では、カーボン系材料の結合エネルギー等をできるだけ再現するように最適化されたブレンナ型ポテンシャルのパラメータ (文献 [10]:TABLE1を参照) を用いている。ただし、平衡距離については、量子力学計算による平衡原子間距離と等しくなるよう 1.33116\AA とした。ハイブリッドシミュレーションでは、量子-古典の境界において人工的な応力を発生させないために、そのような微調整が必要となる。

ブレンナ型ポテンシャルでは、原子間相互作用のカットオフ距離が 2.0\AA に設定されており、グラファイトに対しては面内の最近接原子間の相互作用のみが考慮され、面間 (層間) に働くファンデルワールス相互作用が取り込まれない。そこで、レナードジョーンズ型を基本として設定した原子間ポテンシャル V_{vdw} ^[11] を組み込み、層間相互作用を補正する。

2.4 計算モデル

Li挿入の初期過程を想定し、3072個のC原子から成るAB型構造のグラファイトにLiを1個挿入した (図1)。層間方向を z 、層間に垂直な面を x - y 面とし、温度 $T=0\text{K}$ におけるハイブリッド計算より、グラファイトの平衡距離として $L_x=34.44\text{\AA}$ 、 $L_y=29.83\text{\AA}$ 、 $L_z=26.97\text{\AA}$ を得た。グラファイトの面内方向の熱膨張は小さいので、有限温度においても面内方向 (L_x, L_y) の平衡距離は変化しないとする。層間 (z) 方向に関しては、古典MD計算から得られた層間方向の線膨張係数 6.7×10^{-5} を乗じ、 $T=423\text{K}$ における平衡距離として $L_z=27.74\text{\AA}$ とする。これを基準として、平均層間距離 L_z を $0.6, 2.9\%$ 伸張、 $3.9, 1.7\%$ 圧縮した場合のLi拡散過程を調べる。

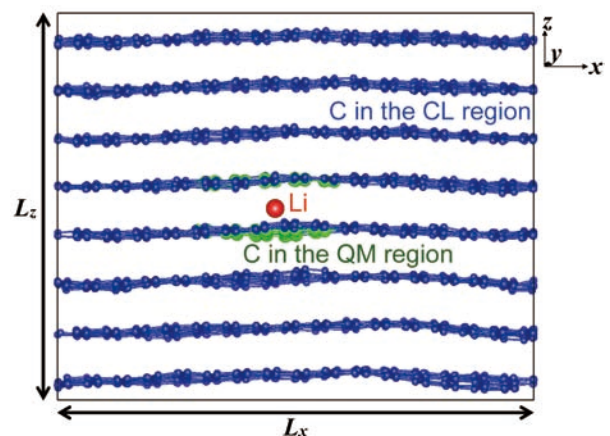


図1 y 方向から見た計算モデル図。大、中、小球はそれぞれLi、量子力学計算の対象とした量子領域 (QM region) のC、それ以外のC原子 (古典領域:CL region) を表す。

層間距離とLi拡散

3

3.1 グラファイトの構造変化とLi拡散

10ピコ秒 (ps) 間のLiの軌跡を図2に示す。開始(最終)のLi位置を白抜き矢印(大きい赤球)で表している。Liは、(x, y)座標が同じ値で位置するC原子を避けるような経路でホッピング的に拡散している。グラファイトの層間距離が長くなるとLiは広い範囲にわたってよく拡散する。さらに、ホッピング的な拡散に加えて、瞬間的に開いた上下のC原子間を弾道的に進む動き(図2黒矢印)がみられた。弾動的な動きが起こる際には、層間距離が 3.85\AA 以上広がっていることが必要である。一方、層間距離が短くなるとLiの動く範囲は限定的となっており、これはグラファイトによりLiが閉じ込められたcage効果によるものと考えられる。

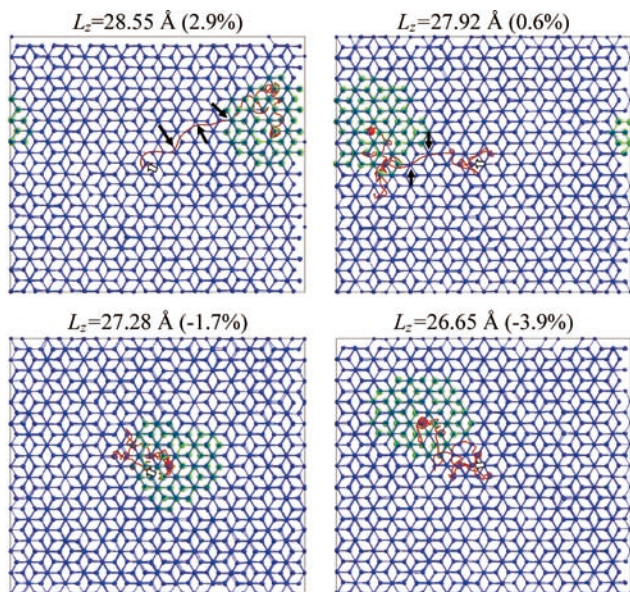


図2 z方向から見た10ピコ秒間のLiの軌跡。開始のLi位置を白抜き矢印、最終のLi位置を大きい赤球で表している。緑球はQM領域におけるC原子。黒矢印はx, y座標が同じである上下のC原子の間をLiが通り抜けた場所を示す。

Liの平均二乗変位を図3に示す。本シミュレーションでは系にLiイオンが1個しか存在していないため、より統計性の良いデータを得るため、一つの長いシミュレーションから 0.01ps 毎に時間の原点をとった時系列データを切り出して平均二乗変位を計算した。したがって、図3に示したデータは拡散係数を見積もることが可能なほどには十分な直線部が得られていないが、拡散の平均層間

距離 L_z 依存性について、以下の特徴を知ることができる。層間を0.6%、2.9%伸張した場合の平均二乗変位は、圧縮した場合よりも大きくLiの拡散が速い。ただし、2.9%伸張した場合には、長時間の拡散はやや遅くなる傾向がある。これは、Liが上下どちらかのグラファイト層にトラップされるためであり、その詳細を4章に述べる。圧縮の場合に長時間の拡散が低下しているのは、先に述べたcage効果によるものと考えられる。

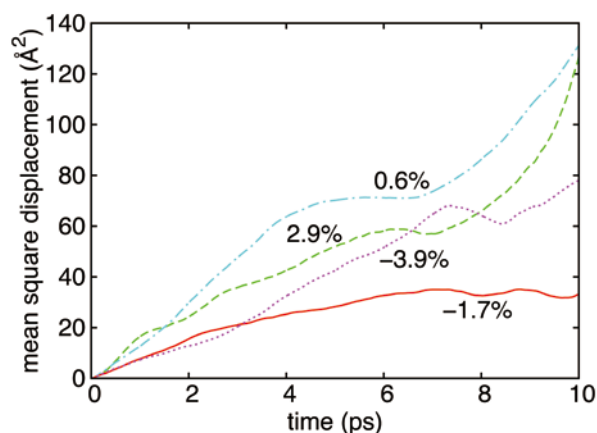


図3 平均層間距離 L_z を伸張(0.6%, 2.9%)および圧縮(-1.7%, -3.9%)した際の、Liの平均二乗変位の時間変化。

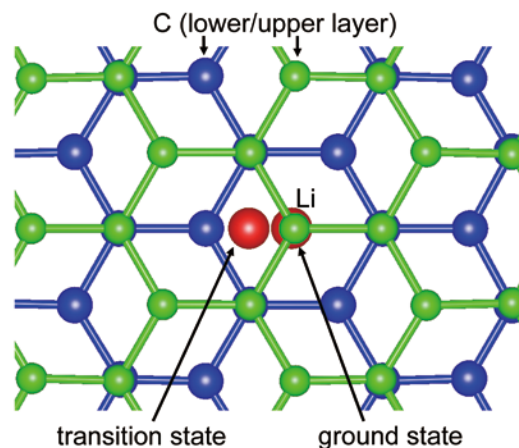


図4 グラファイト中Liの基底状態 (ground state) と遷移状態 (transition state) の位置。

3.2 活性化エネルギー

Li拡散の詳細を調べるため、 $T=0\text{K}$ におけるホッピング的な拡散の活性化エネルギーを計算した。図4は拡散の基底状態 (ground state) と遷移状態 (transition state) におけるLiイオンの位置を示している。活性化エネルギーは、遷移状態と基底状態のエネルギー差から見積もった。

図5に各平均層間距離 L_z における活性化エネルギーを示す。全エネルギーから見積もられた値は、量子 (QM) 領域と古典 (CL) 領域の両方の寄与を含んでいる。活性化エネルギーはいずれも 0.07eV 以下であり、とても小さい。従って、グラファイト中のLiイオンは熱エネルギーにより容易に拡散する。また、層間距離が短くなると活性化エネルギーは増加する。これは、圧縮の際に拡散が遅くなることと対応する。Li周りの局所的な効果を含んでいると考えられるQM領域のエネルギーから見積もられた活性化エネルギーの L_z に対する変化は小さい。一方、CL領域 (Liから離れた領域) の寄与は、特に層間距離が圧縮された場合に大きくなり、Liから離れたC原子の変位が活性化エネルギーに影響している。活性化エネルギーに関する計算精度確認のため、電子状態計算ソフトVASP^[12]を用いても計算を行った。AB型積層構造のグラファイトに対して $3 \times 3 \times 2$ のスーパーセルを用意し (72個のC原子)、Li原子を一つ挿入した。基底状態 (GS) と遷移状態 (TS) における計算結果を表1に示す。電子のエネルギーから見積もられた活性化エネルギーは 0.09eV と、ハイブリッド法で見積もられたものとオーダーが同じであり、両者の計算モデルの違いを考慮すると、良く一致しているといえる。また、MedeAのphononパッケージ^[13]を用いて、有限温度における自由エネルギーを計算し、 400K における振動エントロピーの寄与として $T\Delta S = -0.14\text{eV}$ を得た。したがって、ギブスの自由エネルギーから見積もられた活性化エネルギーは 0.04eV となり、とても小さいことには変わらない。

