

MD-6

次世代ペタスケール CFD のアルゴリズム研究

中橋和博, 佐々木大輔 (東北大学大学院工学研究科)
小林広明, 江川隆輔 (東北大学サイバーサイエンスセンター)
高橋俊, 新井紀夫 (東京農工大学工学研究院)
東田学 (大阪大学・サイバーメディアセンター)
石井 克哉 (名古屋大学情報基盤センター)

ペタフロップス級計算機開発および将来の更なる計算機性能の向上を念頭に, 等方直交格子をベースとする次世代 CFD アルゴリズムを世界に先駆けて構築する研究を進めている。等方直交格子はその単純性から格子生成を極めて高速に行え, 高次精度解法の導入も容易である。これら利点は大規模計算で更に強化されることが期待される一方, 大規模な非定常計算を分散メモリ型並列計算で行う場合には, ①数値計算の中で行なう MPI の情報交換によるレイテンシ, ②データの IO 時間, ③データの転送時間が大きなボトルネックとなることが分かっている。本研究では, 並列計算効率を低下させるこれら 3 つの障壁に対して, 数値流体力学の研究グループと計算機科学を専門とする研究グループとの協力により解決を目指す。現在, ペタフロップス級流体計算を可能とする流体ソルバーのアルゴリズム構築と評価を行っており, 分散メモリ型並列計算機への適用も進めている。

1. 研究の目的と意義

現在, 三菱航空機株式会社が 70~90 席クラスの旅客機 (MRJ) を開発中である。我々は, この国産旅客機開発において自主開発の CFD コード (TAS-Code : Tohoku University Aerodynamics Simulation Code) により全機空力評価や多分野複合最適設計で大きく貢献した。MRJ は CFD を高度に活用した世界的にも最先端の適用例になっている。一方, 航空輸送の高い成長を予測して旅客機開発に中国やロシアも参入し, 航空機産業の世界的な競争が激しくなっている。また, 地球温暖化問題や航空輸送量の増大に伴い, 機体だけでなく運航も含めた航空技術全般に新たな革新が要求されて来ている。その厳しい状況において, 欧米に比べ不足している我が国航空関連の試験設備や開発経験を補うために, 国家プロジェクトとして進められている高性能計算機を活用したシミュレーション技術への期待は大きい。

しかしながら, 計算機能力だけに依存したリードは一時的なものに終わる可能性が大きい。飛躍的に計算能力が高まるのを機会に, それを最大限に活かす計算アルゴリズムを構築し, いち早く応

用研究を進める事が将来に渡る差別化技術の創成につながる。そこで, ペタフロップス級流体計算を可能とする流体ソルバーのアルゴリズム開発と, 現在開発中の次世代スーパーコンピュータや大規模ベクトル計算基盤におけるソルバーの高効率実行を可能にする超並列化技術およびベクトル化技術の研究開発に取り組む必要がある。

世界のスーパーコンピュータは過去 10 年で 1000 倍もの性能を向上させており, その勢いは今後も当分続くと言われている。本研究は, このスーパーコンピュータの将来の更なる性能向上を念頭に, そのペタフロップス級の演算能力を最大限に活かす流体の数値計算アルゴリズムを, 数値流体力学の研究グループと計算機科学を専門とする研究グループとの協力により開発することを目的とする。この研究により, 従来は計算機能力の限界により制限されていた様々な流体問題への挑戦を可能にするとともに, シミュレーション技術の高度化を通じて航空機をはじめとする流体機械の高性能化と環境適合化に資することを目指すものである。

2. 当拠点公募型共同研究として実施した意義

(1) 共同研究を実施した大学名

本共同研究は、東北大学・東京農工大学・大阪大学・名古屋大学と共同して研究を進めた。

(2) 共同研究分野

超大規模数値計算系応用分野・大規模データ処理系応用分野・超大容量ネットワーク技術分野

(3) 当公募型共同研究ならではの事項など

ペタフロップス級流体計算を可能とする流体ソルバーのアルゴリズム構築のためには、大規模ベクトル計算機や超並列計算機環境による評価が必須であり、当公募型共同研究による計算機環境が必要不可欠である。また、本研究の最終目標としては、各センターの計算資源のみならず、複数拠点をまたいだ広域ベクトル連携基盤において大規模計算を実施し、大規模数値解析に向けた応用例を示す予定である。

