# 物理モデルへの依存性を最小化するための 高解像度非熱流体シミュレーションコードの開発

プロジェクト責任者

大木 慎一 株式会社テラバイト

#### 著者

大木 慎一<sup>\*1</sup>、菊池 俊彦<sup>\*1</sup>、松岡 浩<sup>\*2</sup>、菊池 範子<sup>\*3</sup>、板倉 憲一<sup>\*4</sup>、廣川 雄一<sup>\*4</sup>、 齊藤 展<sup>\*1</sup>、緒方 惟光<sup>\*1</sup>

- \*1 株式会社テラバイト
- \*2 国立大学法人東北大学(委嘱)
- \*3 株式会社サイエンス・サービス
- \*4 独立行政法人海洋研究開発機構

**利用施設**:独立行政法人海洋研究開発機構 地球シミュレータ 利用期間:平成 25 年 8 月 7 日~平成 26 年 8 月 6 日

## アブストラクト

今後の産業利用の"ものづくり"評価において、最適設計のしぼりこみに信頼して利用できる超高 解像度な非熱流体解析コードを開発する。

近年、スパコン計算能力の飛躍的な向上により、流体シミュレーションの解像度が急速に向上した。 しかし、それでも解像できない微細な流れが存在し、この不規則変動を扱う物理モデルが複雑な乱流 を正確に記述できていない。現時点では、細かな格子でできるだけ微細な渦までを直接計算し、物理 モデルの不正確な部分への依存性を極力少なくして精度向上を目指す必要がある。この精度向上が、 航空機や自動車の構造設計、各種冷却設備の流動設計等の信頼性を確固たるものにし、CO2の排出低 減など環境負荷の低減に直接貢献できる"ものづくり"を可能にする。

本プロジェクトでは、多数の格子点計算をコンパクトに実行できる"多速さ格子ガス法"を用いて、 格子点 1000 億点規模の高解像度な非熱流体解析を産業利用で使えるスパコン規模で実現することを 目指し、ES2の64ノードの主記憶容量でも時間発展計算を進めることができることを確認した。また、 実用化に向けて、入力データの作成や計算結果の表示に関する機能を付加した。

**キーワード**:大規模シミュレーション、多速さ格子ガス法、非熱流体解析、超高解像度、 ものづくり評価

#### 1. 課題の目的・内容

今後の産業利用の"ものづくり"評価において、最適設計のしぼりこみ等に信頼して利用できる超 高解像度な非熱流体シミュレーションコードを開発する。本プロジェクトでは、特にその第一段階と して、格子点 1000 億点規模のシミュレーションを、産業利用で使えるスパコン規模で実現できるシ ミュレーションコードの開発を目指す。

具体的には、できるだけ細かな格子計算を行うため、各格子点の物理状態をできるだけ少ない情報 量(ビット数)で記述するとともに、格子点あたりの状態情報の更新(時間発展計算)をできるだけ 狭いビット幅で超並列に行う。本開発のベースになる"多速さ格子ガス法シミュレーションコード"(以 下、「性能試験コード」という。)は既に開発済み<sup>1)</sup>であり、この要求を満たす。1格子点に約50種類 の速度をもつ仮想粒子が存在し得ると仮定し、これらが衝突と移動を繰り返しながら格子上を動きま わる様子を平均化して非熱流体のマクロな挙動を得る。本手法は、3次の精度でナビエ・ストークス 方程式に一致することが証明されている<sup>2)</sup>。本プロジェクトでは、上記性能試験コードをベースにし て改良・実証を重ね、最終的に、格子点1000億点規模の高解像度な非熱流体シミュレーションに関 する時間発展計算の性能を確認するとともに、実用化に向けた機能の付加を行う。