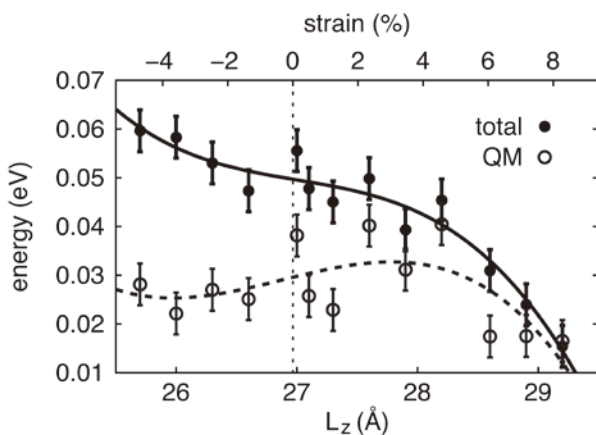


図5 温度 $T=0\text{K}$ における活性化エネルギーの平均層間距離 L_z 依存性。黒丸は全エネルギーから見積もられた値であり、白丸はQM領域のエネルギーのみから見積もられた値。エラーバーは実空間密度汎関数法における収束誤差を示している。

	E_{ele} (eV)	pV (eV)	$E_{\text{vib}}^{400\text{K}}$ (eV)	$S_{\text{vib}}^{400\text{K}}$ (eV/K)	$G^{400\text{K}}$ (eV)
GS	-7.94	2.79	13.88	0.0063	6.22
TS	-7.85	2.74	13.75	0.0059	6.26
Δ (TS-GS)	0.09	-0.06	-0.13	-0.00036	0.04

表1 VASPコードを用いた基底状態と遷移状態のエネルギーの計算結果。 $E_{\text{ele}}, E_{\text{vib}}^{400\text{K}}, S_{\text{vib}}^{400\text{K}}, G^{400\text{K}} = E_{\text{ele}} + E_{\text{vib}}^{400\text{K}} + pV - TS^{400\text{K}}$ は、それぞれ $T=0\text{K}$ における電子状態のエネルギー、 $T=400\text{K}$ におけるゼロ点振動を含む振動のエネルギー、振動のエントロピー、ギブスの自由エネルギーである。電子状態のエネルギーは原子の標準状態を基準として算出された。

外部電場によるLi拡散の促進

4

4.1 電場 $E=0$ の場合のLi位置と拡散

はじめに、外部電場 $E=0$ の場合における、層間でのLi位置と拡散挙動について考察する。Liが良く拡散する状態で解析を行うため、層間距離が基準から2.9%伸張した場合 ($L_z = 28.55\text{\AA}$) を解析する。図6に、Liイオンと上下グラファイト層の間の距離 d_u, d_l の時間発展を示す。より詳細には d_u (d_l) は、上 (下) グラファイト層の量子力学計算の対象としたC原子群の重心とLiとの距離である。Liの $t=0$ における位置を基準とした x, y, z 方向の変位の時間変化も図6の下パネルに示す。時間 $t=0$ から1psでは、 d_l は d_u より短くなっており、Liが下グラファイト層にトラップされている状態であることを意味する。さらに、同じ時間帯のLi変位から、Liはほとんど動いていないことも分かる。一方、 d_l と d_u がほとんど同じ値となっている時間 $t=1$ から1.2psの領域では、Liの面内 (x, y 方向) の変位が大きくLiが良く拡散している。このような d_l, d_u とLiの面内変位との関係は、 $t=1.6$ と4.2ps付近でも見られる。したがって、上下グラファイト層の真ん中あたりにLiが位置しているときには、拡散の抵抗力が弱くなり、Liがよく拡散するといえる。

Liグラファイト層間化合物における Li拡散に対するハイブリッド量子古典シミュレーション

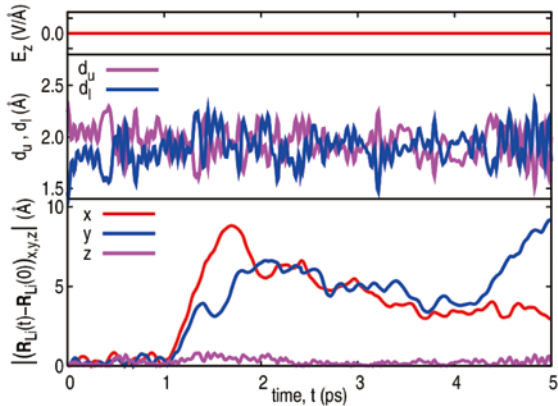


図6 電場 $E=0$ の時の、外部電場強度 E_z (上パネル)、Liイオンと上下グラファイト層間の距離 d_u, d_l (中パネル)、Li変位の絶対値 $|(R_{Li(t)} - R_{Li(0)})_{x,y,z}|$ (下パネル)の時間変化。

4.2 電場印加時における拡散

前節の結果より、たとえば、外部電場を層間に印加することにより、グラファイト層の間でLiの位置（存在確率）を制御することで、Li拡散が促進・抑制できることが予想される。そこで、強度が $0.14, 0.43 \text{ V/Å}$ 、周波数 $f=0.4, 0.8, 1.7 \text{ THz}$ の電場をグラファイトの層間方向に印加しハイブリッド量子古典シミュレーションを行った。CL領域の炭素原子はイオン化されておらず外部電場に対する応答はほとんど無いと考えられるので、QM領域の原子群に対して、電場を印加した。

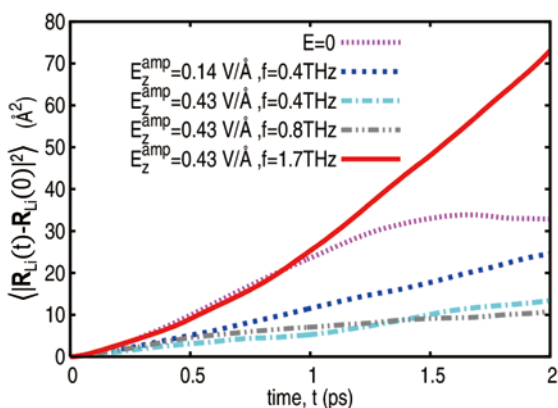
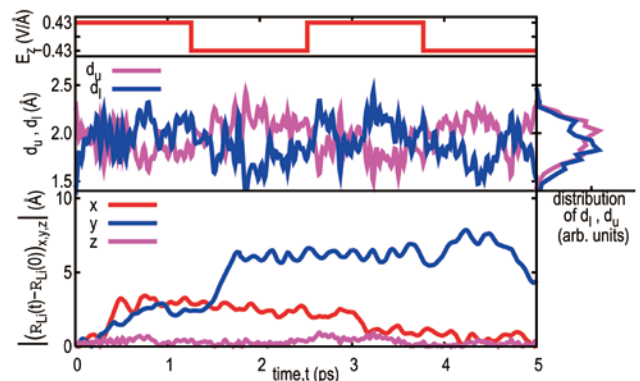


図7 さまざまな強度 E_z^{amp} および周波数 f の外部電場を印加した際の、Liの平均二乗変位の時間変化。

温度 $T=423 \text{ K}$ におけるLiの平均二乗変位を図7に示す。電場の周波数を 0.4 THz に固定したとき、電場強度が大きくなるにつれLiの平均二乗変位が小さくなっている。これは層間方向に働く電場からLiが感じる力のために、Liは層間の上下の安定サイトのどちらかに誘導されていることが原因であり、拡散の活性化エネルギー

と関係があると考えられる。本計算で設定した層間距離は $L_z=28.55 \text{ Å}$ であるので、拡散の活性化エネルギーは図5より 0.04 eV 程度と見積もられる。また、遷移状態と基底状態の間の層間 (z) 方向の距離はおおよそ 0.2 Å である。したがって、熱エネルギーによる助け無しでこの活性化障壁を越えるのに必要な電場の閾値は、 $0.04/0.2 = 0.2 \text{ V/Å}$ と見積もられる。この閾値を超える電場強度になると、Liはグラファイト層どちらかにトラップされる傾向が強くなり、拡散が遅くなる。閾値以下では、それほどの影響は無い。