3. 研究成果の詳細

3.1 Building-Cube 法

BCM は格子生成、流体解析アルゴリズム、後処理の単純性を保つために等間隔直交格子を採用している高解像度の計算手法である。BCM では流れ場を多くの様々なサイズの”Cube”と呼ばれる立方体の領域に分割する。各 Cube サイズは物体の形状に合わせて決定され、各 Cube の内部には等間隔直交格子”Cell”を生成して計算が行われるが、全ての Cube が同数の Cell を持つことで高い並列化効率が得られる。また、直交格子である BCM では物体境界は階段状表現によって表現される。したがって物体境界の幾何学精度を保つため、また境界層内の粘性領域を解くために物体近傍では非常に細かい格子が必要である。図4に本論文の解析で使用する円柱周りの BCM 格子を示す。こ

の図からわかるように物体表面は階段状に近似された非常に細かな Cell によって表現されている。

本研究における支配方程式は三次元非圧縮性 Navier-Stokes 方程式とし、それを Fractional-step 法によって段階化したのちに、スタガード格子においてそれぞれの項を有限差分法で近似する。Fractional-step 法の予測段階で仮の速度を求める際には、対流項と粘性項のどちらにも2次精度の Adams-Bashforth 陽解法を用い、対流項の差分近似には3次精度風上差分、粘性項と圧力の Poisson 式には2次精度中心差分近似をそれぞれ用いる。ここで、直交格子法において大きな研究課題の一つに物体表面の近似方法がある。本手法では物体表面は格子線に沿った階段形状のままとし、特に近似精度を上げるような処理は行わない。ただしその対価として十分に細かな格子を用いることが前提となる。これはコードが簡易になり格子生成が高速に行なえるというメリットと、格子の大規模化というデメリットを持ち合わせているが、本研究では後者は今後の計算機資源があれば解決されると位置づける。この手法の最終的な到達点は、十分に細かい格子を用いることで現在の CFD の大きな課題の一つであるモデル依存性を除去することである。

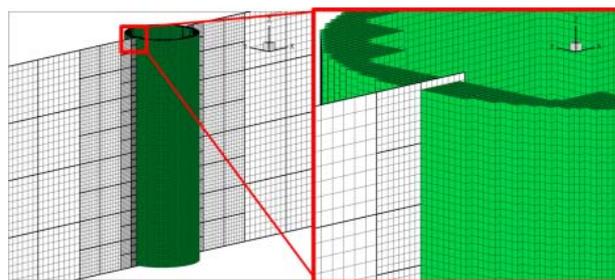


図1 円柱まわりの BCM 格子
(太線は Cube 境界, 細線は Cell)

3.2 三次元球周りの流体解析

本研究では階段状の影響や計算手法の妥当性を確認するため、基本的な形状である三次元球周りの流れ場を解析する。検証は直径基準の Reynolds 数が 5×10^2 の流れ場において、表面圧力係数分布と抗力係数を用いて検討する。最小格子幅を

1.25×10^{-3} とし，すべての cube を $imax=jmax=kmax=64$ の等間隔直交格子で分割した格子を作成した．本手法では，cube の分布を固定して等間隔直交格子を 32, 16, 8, 4, 2 と粗くした格子を作成し，粗い方から順々に計算することで，計算時間の短縮を図っている．

計算格子の Cube 数は 3120 で固定し，それらの cube の内部には 2, 4, 8, 16, 32, 64 の Cell 数とした格子を作成した．総 Cell 数は，2Cell の場合に 2 万 5 千，64Cell の場合に約 8 億となる．図 2 には Cell 数が 2, 4, 8, 16 の場合の球の表面を示した．それぞれの最小格子幅は，直径を基準長として 20×10^{-3} , 10×10^{-3} , 5×10^{-3} , 2.5×10^{-3} である．物体表面の Cell が欠けているように見えるが，これは可視化上そう見えるだけで，計算における球の表面は階段状に欠損無く表現されている．実際にはさらに 32Cell と 64Cell，最小格子幅が 1.25×10^{-3} , 0.625×10^{-3} の格子がある．時間刻み幅は全ての計算において $CFL=0.05$ から決定しており，具体的な無次元時間刻み幅の値は 2, 4, 8, 16, 32Cell の場合において，それぞれ 2.00×10^{-3} , 8.86×10^{-4} , 4.31×10^{-4} , 2.19×10^{-4} , 1.09×10^{-4} である．若干ばらつきがあるのは再計算時に CFL の値から時間刻みを決定したためである．