なお、本開発の目的は、平和利用であり、法律などを犯す目的ではない。

## 2. 背景及び意義(「社会的・経済への波及効果の見通し」を含む。)

スーパーコンピュータの計算能力の飛躍的な向上にともない、ものづくりの方法が大きく変化しつ つある。例えば、航空機開発の場合、文献:"革新的な航空機開発のための次世代 CFD の研究"<sup>3</sup>に よれば、1980 年代に開発されたボーイング 767 は 77 個もの主翼モデルが風洞で試験されたのに対し、 最新のボーイング 787 では 5 個で済まされたという。コンピュータによる流体力学の数値シミュレー ション (CFD: Computational Fluid Dynamics) による最適化と解析が風洞の試験回数を大幅に減ら した。他方、ジェット旅客機は、高度約 1 万メートルをマッハ 0.8 前後で飛び、この巡航時の空力性 能が燃費や航続距離に直結するため、風洞実験と CFD には高い精度が要求されている。この値は、 空気抵抗係数で 0.0001 の精度であるが、現行の CFD では、まだこれを達成できない。数千 km を飛 ぶ旅客機には、0.0001 でも燃費にはね返る大きな値であり、これが経済性向上のほか、CO2 や NOX の放出低減につながるので、流体シミュレーションの高精度化は、"環境負荷を低減する重要な技術 開発"である。この状況は、自動車や大型船舶の開発でも同様である<sup>4,5</sup>。

航空機が遭遇する通常の流れ(10の7乗のオーダーの高レイノルズ数流れ)では、細かく不規則 な運動を含んだ乱流境界層を伴う。この微細な非定常運動までを全機規模の形状モデルで解像する ことは、現在の世界最高コンピュータでも困難である。このため、航空機の設計現場では、微細な流 れの不規則変動を平均して RANS(レイノルズ平均ナビエ・ストークス方程式)なり、LES(Large Eddy Simulation)で解く手法が一般的である。ところが、そこに用いる物理モデルが剥離等に伴う複 雑な乱流を記述するのに万能ではない部分を含むため定量的な信頼が得られない。従って、最小の微 細な渦まで解像できる時代がくれば、物理モデルへの依存性を"常に正確に成立する基礎方程式の部 分"のみに限定できるが、それが困難な現時点は、細かな格子でできるだけ微細な渦までを直接計算 して物理モデルの不正確な部分への依存性を極力少なくすることで精度改善を目指すべきである。

以上の認識のもとに、本プロジェクトでは、経済性向上とともに環境負荷を低減できる"ものづく りツール"として、超高解像度の流体シミュレーションコードを開発する。すなわち、本コードの開 発には、航空機、自動車、船舶輸送等の分野で、経済性の向上や環境負荷の低減に大きく貢献できる 製品設計を可能にするという波及効果を期待できる。さらに、本コードの計算法が、大規模並列計算 でも計算効率が落ちにくいセルオートマトンであるため、今後のスパコン並列度の益々の増加に対し ても、他の手法より高い効率を引き出しやすいと考えられる。

# 3. 得られた成果の概要(2013年度)

本性能試験コードでは、1格子点あたりの物理情報をコンパクトに表現することで、スーパーコン ピュータの各計算ノードに配置された限られた容量の主記憶に、多数の格子点情報を記憶することが できる。このことを利用すれば、同じ主記憶容量で比較した場合、「従来のナビエ・ストークス方程 式を実数演算で解く流体シミュレーションコードよりも、格段に多くの格子点を取扱うことで超高解 像度なシミュレーションを実現できる」という潜在的な可能性がある。

研究の結果として、ES2の64ノードの主記憶容量があれば、格子点1000億点規模の高解像度な 非熱流体解析の時間発展計算を進めることができることを確認した。また、実用化に向けて、入力デー タの作成や計算結果の表示に関する機能を付加することができた。

## 3.1 解析手法

性能試験コードが実現している計算手法は、3 速さ格子ガス法"面心超立方体(FCHC)モデル" である。1 格子点に、約 50 種類の速度(速さは、0,1,2の3種類)を持つ仮想粒子が存在し得ると 仮定し、これらが衝突と移動を繰り返しながら格子上を動きまわる様子を平均化して非熱流体のマク ロな挙動を得る。

## 3.1.1 格子点空間配置

格子点の空間配置を定めるため、空間中にある各格子点が"流体"か"固体"かを指定する。 格子ガス法"面心超立方体(FCHC)モデル"では4次元空間を使うので、3次元空間中の各格子

点位置において、図1のように、第4の次元R(半径で表現)を考える。



図 1. 格子ガス法 FCHC モデルにおける格子点配置の例

#### 3.1.2 4次元格子点間における仮想粒子の移動

時刻 T に格子点位置(X, Y, Z, R)に存在し速度( $\Delta$  X,  $\Delta$  Y,  $\Delta$  Z,  $\Delta$  R)をもつ仮想粒子は、下 記に従い、並進または逆進による位置の移動を行う。(注:R は、0, 1, 2, 3 の周期座標)