(a) 電場 $E=0.4 \text{ V/Å}$ 、周波数 $f=0.4 \text{ THz}$



(b) 電場 $E=0.4 \text{ V/Å}$ 、周波数 $f=1.7 \text{ THz}$

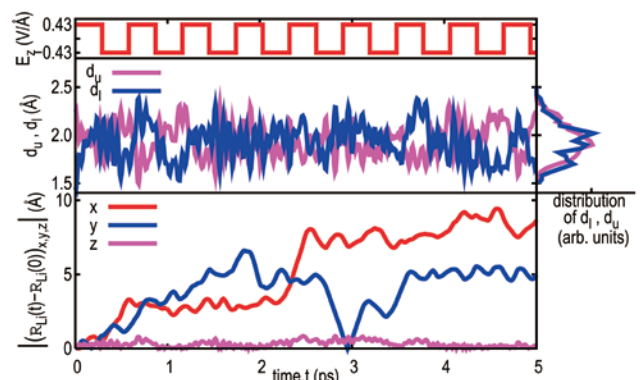


図8 電場 $E=0.4 \text{ V/Å}$ 印加時の、外部電場強度 E_z (上パネル)、Liイオンと上下グラファイト層間の距離 d_u, d_l (中パネル)、Li変位の絶対値 $|(R_{Li(t)} - R_{Li(0)})_{x,y,z}|$ (下パネル)の時間変化。中パネル横のグラフは、5ピコ秒間の統計をとった d_u, d_l の存在確率分布を示す。

電場強度を 0.43 V/Å に固定し周波数を変化させた場合には、周波数が 0.4 THz と 0.8 THz では平均二乗変位にあまり違いが無いが、 1.7 THz としたときにはLi拡散が速くなった。周波数 0.4 および 1.7 THz の時の電場、Liと上下層間距離 d_u, d_l 、変位の絶対値 $|(R_{Li(t)} - R_{Li(0)})_{x,y,z}|$ の時間変化を図8に示す。図8(a)より周波数が 0.4 THz

では、上(下)向き電場が印加されるとLiは上(下)層との距離が短くなり、上(下)層にトラップされる傾向がある。故に、先に述べた様に、そのような比較的低い周波数ではLiは上下の安定サイトのどちらかに留まることになり、ほとんど拡散しなくなる。一方図8(b)より、周波数が1.7THzでは、外部電場により生じる層間方向の力を交互に受け層間におけるLiの位置は無秩序に変化している。言い換えると、電場の方向転換があまりに速いためLiはその動きについていくことができず、もう一方の安定サイトに到達する前に電場から働く力によりその方向を変えてしまっているようである。その結果、上下層の中央付近にLiが存在する確率が高くなり、Li拡散が促進される。実際、図8(b)の中パネル横に示したとおり、5ピコ秒間の統計をとった d_u 、 d_l の存在確率分布はどちらも層間の中央付近にピークを持っている。

強度が $0.43\text{V}/\text{\AA}$ である電場を静的に印加したときの電子密度分布を図9に示す。電場強度が大きい場合には、電子雲が原子核位置から大きくずれることがあり得る。本研究で検討した電場強度 $0.43\text{V}/\text{\AA}$ はかなり強い電場ではあるが、電子分布は量子領域の炭素原子の周りに留まっている。

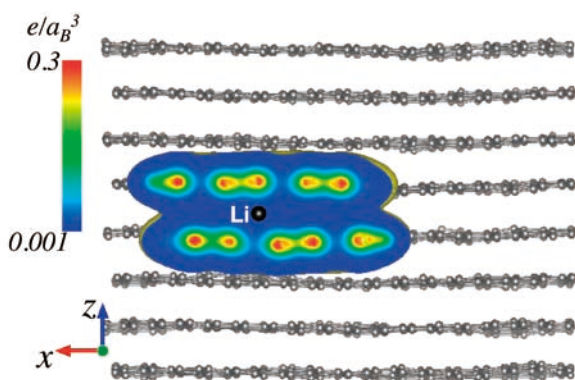


図9 電場強度 $0.43\text{V}/\text{\AA}$ を印加した際の(010)面の価電子密度分布。黒、灰色球はそれぞれLi,C原子を表す。赤くなるほど電子密度が高い。

テラヘルツ領域は波数に換算すると $3\text{THz} \approx 100\text{cm}^{-1}$ であるのでちょうど格子振動数程度に相当する。しかし、Li-GICでは、1~2THz領域の格子振動数ピークが観測されているとの報告例は無い。一方、グラファイトの二つの層が平行に動く振動モード $E_{2g(1)}$ として 42cm^{-1} が観測されている^[14]。これは周波数に換算すると、 1.26THz に相当する。もし、外部電場の周波数をこの振動モードに同調するようにすると、一方の層に張り付いているLiを剥がして上下層間の真ん中辺りのLiの存在確率を大きくし、Li拡散を増長する可能性が考えられる。しかし、今回のシミュレーションではそのような振動モードとの共鳴は観測されなかった。テラヘルツ波は光と電波の境界領域の周波数帯であり、長年未開拓電磁波とさ

れ、その発生と検出が難しく課題も多い。しかし、高出力テラヘルツ光源であるジャイロトロン^[15]の開発なども進んでおり、本シミュレーションで設定した電場効果を検証する実験も将来的には可能となると考えられる。

おわりに

5

ハイブリッド量子古典シミュレーション法により、Li-GICのグラファイトの層間距離とLi拡散との関係を調べた。層間が圧縮されると拡散は遅くなり、伸張されると速くなる。層間が伸張された場合、ホッピング的な拡散に加えて、炭素原子の間を弾道的に拡散する様子が見られた。圧縮された場合はホッピングによる拡散のみが見られ、cage効果により長時間限られた範囲にとどまる。このような層間距離とLi拡散の関係が、ステージ混在状態における拡散係数の低下の一因となっていると考えられる。

グラファイトの層間方向に電場を印加し、Liの熱拡散が促進される条件として、電場強度 $0.43\text{V}/\text{\AA}$ 、周波数 1.7THz を見出した。これは、上下層間の真ん中あたりに位置するLiの存在確率が高くなるためであると考えられる。

本研究では、量子力学計算として並列化に適した実空間密度汎関数法による電子状態計算コード(RGDFT)を適用しているが、系に含まれる原子数 N に対して計算量が N^3 で増大する為に、計算コストの観点から多くの原子を取り扱うことが難しい。そこで、量子領域を分割領域の重ね合わせで表現することによりオーダー N 化を可能にしたDivide-and-Conquer(DC)型-RGDFTコードの開発を別途進めている^[16]。開発したDC-RGDFTコードの計算時間に関するTSUBAME2.0上でのベンチマークテストの結果を図10に示す。計算は原子数 $N=48,384,1296,3072,6000$ のAlクラスタをそれぞれ、 $1,8,27,64,125$ 個の領域に分割して行い、電子状態計算の繰り返し回数(SCF)を25回とした。計算機1コアあたりに分配される原子数が4原子程度となるよう計算コア数を設定したところ、従来の計算手法では全計算時間は原子数 N に対して N^3 で増大するが、DC-RGDFTでは原子数 N に比例することを確認した。今後は、古典MD計算プログラムとのハイブリッド化を行い、グラファイト中に複数Liが存在する場合に適用し、Li拡散におけるLi-Li相互作用の影響などを調べる。

Liグラファイト層間化合物における Li拡散に対するハイブリッド量子古典シミュレーション

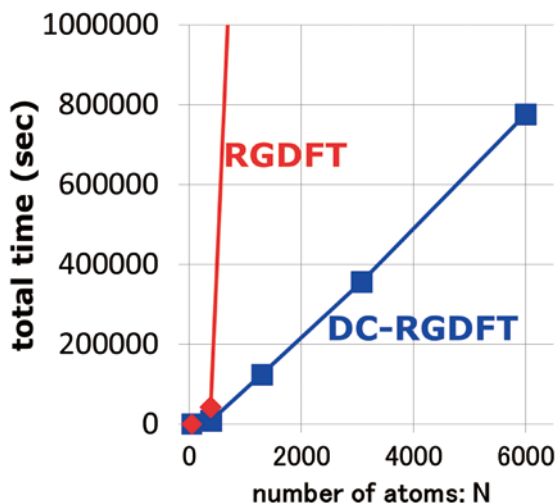


図10 全計算時間と原子数Nの関係。

謝 辞

本計算の一部は、文部科学省の先端研究施設共用促進事業の補助をいただき、東京工業大学のスパコンTSUBAME2.0を用いて行った。また、科学研究費補助金・基盤研究 (B) 課題番号 233100074 「電場中でのナノ液固界面の化学反応に関するハイブリッド量子古典計算法の開発」から支援を頂いた。記して謝意を表す。

参考文献

- [1] S. Ogata, Phys. Rev. B 72, 045348 (2005).
- [2] S. Ogata, E. Lidorikis, F. Shimojo, A. Nakano, P. Vashishta, and R. K. Kalia, Comput. Phys. Commun. 138, 143 (2001).
- [3] S. Ogata, F. Shimojo, R. K. Kalia, A. Nakano, and P. Vashishta, Comput. Phys. Commun. 149, 30 (2002).
- [4] F. Shimojo, T. J. Campbell, R. K. Kalia, A. Nakano, S. Ogata, P. Vashishta, and K. Tsuruta, Future Gen. Comp. Sys. 17, 279 (2000).
- [5] N. Troullier and J. L. Martins, Phys. Rev. B 43, 1993 (1991).
- [6] S. G. Louie, S. Froyen, and M. L. Cohen, Phys. Rev. B 26, 1738 (1982).
- [7] J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett. 77, 3865 (1996).
- [8] J. R. Chelikowsky, N. Troullier, and Y. Saad, Phys. Rev. Lett. 72, 1240 (1994).
- [9] A. Brandt, Math. Comput. 31, 333 (1977).
- [10] D.W. Brenner, Phys. Rev. B 42, 9458 (1990); 46, 1948(E) (1992).
- [11] N. Ohba, S. Ogata, T. Tamura, S. Yamakawa and R. Asahi, CMES-Comp. Model. Eng. 75, 247 (2011).
- [12] G. Kresse and J. Furthmüller, Phys. Rev. B 54, 11169 (1996).
- [13] K. Parlinski, Medea-phonon, materials design, inc., 2003,

based on K. Parlinski, phonon 3.11, 2002.