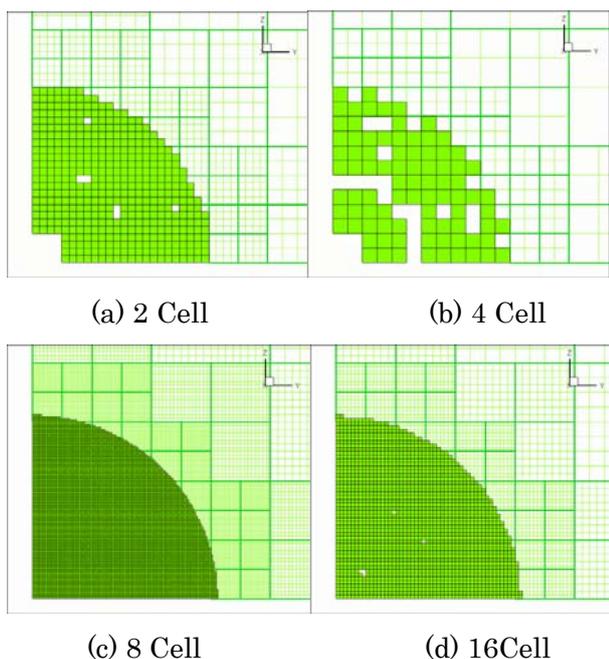


図 2 球周りの物体解像度

図 3 に Cell 数が 2, 4, 8, 16 のときの球後流部 ($\theta=90^\circ \sim 270^\circ$) における，対称面上の時間平均渦度分布を示す．コンターのレンジは全ての図で -3 から +3 である．Cell 数の増加にともない，遠方における渦度の発達が顕著に見られる．また，紙面の上下方向での渦度の非対称性の発達も確認でき，これは特に 2Cell と 4Cell の間において明確に見られる．

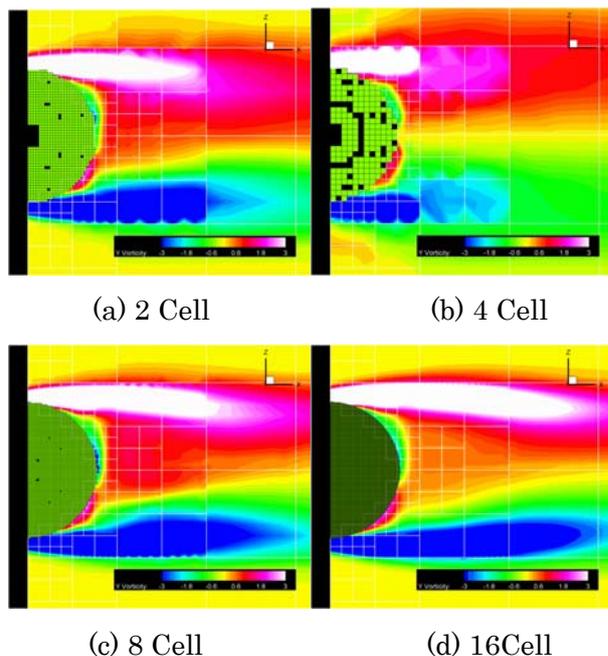


図 3 対称面上の時間平均渦度分布

ここで，大規模計算を行なう際に必要となる計算資源の見積もりを行う．本研究では各 Cell あたり 116 バイトとなるように変数を確保した．実際にメモリを確保する際には，ほぼ全ての変数において，スタガード格子配置のために Cell 数に一つの要素を加え，さらに各軸方向に 2 つのオーバーラップを加えてメモリを確保する．そのため，例えば Cube の一辺にある Cell 数が N である場合，スタガード格子の定義点の関係とオーバーラップによって実際に各 cube 内で割付されるメモリは N^3 でなく軸の正負方向に 5 セルずつ加えた $(N+1+2+2)^3$ セルである．その各セルに対して 116 バイトのメモリが必要として見積もったメモリと，実際に計算に必要とされたメモリ，そしてオーバーラップを加えた全領域の総セル数を載せたグラ

フを図4に示す。

合計の Cell 数が増大するにつれて、見積もったメモリ量と実際に必要とされたメモリ量が近づいている。このメモリの見積もりでは、先に記したように Cube の変数配列などは考慮していないため、総計のセル数が少ない場合にはその影響が強く見られ、見積もったメモリと実際のメモリの間にずれが生じる。しかし総計のセル数が増大するにつれ、セルの変数の割合が大きくなるため見積もられたメモリと実際に必要とされたメモリが近くなっている。この見積もりから、64Cell の場合（総計約 8 億 Cell）にはオーバーラップを含めた $3120 \times 69^3 = 1024M$ Cell に対して、1セル当たり 116 バイトが必要として、約 118GB のメモリが必要になると見積もられる。