#### ① 仮想粒子の並進移動

行き先格子点位置(X + ⊿ X, Y+ ⊿ Y, Z+ ⊿ Z, R+ ⊿ R)が流体であれば、時刻 T+1 に行き先 格子点位置で同じ速度をもつ。

② 仮想粒子の逆進移動

行き先格子点位置(X +  $\Delta$  X, Y+  $\Delta$  Y, Z+  $\Delta$  Z, R+  $\Delta$  R)が固体であれば、時刻 T+1 に、同じ 格子点位置で各成分が反転した速度( $-\Delta$  X,  $-\Delta$  Y,  $-\Delta$  Z,  $-\Delta$  R)をもつ。

#### 3.1.3 格子点上における仮想粒子の衝突規則

仮想粒子は、次の衝突規則に従って、格子点上で衝突して向きを変える。

○保存則:衝突前後で、①粒子数と②成分ごとの運動量(4成分)と③エネルギが保存。

○排他律:同じ格子点位置では、同じ速度をもつ仮想粒子は、2個以上存在できない。

(ただし、エネルギ0の粒子は、6つの2次元平面上で別々に排他律を適用。)

#### 3.1.4 性能試験コードの計算フロー

性能試験コードの計算フローを図2に示す。



#### 3.2 解析結果

3.1.1 に記載した格子点空間配置を仮定し、時刻0で左側から流体を注入し、流体を右に流しはじめる。このとき、円柱後流に初期段階で生じる双子渦の流速変化を解析した。(cf. 図3右)

# 3.2.1 ストロング・スケーリング性能

性能試験コードを用いて、計算規模(格子点数と各格子点における物理情報の更新回数)を以下のように固定し、MPI 並列度が4ケース(1024, 512, 256, 128)の計算を行った。

① 格子点数: 3072(X) × 1024(Y) × 1024(Z) =約 32 億

② 更新回数:12288 時刻ステップまで計算。

このときのストロング・スケーリング性能は、図3左のとおりであり、約32億点規模でも良好な 並列性能を確認できた。



#### 3.2.2 性能試験コードによる 1000 億格子点規模の流体シミュレーション

面心超立方体(FCHC) 54 速度格子ガス法を用いることにより、主記憶容量の大きさとしては、 ES2 の 64 ノード(512CPU,主記憶合計約 8TB)でも、1000 億格子点規模の時間発展計算を進める ことができることを確認した。(注:計算時間内では円柱の位置まで流速変化が及んでいない。)

- ① 計算条件
  - ・解析事象:円柱に垂直に衝突する流体の過渡変化(図4)
  - ・格子点数:12288(X)×4096(Y)×2048(Z) ≒ 1030 億
     ・並列計算:MPIによる2次元領域分割
    - (rank 数 512 = y 方向 32 × z 方向 16)
  - ・各ノードが必要とした記憶容量の概算:
    6GB/ 配列×2 配列 /rank × 1rank/CPU × 8CPU/node
    = 96GB/node < 128GB/node (ES2)</li>
- ② 性能測定
  - ・計算時間:時刻ステップ数 384 回目で 28765 秒≒ 8 時間
  - ・性能:ベクトル長:255.927,ベクトル化率:98.514%

#### 3.3 汎用化とチューニング

性能試験コードに対して、下記のとおり、汎用化とチューニン グを行った。





## 図 4. 1000 億点規模格子による流 体計算の初期部分

#### 3.3.1 汎用化概要

性能評価コードは解析データ(形状、境界条件など)がハードコーディングされた研究用コード であるため、地球シミュレータ上で一般利用可能なコードとするための第一段階として下記の作業を 行った。なお、入力データを容易に作成できるようにするための簡易 GUI の作成も行った。

- ① 対象ソルバー
  - FCHC 54 速度モデル性能評価コード
- ② 入力データの汎用化

・境界条件、モデル形状(STL, プリミティブパラメータ)を外部ファイルから入力可能とした。 ③ 汎用化機能の追加

- · 直方体、円柱、球プリミティブ及びファンモデル導入した。
- ・任意面に境界条件を設定することを可能とした。
- ・境界条件として、密度指定、速度指定、速度勾配0及び周期境界、固体壁(スリップ、ノンスリップ)を指定可能とした。
- ④ ビット演算部ソースコードジェネレータ作成
  - ・速度モデルの変更とベクトル化のチューニングが容易になった。
- ⑤ 重力考慮機能の追加