- [14] R. Kostic, M. Miric, T. Radic, M. Radovic, R. Gajic, and Z. V. Popovic: Acta Phys. Pol. A 116, 718 (2009).
- [15] T. Saito, T. Notake, Y. Tatematsu, A. Fujii, S. Ogasawara, L. Agusu, T. Idehara, S. Kubo, T. Shimozuma, K. Tanaka, M. Nishiura, K. Kawahata, and V. N. Manuilov: J. Phys. Conf. Ser. 227, 012013 (2010).
- [16] N. Ohba, S. Ogata, T. Kouno, T. Tamura and R. Kobayashi, Comput. Phys. Commun. 183, 1664 (2012).

建築分野の数値流体解析における大規模計算

ファムバンフック* 野津剛* 菊池浩利* 日比一喜**

*清水建設株式会社 技術研究所・総合解析技術センター **株式会社 数値フローデザイン

実応用問題や計算手法に応じて計算機の性能を予測することは重要である。

本稿では、建築分野の流体問題を対象に、計算ノード本体の性能および計算機のネットワークと計算規模による性能特性を調べ、大規模モデルの大規模並列計算によりその性能向上が可能であることを確認した。また、高解像度の利用による計算精度の向上化や解析モデルの精緻化、及び3次元広域津波解析などのような新たな解析手法の実用化も確立されつつ、建築分野での大規模計算の重要性を明らかにした。

はじめに

1

10年間でスパコンの計算性能を1000倍に向上させること^[1]が、複数計算ノードと高速なネットワークおよびGPUなどの最新デバイスの活用により着々と実現されている。一方で、産業などのものづくりの現場において計算機の日常利用としてどのように変化しているのか、またはどのように変化していくべきか、あまり議論されていないのが現状である。

建築分野では、周辺環境の配慮や安全・安心かつ快適な建築環境の提供が重要な課題の一つである。この課題を解決するためには、たとえば風荷重、風環境、温熱環境、光環境、さらには津波荷重などの様々な評価が必要となってくる。経験的な評価または実験による評価は限界となりつつあり、数値シミュレーションによる評価は有効な手法の一つとして見られている。また、近年の建築分野ではBIM(Building Information Modeling)などの大規模3次元データの活用や多様なニーズの対応により、数値シミュレーションでは解析モデル自体が複雑となり、計算量も膨大になる。計算機の実行性能の把握及びその能力を最大化することは必要かつ緊急な課題となってくる。

本稿では、TSUBAMEスパコンの活用を通じて、ユーザーという立場で建築分野の流体問題における計算機の実行能力の見極めを試みるために、各種の建築環境解析を実施するとともに、建築分野での大規模計算の重要性を示す。

数値流体問題における計算性能の動向

2

数値流体問題における計算機の性能特性を把握することは実応用促進において重要である。本章では、計算ノード本体の性能および計算機のネットワークと計算規模による性能を調べ、その計算性能の動向を明らかにする。なお、本検討では数値流体解析オープンソースOpenFOAM^[2]を用いた。

2.1 単体計算ノード内の性能特性^[3]

図1には非構造格子の1千万メッシュ規模の風環境問題を対象にして、年代CPUによる計算向上を示す。図中縦軸は2006年時点のCPUコアまたは計算ノードの計算速度を1とした加速率を示す。利用したCPUは2006年のTSUBAME1.0で採用したCPU AMD Opteronと2010年のTSUBAME2.0で採用したIntel CPU Westmere-EP、及び市販計算機の2008年のIntel CPU Xeonと2012年のIntel CPU SandyBridgeである。2008年以降では、CPUのクロック周波数が上がっていないが、浮動小数演算能力やキャッシュ効率性能などの向上によりCPUコアにおける加速率が少しずつ伸びている。ただし、その加速率が減速しているため、今後の単体CPUコアを用いたシリアル問題ではその計算性能を向上しにくいとみられる。一方、ノード内で複数CPUコアを用いた並列処理ではコア数の増加に伴い、その加速率は2年間で1.5倍～2倍で順調に伸びているため、ノード内の並列処理は今後もますます重要である。ただし、10年間で32倍以上を性能向上させることは現状で難しいと分かる。

また、図2には、数値流体計算で最も計算時間を要する部分であるPoisson方程式のそれぞれの計算手法に対してGPUによる加速率を示す^[4]。6倍以上を得る手法もあるが、GPU等の新デバイスの活用と、それに適切する新たな計算手法の開発とチューニングは計算性能の向上において今後も重要な要素となってくる。

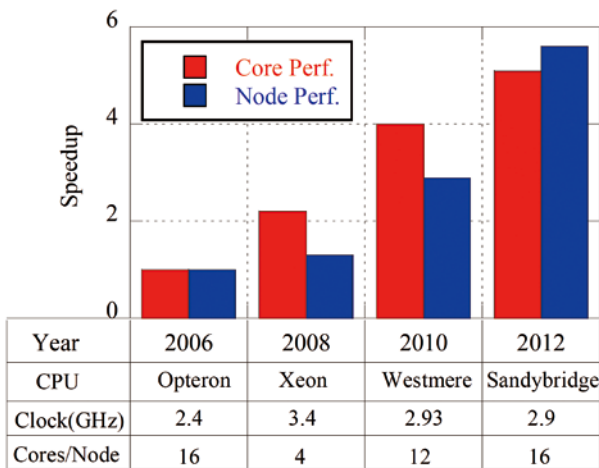


図1 年代CPUによる計算性能向上

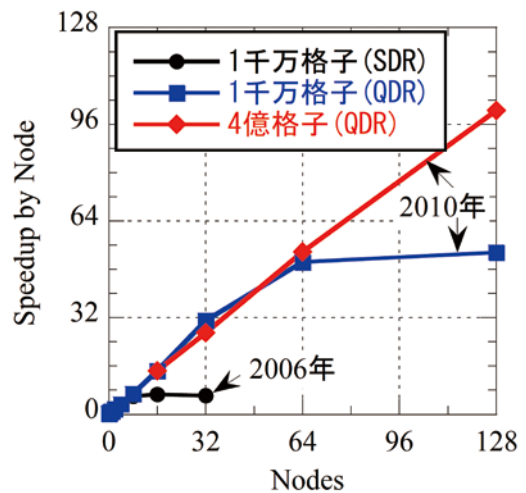


図3 計算規模による加速率の変化

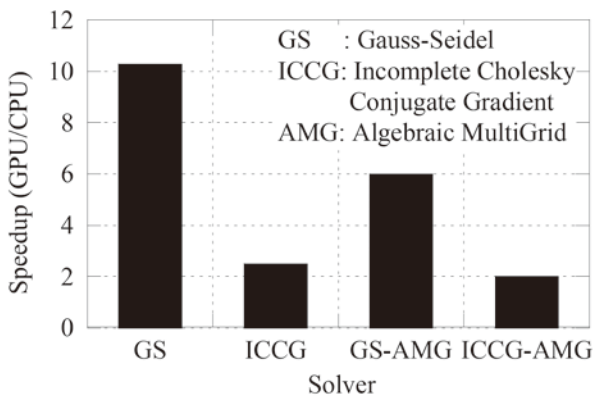


図2 GPUによる計算性能の向上

2.2 大規模並列計算の性能特性^[3]

近年の計算機ではネットワークの性能が良くなっており、複数計算ノードを用いた大規模並列処理による計算性能の向上が期待されている。図3には1千万格子規模及び4億格子規模の風環境問題を対象にして、2006年のTSUBAME1.0で採用していたInfinibandSDR(2本SDR、バンド幅:20GBps)と2010年のTSUBAME2.0で採用していたInfinibandQDR(2本QDR、バンド幅:80GBps)における単ノードに対する加速率を示す。同じ1千万格子規模においても2006年から2010年までの4年間でその加速率は6倍以上に伸びており、4億格子の大規模モデルではその性能はさらに向上する。前節のノード内の年間加速率の結果と合わせて、大規模並列処理及び大規模計算モデルの利用により10年間で数値流体解析の計算性能を1000倍に向上できると分かる。

大規模数値流体計算の可能性

3

前章では、計算機ハードウェアに着目し、数値流体解析の計算性能を議論しており、その能力を最大化するためには大規模モデルでの大規模並列計算が重要であることを示した。本章では、数値流体計算の応用面に着目して、大規模計算による可能性を示すことが目的である。

数値流体解析を大規模に計算することは、計算格子の高解像度による高精度化、解析モデルの精緻化及び解析領域の広域化などを行い、より実物と近い形状や実現象と近いスケールを再現することである。ここでは、風洞気流を高精度に再現するための高解像度の計算格子利用、複雑な3次元建物形状を再現するために小さいメッシュ幅の利用によるモデルの作成と、従来では困難であったVOF法による広域3次元津波解析について紹介する。

3.1 風洞実験の再現^[5]