また、本研究ではベクトル計算機である NEC SX-9 によって計算を行なったため、その際の計算効率についても検討する。これらの性能解析はプログラム全体に対する結果である。図5より、ベクトル化率と平均ベクトル長は Cell 数の増加にともなって向上しており、これは cube の内部のループのほぼ全てが完全にベクトル化されていることから自明の結果である。本研究ではオーバーラップセルはほとんどのループには含まれていないため、2セルの場合には 2^3 の、32セルの場合には 32^3 のループとなっている。ただ 32セルの場合でも平均ベクトル長が 254.4、ベクトル化率が 99.94%であり、これはさらに向上させる必要がある。この一因としては、本研究ではスタガード格子を用いているためにインデックスが各速度成分と圧力によって異なっていることが考えられる。

一方で、図6に示す1タイムステップ当たりの平均の CPU 時間と MFLOPS のグラフを見ると、1タイムステップ当たりの平均 CPU 時間は8セルの場合まではほぼ同程度であるが、16セルから32セルに増えた際に急激に増加している。いずれの計算でも圧力の Poisson 方程式の反復計算は十分に収束しており、反復回数に大きな差は無い。また、本手法では各軸方向に格子が倍になるように細分化しているので、セル数が2から4になる

際に実際のループ長としては $2^3=8$ 倍になっている。16セルから32セルにかけては1ステップ当たりの CPU 時間は7倍となっており、これは妥当な値であると言える。一方で8セルから16セルの場合には3.5倍にしか上昇していないが、このときには高速なベクトル演算も十分に発揮されていないため、このような結果になっていると思われる。この結果から、64セルの場合には11.95秒の8倍の CPU 時間として約96秒が1タイムステップを進めるのに必要と見積もることができる。