# 3.3.2 汎用化コード構成

汎用化コードは、Windows PC上で動作する簡易 GUI (図 5 ①)、簡易 GUI から直接実行できるソ ルバー(②、データ確認用)と、ES2上で動作するソルバー(③)及び後処理用データ変換ツール(④) から構成される。

なお、計算結果の表示はオープンソースである ParaView(⑤)を利用することができる。 なお、簡易 GUI 画面例を図 6 に示す。





図 6. 簡易 GUI 画面例

3.3.3 チューニング

汎用化コードでは、入力データにより境界条件や荷重条件による分岐が発生するため、性能試験コー ドに比較して性能が低下する。この性能低下を最小限とするためのチューニングを行った。

チューニングの効果について、3.2.1のケース3(256cpu)を用いて検証を行い、表1を得た。

	コード	計算時間 (秒)	計算時間増加*1)	備考
1	性能試験コード	14376	_	
2	汎用化コード (改善前)	23862	66%	
3	汎用化コード(改善1)*2)	20824	45%	改善前に比べて 21% 改善
4	汎用化コード (改善2) *3)	19563	36%	改善前に比べて 30% 改善

表1. チューニングの効果 (その1)

[注] \*1) 性能試験コードとの性能比較

- \*2) 2 に対して ES2 向けチューニングを行ったもの
- \*3) 2 に対してソースコードを再構成したもの(ビット演算部はソースコードを自動生成させた。また、その際に内側ループの自動展開なども行った。)

また、汎用化コードには粒子密度指定境界(疑似乱数を利用する境界条件)が追加されたが、この 機能を用いた場合の検証も行った。その結果を表2に示す。

表2. チューニングの効果 (その2)

	コード	計算時間 (秒)	計算時間増加	備考
2	汎用化コード (改善前)	38237	_	
3	汎用化コード (改善1)	23510	-39%	改善前に比べて 39% 改善

[注] ただし、汎用化コード(改善2)については、次年度で行う予定。 今後は、汎用化コードの改善1と改善2を同時に適用したものを用いて検証を行っていきたい。

#### 3.3.4 汎用化コードによる計算例

3.2.1 における解析ケースをベースとして下記のような条件で計算を行った。また、利用した汎用化 コードは、3.3.3 における汎用化コード(改善2)である。

○入口境界:粒子密度 50%、 ○出口境界:流出境界、 ○その他境界:スリップ、

○初期密度:25%、

○疎視化後メッシュ分割数:(64, 28, 12)、○3次元格子:(512, 224, 96)=約1100万

○出力ステップ:20、 ○コア数:32CPU (4ノード)、

○計算時間:4275 秒、 ○ベクトル長:253、 ○ベクトル化率:97.113%

ParaView で作成した計算結果図を出力ステップの順(左から右、上から下)に図7に示す。



図7. ParaView で作成した計算結果図の例

# 4. まとめと今後の方針

多速さ格子ガス法による大規模格子点計算の優位性についてはほぼ確認できたので、今後は、粘性 制御機能を組み込んで計算可能なレイノルズ数の範囲を広げ、実用的な流体シミュレーションコード へ近づくための開発を進めたい。

また、赤青モデルの組込みとチューニングを行い、この機能を用いて混相流解析を試みる。さらに、 汎用化コードで大規模解析を実行してパフォーマンスを確認する。

#### 謝辞

地球シミュレータの利用とコードの性能改善に当たり、独立行政法人海洋研究開発機構 地球情報基 盤センター 情報システム部 HPC 応用グループ様にはご指導、ご助言、ご協力をいただきました。こ こに感謝の意を表します。

#### 参考文献

- 1) 松岡ほか,新粘性制御法による超並列ビット演算流体シミュレーション手法の開発,H24年度地 球シミュレータ利用報告会,2013.
- 2) Teixeira, Continuum Limit of Lattice Gas Fluid Dynamics, MIT, 1992.
- ・中橋,佐々木,革新的な航空機開発のための次世代 CFD の研究, SENAC Vol.45, No.1, pp.3-10,
   2012.1.
- 4) 坪倉,京で目指す自動車の次世代空力シミュレーション,京速コンピュータ「京」を知る集い in 福岡, 2011.
- 5) 藤井ら, CO2 排出量大幅削減船の開発, 三井造船技報 No.203, 2011-7.