図4はLESによる大型境界層風洞の助走路及び測定部分を忠実に再現した一例である。計算では100万格子(A)と1000万格子(B)及び1億格子(C)モデルを用いた。図5は風洞内で発達してきた境界層気流の風速変動のパワースペクトル密度の計算値と実験結果との比較である。図内では格子幅と格子規模が記載されている。計算結果は実験結果と比べると無次元周波数 $nL_x/U_H=1$ 以上の領域において格子Aのパワースペクトル密度は急激に減少しているが、より高解像度の格子Bまたは格子Cの利用によりその高周波数成分が実験に漸近している。ちなみに、実験結果を完全に再現するためには結果の外挿により約1千億計算格子が必要となる。

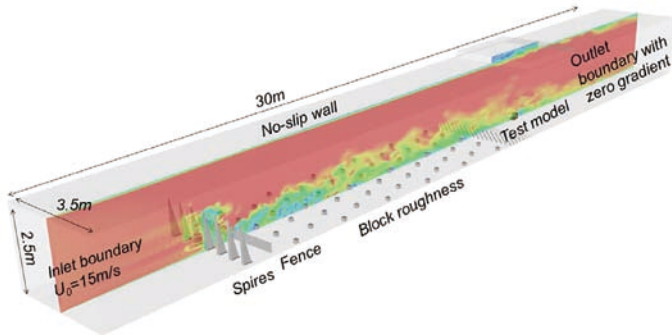


図4 風洞実験を再現した計算モデル

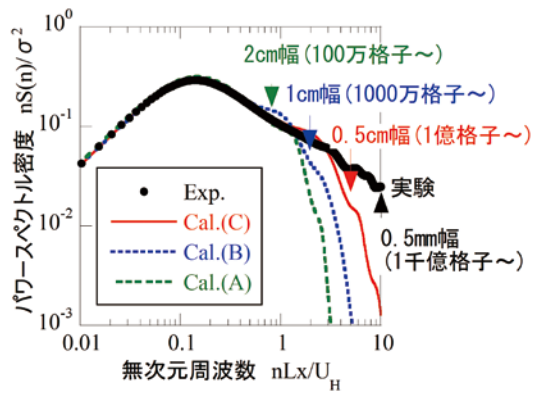
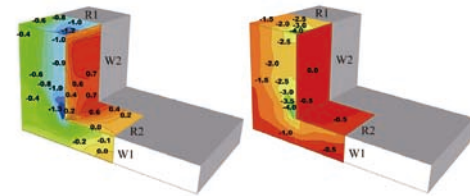


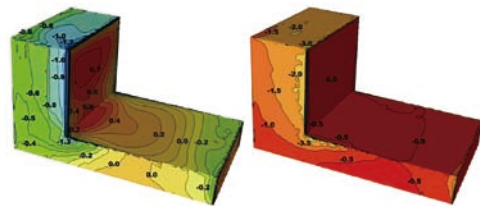
図5 風速のパワースペクトル密度

図6は実験および解析から得られた建物の耐風設計に必要な平均外圧係数および負側のピーク値の比較一例である。3千万格子規模および高解像度の1.2億格子規模のいずれの計算結果も実験結果と類似した結果となっているが、入隅部付近の側面での局部風圧の再現については高解像度の格子を用いる必要がある。

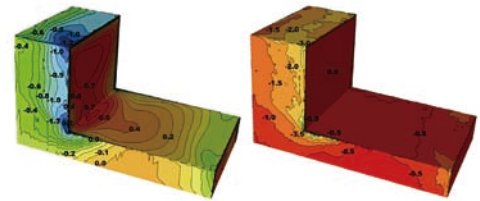
また、図7には建物近傍の平均流線を示す。3千万格子では、地上付近の流れは低層屋根面の前縁角で剥離して、高層部からの吹き降しにより低層屋根の入隅部近傍で馬蹄形渦が生じており、その渦が巻き込みながら側面に流れていく。一方、1.2億格子では、入隅部近傍で生じた馬蹄形渦は側面に移流し、高層屋根面に巻き込まれる様子が見られており、建物近傍では新たな円錐渦の3次元的な流れ場を確認できた。数値流体解析の大規模化は計算精度の向上や新たな流れ場のメカニズムの解明にも重要な役割を持っている。



(a) 実験結果

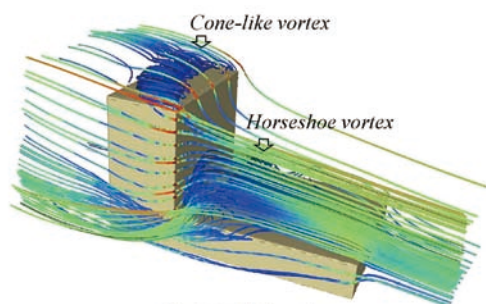


(b) 3千万格子モデルの計算結果

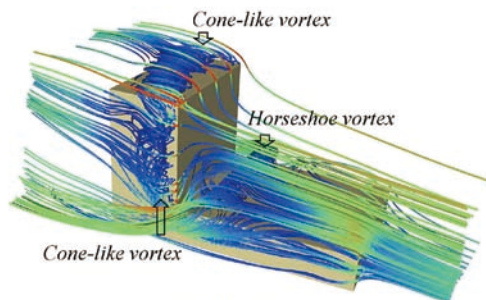


(c) 1.2億格子モデルの計算結果

図6 建物に作用する外圧の平均値(左)と負側ピーク値(右)



(a) 3千万格子モデル



(b) 1.2億格子モデル

図7 建物近傍の平均流線流れ場

3.2 複雑な3次元建物形状の再現^[3]

最近の建築分野では高度な3次元データの利用により、ニーズに応じて建物の形状も次第に複雑となっている。数百万格子規模の解析モデルを得るためには数mから数十cm程度の格子幅を利用する必要がある。従来の計算格子の作成方法では、3次元形状データをそのまま利用できないため、数値流体解析用にデータのクリーニングや形状の単純化などを行う必要がある。形状の詳細に伴いその作業も困難となる。

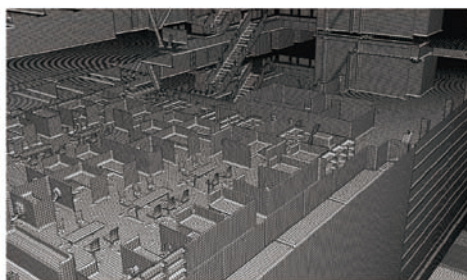
対象としたものより小さなメッシュサイズを利用することにより簡単にその形状を再現できる。図8に示す複雑な3次元データ形状は数cm程度のメッシュ幅の採用により室内屋外を含む計算モデルを簡単に作成できた(図9)。得られる解析モデルは約2億格子の大規模モデルになっているが、建物の手摺りや室内の設備なども精緻に再現されることも分かる。



図8 三次元CAD データ



(a) 屋外の再現状況



(b) 屋内の再現状況

図9 計算格子作成例

3.3 VOF法による広域3次元津波解析^[6]

従来の津波解析では平面2次元浅水長波モデルを用いて、津波の遡上様子や広域の津波の浸水範囲を予測している。しかし、建物レベルにおける周辺の影響と建物本体の津波波力などの詳細な予測は困難である。本章では前章の結果を踏まえて、数値計算では、VOF法^[7]による気液二相流シミュレーションを用い、複雑地形を考慮できる広域3次元津波解析を実施し、その実用性を確認した。対象は沿岸の街区全体とした6km×6kmの計算領域である。全体の計算格子数は約5千万であり、実現現象での時間7分間で、計算時間は198CPUで約8日間であった。

図-10には、津波が汀線付近に到達し、街区への遡上を開始する直前の図を示す。右上部分の山が海岸線に迫り急峻な地形になっている部分では既に津波の遡上を開始しており、局所的な波の集中や複雑な反射波の発生が確認できる。図-11と12には、その後の街区での津波の遡上の様子を示すが、大きな建物のある部分では津波遡上が阻止され、路地や空地等に沿って進行する様子が見られる。

以上のように、3次元VOF法による津波遡上シミュレーションでは、地形や街区形状を詳細に考慮することで、陸域における複雑な津波の挙動を再現することが可能となる。

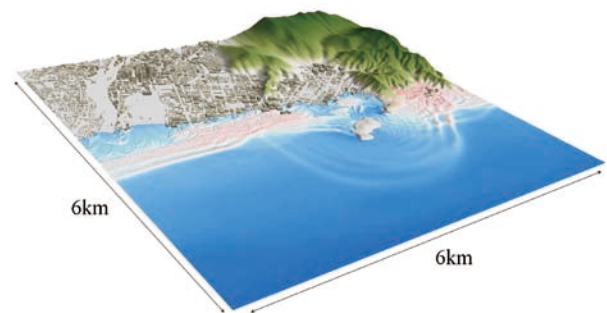


図10 計算領域



図11 市街地の津波遡上様子

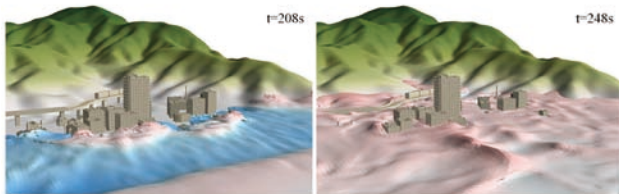


図12 時刻の変化による建物近傍の津波挙動

おわりに

4

建築分野の実応用流体問題を対象とした場合、計算機の計算性能を最大化するためには大規模並列処理による大規模計算の実施が必要となる。また、大規模計算を行うことで、計算格子の高解像度化による計算精度の向上や計算モデルの精緻化の重要性を確認し、さらにはこれまで困難であったVOF法による広域3次元津波解析も実施できた。計算機の発展とともに新たな計算手法が確立されつつあり、建築分野においてもその手法に応じた新たな評価方法の確立が今後も急務な課題となっている。