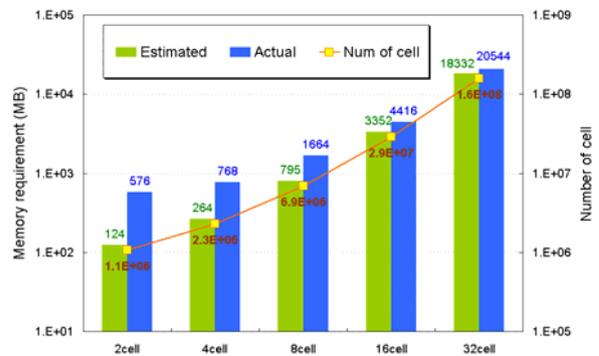


図4 メモリ使用量（予測値，実測値，Cell数）

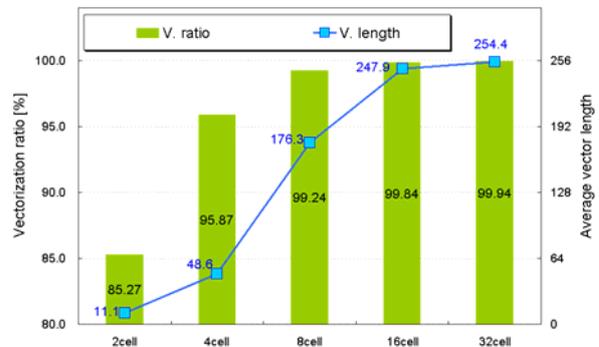


図5 ベクトル化率と平均ベクトル長

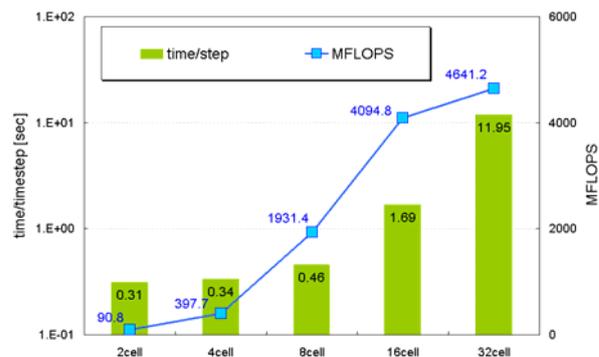


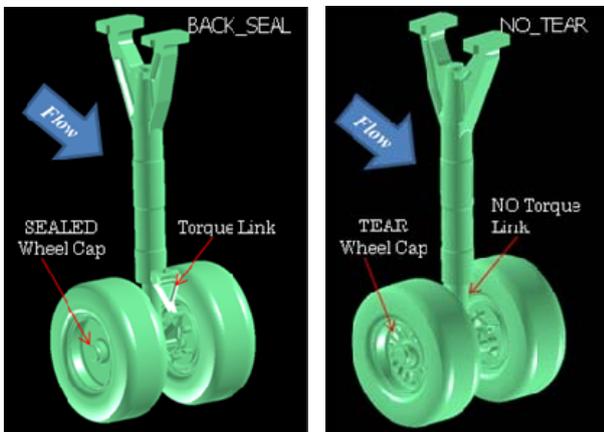
図6 1タイムステップ当たり平均のCPU時間とMFLOPS値

3.3 実形状に対する大規模流体解析

複雑な実形状の物体まわりの流れ場の計算に対して、格子生成が容易な直交格子に基づく本手法が適していること及び現在の大規模解析における信頼性を明らかにするために、宇宙航空研究開発機構（JAXA）の航空機主脚騒音計測用モデル（LEG 形状：Landing gear noise Evaluation Geometry）に対して流体解析を行う。本研究で用いる主脚モデル（LEG モデル）は、シリンダー、ピストン、タイヤ、トルクリンクから構成された簡略化形状であり、流れと流体音に対する詳細部品の影響を評価することが目的である。本研究では、トルクリンク（前方・無し・後方）の配置とホイールキャップ形状（シール・涙目）を変化させた6種類の形状について、詳細部品の効果について検証する。ここで、形状名は下記のように表す：

トルクリンク位置_ホイールキャップ形状

例として、“BACK_SEAL”と“NO_TEAR”形状を図7に示す（前者は、トルクリンク前方配置・ホイールキャップはシールを表す）。



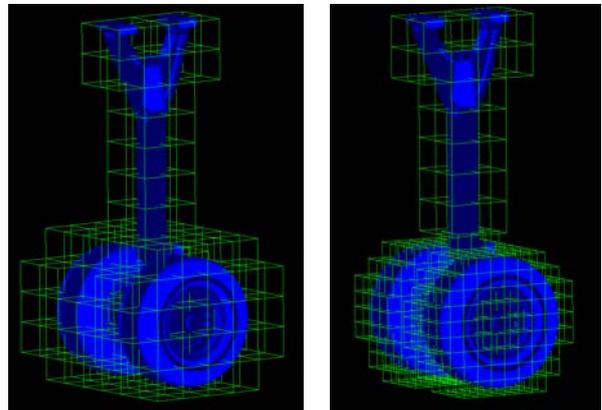
(a) BACK_SEAL 形状 (B) NO_TEAR 形状

図7 LEG 形状

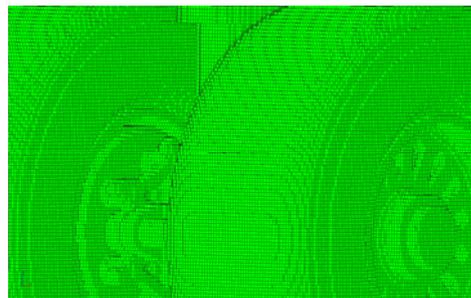
それぞれの LEG 形状に対して、タイヤ直径 D を基準にして BCM 格子を生成した。総 Cell 数、最小格子幅と Cube 分割数はいずれの形状もそれぞれ約 5500 万 Cell, $7.32 \times 10^{-3} D$, 32 分割である (Base 格子)。この LEG 形状に BCM 格子を生成した図を図 8 (a), (c) に示す。物体境界が階段状に

表現されており、涙目孔形状も正確に直交格子によって再現できていることがわかる。直交格子に基づく手法であるため、非常に高速に格子を生成することが出来、詳細部品の有無等の評価を実施しやすい利点がある。

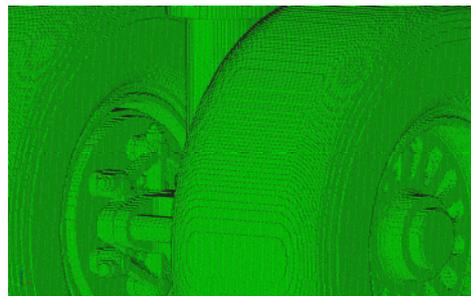
上記 Base 格子に対し、タイヤ周りの格子周りのみに細分化を施した Fine 格子を用意した。Base 格子は物体近傍は一律な最小格子幅であるのに対し、Fine 格子はタイヤ近傍のみ Base 格子の半分の最小格子幅としてある。図 8 より、Fine 格子では、このようにタイヤ周りの非常に細かな形状を精度よく再現できていることがわかる。それぞれの格子サイズを表 1 に記載する。



(a) Wall Cube (Base) (b) Wall Cube (Fine)



(c) タイヤ近傍拡大図 (Base)



(d) タイヤ近傍拡大図 (Fine)

図8 LEG 周りの Base 格子と Fine 格子

表1 計算条件の比較 (Base 格子と Fine 格子)

	Base	Fine
Cube数	約1,800	約2,700
総Cell数	約5,800万	約8,700万
最小格子幅	7.32×10^{-3}	3.66×10^{-3}
Cube分割数	32	
計算時間	34 H	75 H

計算を行う際のタイヤ直径基準のレイノルズ数は 1.8×10^6 , 流速は 54.4 m/s, タイヤ直径 $D=0.4$ m である.

解析領域は流れ主流(x)方向に 60D, 左右(y)方向に 60D, 上下(z)方向に 30D の空間をとる. また, 後流域に最小格子幅の 2 倍の大きさを持つ Cell を 5D の長さに渡って配置し, 後流を適切に捉えられるようにした. 解析領域と格子の様子を図 9 に示す.

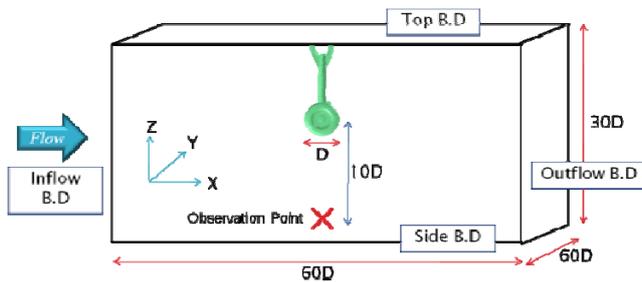


図9 解析領域

図 10 にタイヤ周方向の圧力分布を示す. これは BACK_TEAR の Base 格子・Fine 格子における計算結果と JAXA による実験値である. なお, タイヤ上の圧力測定点及びタイヤ周方向の角度の定義を図 11 に示す. 図 11 のように, 0 度位置を後方の淀み点, 90 度位置を支柱側, 180 度位置を淀み点, 270 度位置をタイヤ接地点とした. 図 10 より, Base 形状の C_p 分布 (圧力係数分布) を見ると, 淀み点 (180 度) 付近において計算結果は実験結果を精度よく捉えられている一方, $\theta=90$ 度, 270 度付近においては C_p の最小値を捉えられていない. これらの角度は剥離点付近であり, 計算結果はタイヤ角部における剥離を捉えられていないこ

と分かる. これは, 剥離点付近の格子解像度の不足が原因だと考えられる. 実際, タイヤ近傍の格子細分化を行っている Fine 形状においては, Base 形状よりも圧力回復が見られており, 格子細分化の効果により剥離点位置が改善されていることが分かる. Fine 形状においても実験値を定性的に再現できてはいないものの, 更なる細分化による大規模流体解析により, 改善が期待できる.

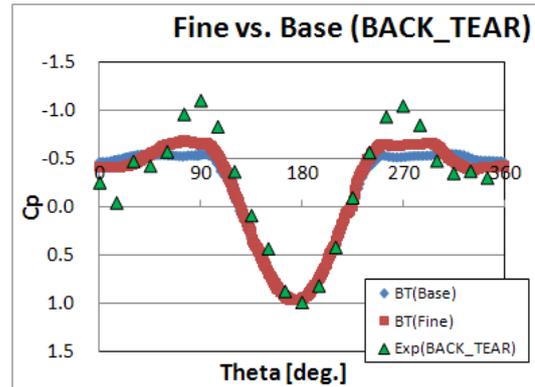
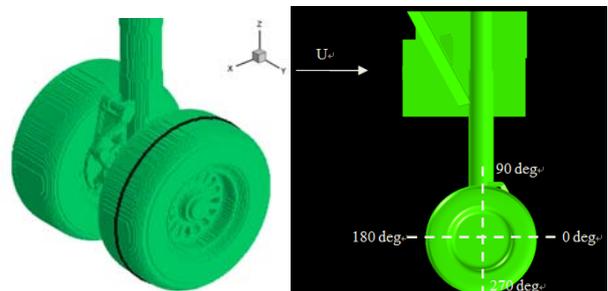


図10 タイヤ周方向の圧力係数分布



(a) 圧力測定位置

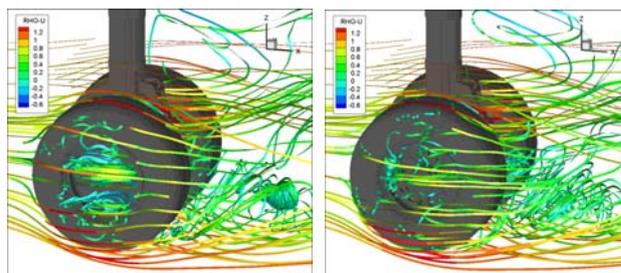
(b) 角度の定義

図11 タイヤ周方向の圧力測定点定義

格子細分化の有無によるタイヤ近傍における流線の比較を行う. 図 12 は, Fine 格子の結果であり, 図 13 は, Base 格子の結果である. それぞれ, (a)が BACK_SEAL 形状, (b)が BACK_TEAR 形状である. Base 格子, Fine 格子共に, BACK_SEAL 形状においては, タイヤ外側に大きな渦が生じていることが分かる. 一方, TEAR 形状ではこの渦領域が解消されている. これは図からわかるように, 流れが涙目孔を通りタイヤの内側から外側に向かって誘起されている影響である. 次に, Base 格子と Fine 格子を比較すると, 流線