謝辞

本研究は平成20年度と21年度に東京工業大学の共同利用（産業利用）および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 トライアルユースにより実施した^[6,7]。ここに、記して謝意を表する。

参考文献

- [1] Top500: <http://www.top500.org/>
- [2] OpenFOAM: <http://www.openfoam.com/>
- [3] ファム バン フック：オープンソースを用いた数値流体解析，日本流体力学会， Vol.31, pp.277-284 (2012)
- [4] ファム バン フック，野津 剛，菊池浩利，日比一喜：数値流体解析の大規模並列計算及びGPU化の試み，ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム論文集， pp.75(2011)
- [5] ファムバンフック，野津剛，菊池浩利，日比一喜，田村幸雄：LESによるセットバックした建物の局部風圧の検討，風工学シンポジウム論文集， Vol.22, pp.359-364 (2012)
- [6] ファムバンフック，長谷部 雅伸，高橋 郁夫：VOF法を用いた3次元津波解析に関する研究，土木学会論文集B2(海岸工学)， Vol.68, pp.71-75 (2012)
- [7] C. W. Hirt, et al.: SOLA-VOF: A solution algorithm for transient fluid flow with multiple free boundaries , Los Alamos Scientific Laboratory, pp.1-32 (1980)

大規模地震における強震動評価と 屋内収容物の被害評価

正月 俊行

株式会社 構造計画研究所

地震による被害軽減策を考える上で、基礎的なデータとなる地震の揺れの強さや建物内の収納物の挙動を想定するためのプログラムをTSUBAME2.0に移植し、大規模な計算の実行が可能な環境を構築した。地震の揺れの強さを想定する波動伝播解析では、プログラムのGPU化を行ない、CPUのみの場合の約10倍の計算速度が出ることを確認した。

また、巨大な計算領域を必要とする東海・東南海・南海地震のシミュレーションを行ない、多数のGPUを用いることで、実用的な時間で計算が出来ることを確認した。建物内の収納物の挙動解析については、倉庫内に積み上げられた積荷が崩れる様子をシミュレーションし、従来の約2倍の速度が計算を実行できることを確認した。

はじめに

1

2011年3月に発生した東北地方太平洋沖地震では、非常に広い範囲で甚大な被害が発生した。今後、発生確率が高いと言われている東海・東南海・南海地震が起こった場合も同様に、都市部を含めた広い範囲で被害が発生すると予測されている。このような被害を軽減するためには、事前に、地震による揺れや被害を予測し、対策を立てておくことが重要である。

本稿では、まず、安全な建物の設計という観点から、地震に起因する被害評価に関連する実務の現状と課題について述べる。続いて、その課題に対して、平成23年度のTSUBAME2.0の産業利用トライアルユースにて、実務への適用が困難な地震動評価手法と屋内被害評価手法の実用性向上に取り組んだ結果について述べる。

トライアルユースでは、まず、地震動の波動伝播解析プログラムと屋内被害のシミュレーションプログラムの2種類のプログラムをTSUBAME2.0に移植した。そして、移植したプログラムを用いて、東海・東南海・南海地震の波動伝播シミュレーション、および、屋内被害評価の一例として、倉庫内の積荷が崩れる様子のシミュレーションを行なうことで、TSUBAME2.0を用いた実用的な計算が実行出来ることの確認を行なった。

重要なファクターであることは自明である。地震の強さの想定方法としては様々な手法が存在し、現状では、実務上の手軽さや時間、費用の制約から、簡易な手法^{例えば[1]}が用いられることが多い。トライアルユースにて取り組んだ波動伝播シミュレーションも地震の強さの想定手法の一つである。この手法を用いると、簡易な方法では考慮出来ない情報を加味することで、より本物の地震波に近い波（主に、長周期帯域）が生成出来る。しかし、膨大な計算量と計算時間が必要なため、一部の重要構造物を除いては、ほとんど用いられていないのが現状である。ただ、このような手法を積極的に取り入れていくべきという指針が学会から出されており^[2]、高度な手法の必要性は今後増していくものと思われる。

次に、地震時の屋内被害評価に関する実務の現状について述べる。建物の構造設計とは異なり、室内の家具の転倒防止や収納物の落下防止などに関連する厳密な取り決めは、現状では存在しない。ただ、近年、特に、東北地方太平洋沖地震以降、このような屋内被害に対する意識が高まってきており、屋内被害に関する数多くの被害調査報告が出され^{例えば[3]、[4]}、対策に関する検討会^{例えば[5]}等も開かれている。屋内被害のシミュレーションを用いると、詳細な情報を反映して、リアリティのある被害評価を行なうことが出来る。しかし、精度のよい計算をしようとすると膨大な時間が必要になるため、実務で用いられることは少ないのが現状である。計算時間を大幅に短くできれば、屋内被害対策を立てるための検討をより手軽に行なうことが出来るようになると思われる。

構造計画研究所では、波動伝播解析の実用性向上に向けて、平成21年度から取り組みを行なっている。初年度は、地球シミュレータのトライアルユースを利用し、プログラムの移植を行なった。その次の年度では、プログラムの最適化や機能追加を重ね、大幅な計算速度の向上を実現するとともに、より短い周期帯域に対する計算精度向上を目的とした検討も行なった。そして、平成23年度は、屋内被害シミュレーションを加え、さらなる高速化・実用性向上を目指して、プログラムをGPU化してTSUBAME2.0に移植を行なった。

実務における地震被害評価の現状

2

本題に入る前に、安全な建物の設計という観点から、地震に起因する被害評価（ここでは、地震の強さの想定と屋内被害評価に限る）に関連する実務の現状と課題について述べる。その後、平成23年度TSUBAMEトライアルユースを行なうに至った背景と経緯についても述べる。

地震の強さの想定が、建物の耐震安全性を考える上で、非常に

波動伝播解析

3

これより、平成23年度TSUBAMEトライアルユースの結果について述べる。

まず、地震動の波動伝播解析プログラムのTSUBAME2.0への移植・GPU化について述べる。このプログラムは、3次元差分法を用いて波動伝播を計算する。TSUBAME2.0への移植にあたっては、既にMPI化により複数ノードでの並列化がなされていたため、主に各プロセスにおける計算のGPU化を行った。なおコンパイラは、FortranからCUDAを用いるため、PGI Fortranコンパイラを用いた。GPU化は、同一の計算のGPU化を実施している竹中（2011）⁶⁾を参

考に行なった。その結果、GPUを用いると、CPUのみの場合（-fastsseオプションを使用）と比較して、10倍程度計算速度が向上（約31億メッシュ規模、100ノード、300GPUの場合）することが確認できた。図1にプログラムの弱スケーリング性能を示す。並列数を600にしても、ある程度性能がスケールしていることが分かる。現状では、MPIの通信時間がボトルネックになっているため、さらなる高速化を図るためには、通信量を小さくするか、通信時間を短くすることが必要である。また、GPUのグローバルメモリがさらに大きくなれば、同じ規模の計算をより少ない並列数で実行できるので、効率が上がると思われる。なお、今回計算を実行した最大のメッシュ規模は約120億メッシュ規模で、ステップ数77600（継続時間約232秒）の計算をGPU 810基（270ノード）を用いて、4時間程度で解くことが出来ることを確認している。

続いて、改造したプログラムを用いて行なった東海・東南海・南

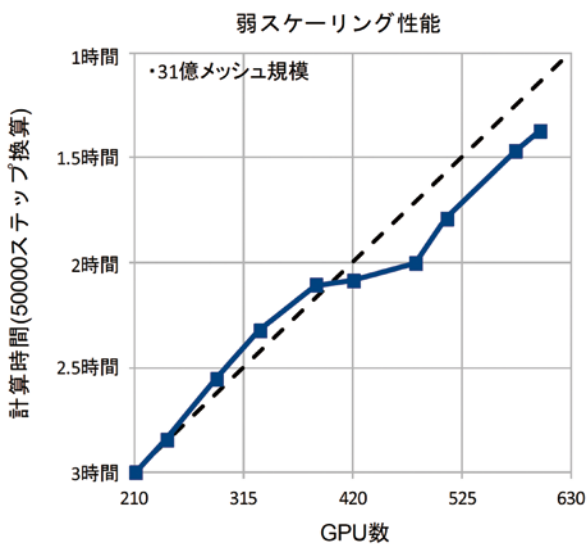
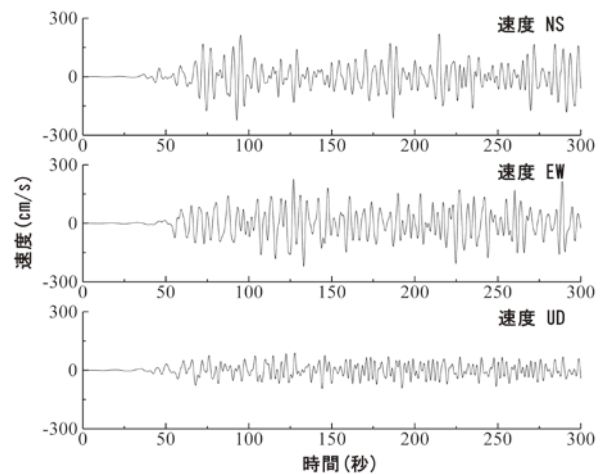