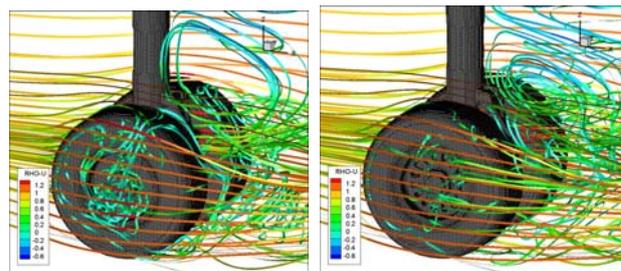
においても細分化の影響が顕著であることがわかる。Fine 格子を用いることで、BACK_SEAL 形状ではタイヤ側方部における再付着が確認され、BACK_TEAR 形状では剥離の遅れが確認出来る。

最後に、Fine 格子における車軸下面の圧力変動 P' の RMS を比較する。図 14 は、主脚モデル中央における断面図であり、6 形態のタイヤ周りの変動量を表している。特筆すべきは、トルクリンクが前方にある場合であり、トルクリンクに流れが衝突するため、この図に示されるようにトルクリンクと支柱後方の P'_{rms} が他形状より大きくなっている。その一方、車軸直下における P'_{rms} が小さくなっていることが確認できる。本手法により、トルクリンクやホイールキャップによる流れに対する効果を評価することが出来ることから、将来的には空力騒音低減デバイスの評価を行うことも可能である。



(a) BACK_SEAL (b) BACK_TEAR

図 12 タイヤ周りの流線 (Fine 格子)



(a) BACK_SEAL

(b) BACK_TEAR

図 13 タイヤ周りの流線 (Base 格子)

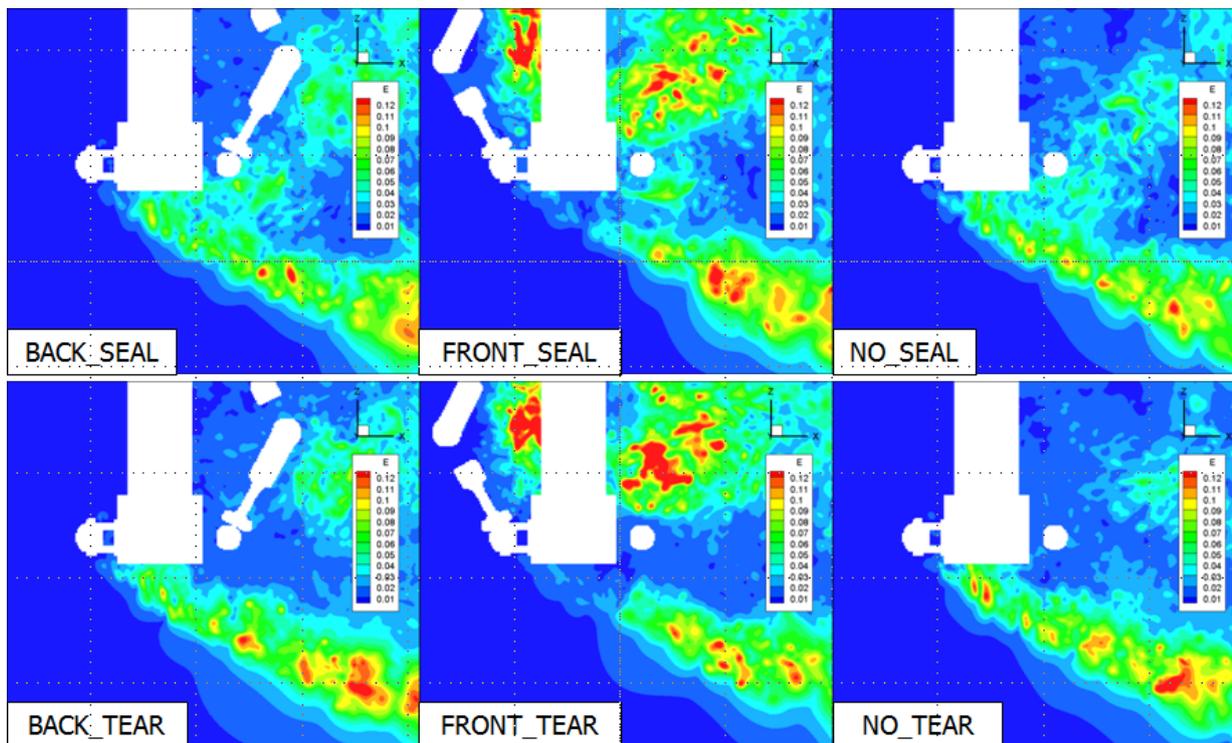


図 14 主脚モデル中央断面における車軸下面の圧力変動 P'_{rms} (トルクリンク位置とホイールキャップ形状を変化させた 6 形態)

4. これまでの進捗状況と今後の展望

ベクトル計算機を使用して大規模流体解析を行い、将来のペタフロップス級計算機に適したアルゴリズムの検討と評価を進めてきた。物体近傍の直交格子の細分化を進めることで、物体の階段状表現による剥離を押さえることが出来る等、流れ場を改善することができる。更なる細分化を行い、より大規模な並列解析を行うことで高いレイノルズ数であっても信頼性の高い解析が可能となることは期待できるが、現在の計算機環境では実現は難しく、壁面の効率的な表現法が必要である。

本研究の目的の一つとして、現在開発中の次世代スーパーコンピュータに代表される大規模並列計算基盤において高効率実行を可能にするソルバー開発を挙げている。現在、分散並列計算用にアルゴリズムの変更を進めており、それが完了しだい、次世代スーパーコンピュータと同じ基本アーキテクチャを有する名古屋大学のスーパーコンピュータを用いて超並列計算に取り組み、性能評価及び改善を進める予定である。

5. 研究成果リスト

(1) 国際会議プロシーディングス及び国際会議発表

Kazuhiko Komatsu, Takashi Soga, Ryusuke Egawa, Hiroyuki Takizawa, Hiroaki Kobayashi, Shun Takahashi, Daisuke Sasaki, Kazuhiro Nakahashi, "Efficient Data Management for the Building Cube Method using Cartesian Meshes on the GPU Platform," In ISC'10 Poster (International Supercomputing Conference 2010), June 2010.

Hiroshi Onda, Ryotaro Sakai, Daisuke Sasaki, Kazuhiro Nakahashi, "Aeroacoustic Sound Analysis around JAXA Landing Gear Model by Building-Cube Method," *Proceedings of 7th International Conference on Flow Dynamics*, pp. 212-213, Nov. 2011.

Ryotaro Sakai, Hiroshi Onda, Daisuke Sasaki, Kazuhiro Nakahashi, "Data Compression Method for Flow

Computation Data Using Discrete Wavelet Transform," *Proceedings of 7th International Conference on Flow Dynamics*, pp. 696-697, Nov. 2011.

Hiroshi Onda, Ryotaro Sakai, Daisuke Sasaki, Kazuhiro Nakahashi, "Unsteady Flow and Aerodynamic Noise Analysis around JAXA Landing Gear Model by Building-Cube Method," 49th AIAA Aerospace Sciences Meeting, AIAA Paper 2011-1081, Jan. 2011.

Ryotaro Sakai, Hiroshi Onda, Daisuke Sasaki, Kazuhiro Nakahashi, "Data Compression of Large-scale Flow Computation for Aerodynamic/Aeroacoustic Analysis," 49th AIAA Aerospace Sciences Meeting, AIAA Paper 2011-1135, Jan. 2011.

Noriyoshi Ishikawa, Daisuke Sasaki, Kazuhiro Nakahashi, "Large-scale Distributed Computation Using Building-Cube," 49th AIAA Aerospace Sciences Meeting, AIAA-2011-0754, Jan. 2011.

(2) 国内会議発表

坂井玲太郎, 恩田博, 佐々木大輔, 中橋和博, 「ウェーブレット変換を用いた流体計算データ圧縮法」, 第88期流体工学部門講演会, 米沢, 2010年10月.

恩田博, 坂井玲太郎, 佐々木大輔, 中橋和博, 「Building-Cube法によるJAXA主脚モデル周りの空力音解析」, 第88期流体工学部門講演会, 米沢, 2010年10月.

西村康孝, 石田崇, 佐々木大輔, 中橋和博, 「直交格子を用いた大規模格子生成」, 第24回数値流体力学シンポジウム, 横浜, 2010年12月.

恩田博, 佐々木大輔, 中橋和博, 村山光宏, 山本一臣, 横川譲, 「Building-Cube法を用いたJAXA主脚モデルの詳細部品の流体解析」, 第24回数値流体力学シンポジウム, 横浜, 2010年12月.

高橋俊, 新井紀夫, 佐々木大輔, 中橋和博, 「直交格子積み上げ法を用いた非圧縮流れの大規模数値解析」, 第24回数値流体力学シンポジウム, 横浜, 2010年12月.