図1 波動伝播解析プログラムの弱スケーリング性能



※周期2秒より短い周期をフィルターでカットしている

図3 名古屋における速度波形

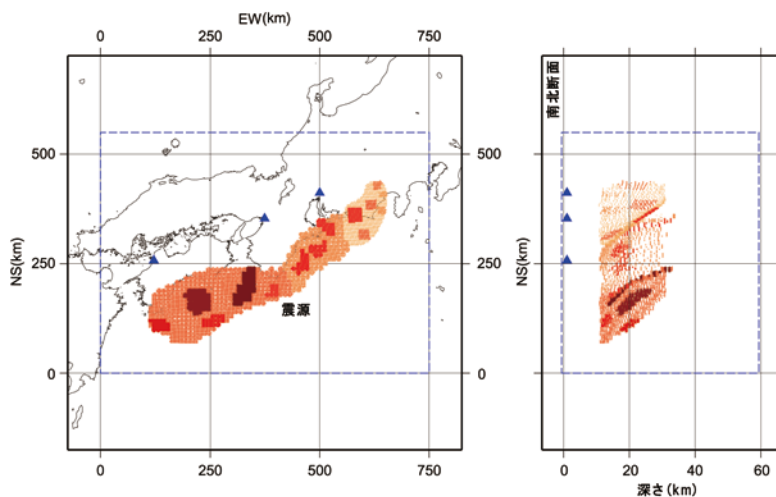


図2 東海・東南海・南海地震の震源域と計算領域

大規模地震における強震動評価と 屋内収容物の被害評価

海地震の3連動の地震の波動伝播シミュレーションについて述べる。図2に想定地震の震源域と計算領域を示す。震源は、中央防災会議(2003)の震源情報^[7]、および、山本・吉村(2012)^[8]を参考に設定した。計算規模を31億メッシュ規模(550x750x60km)、メッシュ間隔を0.2x0.2x0.2km、計算時間刻みを0.006秒とし、計算ステップ数は50000(継続時間300秒)とした。計算可能周期は、2秒以上である。図3に名古屋における速度波形を示す。50秒前後で

揺れはじめ、それ以降、300秒後も揺れがほとんど収まっていないことが分かる。図4には波動伝播の様子のスナップショットを示す。地表面の速度の大きさをコンターで示している。断層の破壊開始から約75秒で大阪平野や濃尾平野に波が到達し、その後、平野で揺れが長く続いており、この部分からも平野部で強い揺れが長く続く現象をシミュレーションで再現できていることが分かる。今後は、計算結果の妥当性について検証を行っていく。

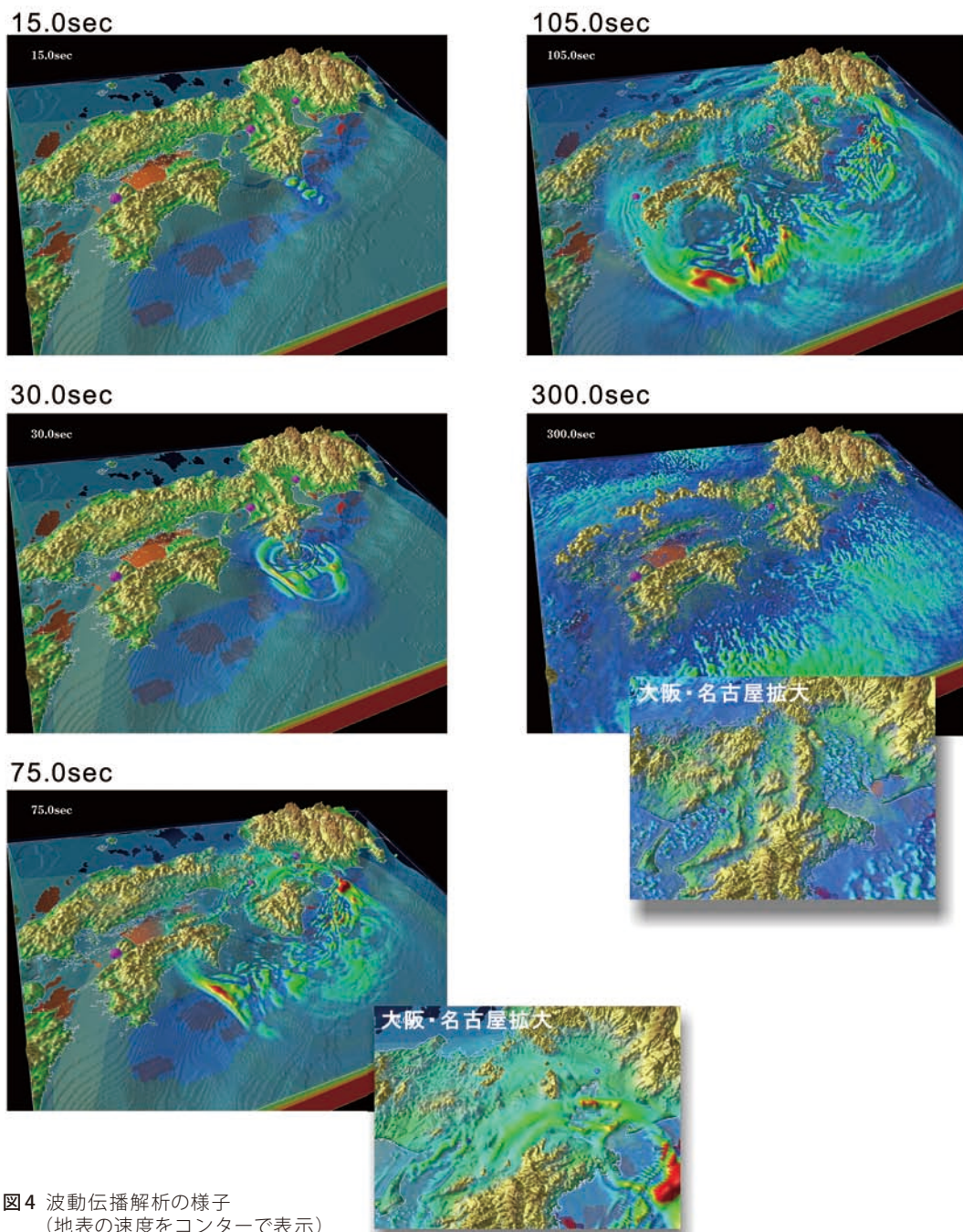


図4 波動伝播解析の様子
(地表の速度をコンターで表示)

屋内被害評価

4

屋内被害評価については、剛体の3次元物理運動シミュレーションプログラムを用いて、倉庫内の積荷の挙動を計算した。このプログラムを用いると、地震の揺れにより、倉庫の収納ラックから物が滑り落ちる様子などがシミュレーション出来る(図5参照)。剛体同士が衝突した際の接触力については、拘束条件を運動方程式と連立させて解く解析法^{[9],[10],[11]}を用いて計算を行なっている。大まかな計算フローを以下に示す。

1. 衝突判定：剛体の位置・速度・形状から衝突判定を行なう。
2. 拘束条件の更新：接触判定の結果に基づいて、接触による拘束を追加する。
3. 拘束力の計算：拘束条件が与える拘束力を計算する
4. 運動方程式に基づき、速度・位置を更新する

プログラムをTSUBAME2.0に移植するにあたって、まず、プログラムを大規模なデータに対応させる改造を行なった。改造前のプログラムは、剛体の数が1000個程度以上となると、計算がストップしてしまうような仕様であったが、改造後は、10000個程度以上でも計算が実行できるようになった。プログラムの並列化は、IntelのTBBを用いて行ない、複数のGPUを用いて計算が実施出来るように改造を行なった。計算時間の大きな部分を占めていた剛体の衝突判定の処理部分をメインにGPU化を行ない、この部分については、CPUに比べて3~4倍の計算スピードとなることを確認した。全体の計算速度としては、改造前の2倍程度となった。

倉庫内の積荷の地震時挙動のシミュレーションの計算モデルを図6に示す。約1m角のパレット(図中赤線で表示)の上に、麻袋を想定した剛体(図中白線で表示)48個を、方向を変えながら積み上げたモデルを一塊として、さらにその塊を2列分積み上げている。片方の列は、壁際に設置している。全体の剛体数は約1400個である。今回の課題では、最大で剛体数10000個強のケースが実行可能であることを確認しているが、数十秒間のシミュレーションに2週間以上かかる上、剛体の数が増えると計算が不安定になりやすいことが分かったため、剛体数を少なめに設定した。

図7に、図3で示した波形を計算モデルの床に入力した場合のシミュレーション結果を示す。図を見ると、揺れが強くなる75秒を過ぎたあたりで、積み上げていた積荷が崩れ始め、崩れた壁際の積荷が隣の単独配置の列に覆いかぶさっている様子が見て取れる。今後は、計算結果の工学的妥当性について検証を行なっていく必要がある。



図5 自動ラックからの収納物の落下解析

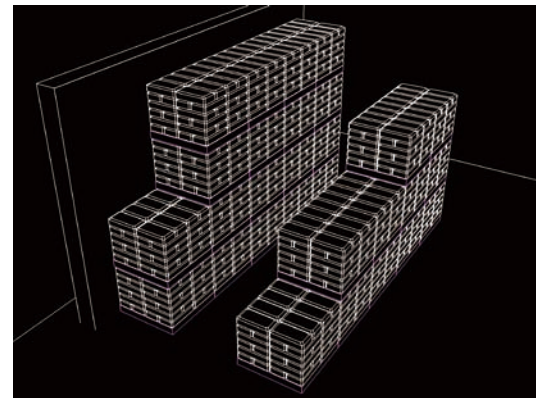


図6 倉庫の積荷の地震時挙動シミュレーションの計算モデル

おわりに

5

本稿では、平成23年度トライアルユースにて、地震動の波動伝播解析プログラムと屋内の収容物の挙動解析プログラムをTSUBAME2.0に移植し、大規模な計算を従来よりも短い時間でこなせる環境を構築した結果について述べた。今後は、これらのプログラムを実務に生かしていくことを念頭に、計算結果の工学的妥当性の検証を行なっていく予定である。

謝辞

本稿に記載した計算は、文部科学省の先端研究施設共用促進事業の補助をいただき、東京工業大学 学術国際情報センターのスパコンTSUBAME2.0を用いて行なった。記して謝意を表す。

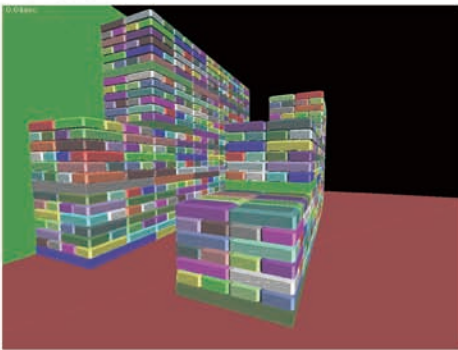
参考文献

- [1] 翠川 三郎、小林 啓美：地震断層を考慮した地震動スペクトルの推定，日本建築学会論文報告集，Vol. 282，pp.71-81，1979。

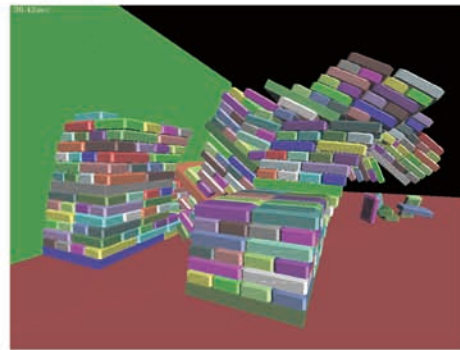
大規模地震における強震動評価と 屋内収容物の被害評価

- [2] 日本建築学会：最新の地盤震動研究を活かした強震波形の作成法，2009.
- [3] 東京消防庁：平成23年（2011年）東北地方太平洋沖地震調査報告書，2012.
- [4] 日本建築学会：長周期地震動対策に関する公開研究集会，2012.
- [5] 気象庁地震火山部：長周期地震動に関する情報のあり方検討会，2012.
- [6] 竹中 博士：並列GPUを用いた大規模地震波伝播シミュレーション，学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点平成23年度共同研究中間報告書，2011，12.
- [7] 内閣府中央防災会議：「東南海，南海地震等に関する専門調査会」（第16回）資料3図表集2，2003，12.
- [8] 山本 優・吉村 智昭：3次元大規模FEMによる東海・東南海・南海連動地震の長周期地震動シミュレーション，日本建築学会構造系論文集，Vol. 7，No. 677，p.1055-1064，2012.
- [9] D. Baraff: Analytical Methods for Dynamic Simulation of Non-Penetrating Rigid Bodies, Computer Graphics Proceedings(SIGGRAPH 89) Vol. 23, pp. 223-232, 1989.
- [10] Kenny Erleben: Multibody Dynamics Animation Lecture 12, <http://www.diku.dk/OLD/undervisning/2005f/101/lecture12.pdf>.
- [11] 長谷川晶一・田崎勇一・三武裕玄・他：“Springhead2”，<http://springhead.info/wiki/index.php>.

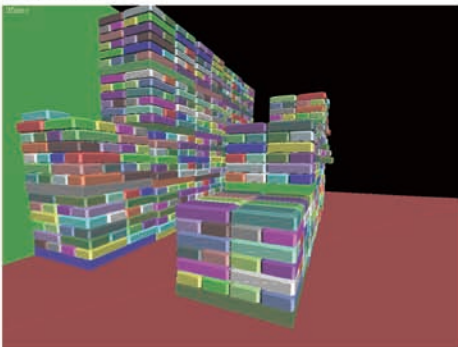
40.0sec



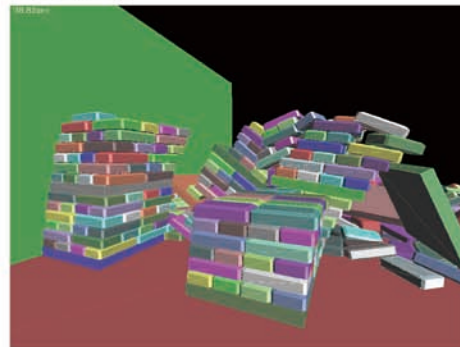
76.4sec



75.0sec



76.8sec



76.0sec

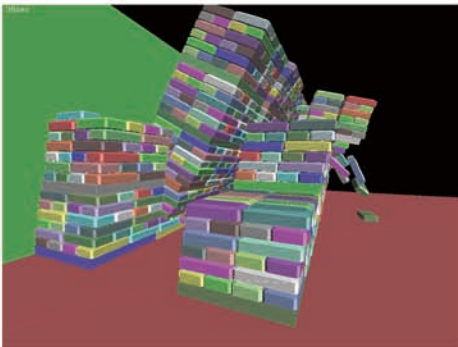


図6 倉庫の積荷の地震時挙動シミュレーションの結果

● **TSUBAME e-Science Journal No.8**

2013年3月12日 東京工業大学 学術国際情報センター発行 ©
ISSN 2185-6028

デザイン・レイアウト：キックアンドパンチ

編集： TSUBAME e-Science Journal 編集室

青木尊之 ピパットポンサー・ティラボン

渡邊寿雄 佐々木淳 仲川愛理

住所： 〒152-8550 東京都目黒区大岡山 2-12-1-E2-1

電話： 03-5734-2087 FAX：03-5734-3198

E-mail： tsubame_j@sim.gsic.titech.ac.jp

URL： <http://www.gsic.titech.ac.jp/>

TSUBAME

TSUBAME 共同利用サービス

『みんなのスパコン』TSUBAME共同利用サービスは、
ピーク性能 2.4PFlops、18000CPUコア、4300GPU 搭載
世界トップクラスの東工大のスパコンTSUBAMEを
東工大以外の皆さまにご利用いただくための枠組みです。

課題公募する利用区分とカテゴリ

共同利用サービスには、「学術利用」、「産業利用」、「社会貢献利用」の3つの利用区分があり、さらに「成果公開」と「成果非公開」のカテゴリがあります。
ご利用をご検討の際には、下記までお問い合わせください。

TSUBAME 共同利用とは…

他大学や公的研究機関の研究者の **学術利用** [有償利用]

民間企業の方の **産業利用** [有償・無償利用]

その他の組織による社会的貢献のための **社会貢献利用** [有償利用]

共同利用にて提供する計算資源

共同利用サービスの利用区分・カテゴリ別の利用課金表を下記に示します。TSUBAMEにおける計算機資源の割振りは口数を単位としており、1口は標準1ノード(12 CPUコア、3GPU、55.82GBメモリ搭載)の3000時間分(≒約4ヵ月)相当の計算機資源です。
1000 CPUコアを1.5日利用する使い方や、100 GPUを3.75日利用する使い方も可能です。

利用区分	利用者	制度や利用規定等	カテゴリ	利用課金(※)
学術利用	他大学または研究機関等	共同利用の利用規定に基づく	成果公開	1口:100,000円
産業利用	民間企業を中心としたグループ	「先端研究基盤共用・プラットフォーム形成事業」に基づく	成果公開	トライアルユース(無償利用) 1口:100,000円
			成果非公開	1口:400,000円
社会貢献利用	非営利団体、公共団体等	共同利用の利用規定に基づく	成果公開	1口:100,000円
			成果非公開	1口:400,000円

(※) 利用課金は平成24年度の価格で、平成25年度より値上されます。平成25年度の価格は、下記のURLをご参照ください。
<http://www.gsic.titech.ac.jp/node/58>

産業利用トライアルユース制度 (先端研究基盤共用・プラットフォーム形成事業)

東工大のスパコンTSUBAMEを、より多くの企業の皆さまにご利用いただくため、初めてTSUBAMEをご利用いただく際に、無償にてご試用いただける制度です。

(文部科学省 先端研究基盤共用・プラットフォーム形成事業による助成)

詳しくは、下記までお問い合わせください。

お問い合わせ

- 東京工業大学 学術国際情報センター 共同利用推進室
 - e-mail kyoyo@gsic.titech.ac.jp Tel. 03-5734-2085 Fax. 03-5734-3198
- 詳しくは <http://www.gsic.titech.ac.jp/tsubame/> をご覧ください。