様　式　C－１９、F－１９－１、Z－１９　(共通)

科研費
KAKENHI

科学研究費助成事業　　研究成果報告書

平成 ２９ 年 １０ 月　 ２ 日現在

機関番号：１１３０１
研究種目：挑戦的萌芽研究
研究期間：2015～2016
課題番号：１５Ｋ１３４２０

研究課題名（和文）エクサスケールコンピュータへむけた高速高次精度・非構造流体解析ソルバーの技術確立

研究課題名（英文）Establishment of Technique for Fast High-order-accurate Unstructured-mesh Fluid Solver on Exa-scale Computer

研究代表者
野々村　拓（Nonomura, Taku）

東北大学・工学研究科・准教授

研究者番号：６０５４７９６７

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費）　　3,100,000円

研究成果の概要（和文）：本研究では，高速高次精度・非構造流体ソルバーのための技術確立に向けた研究を行った．圧縮性流体解析向けの流束再構築法を対象とし，以下の3つの技術確立を行った．1)移動変形格子上での保存則および一様流保持を満たす適切な保存メトリクスの評価方法を提案し実証した．2)運動エネルギの保存を近似的に満たす分割型の定式化を証明し，16次精度の超高次精度解析で計算が安定化することを実証した．3)キャッシュ・レジスタチューニングを行い，メモリアクセスを高速化することで，チューニング前から比較して2倍の速度を実現した．これらにより，高速高効率に解析できる非構造格子高次精度解析手法の基礎技術が開発できた

研究成果の概要（英文）：The study for the establishment of techniques on the fast high-order-accurate unstructured-mesh-based fluid solver is conducted. The following three techniques are established for the flux reconstruction scheme code of the compressible fluid analysis. 1) The consistent conservative metrics which maintain conservation law and preservation of freestream on moving and deforming grid is proposed and its performance is demonstrated. 2) The splitting form formulation for the kinetic energy conservation is proved and very high 16th order analysis is demonstrated to be stabilized. 3) Cache and register tuning is conducted and the memory access is quickened and twice faster computation speed is realized. Based on the items above, the basic techniques for the fast high-order-accurate unstructured-mesh-based fluid solver are developed.

研究分野：流体力学，実験流体力学，数値流体力学，空力音響

キーワード：非構造格子高次精度解析手法　圧縮性流体　乱流　シミュレーション

１．研究開始当初の背景

10 ペタフロップスの「京」コンピュータ，１エクサフロップスの次々世代スーパーコンピュータなど計算機性能は向上を続ける一方，流体解析はメモリ転送に対して演算量が少ないアプリケーションの一つであり，これらの計算機の最も苦手とする分野である．本研究では流体解析の中でも圧縮性流体解析に対象を絞った．

我々が着目した流束再構築法（図 1）は 1 セルに多自由度(10 次精度のとき 1000 自由度)を持ち，任意の精度の高次精度化が容易である．特に 1)非構造格子ベースであるため，アスペクト比を有した格子を用意することで壁乱流の解像が効率的に行えること，2)セル間の通信はセル境界流束を求めるための 1 自由度分のみであり，高次精度でもメモリ転送が小さく並列化効率が高いことから、直交格子ソルバーに代わる方法論として期待される．加えて実効演算性能の観点からも 1 セル内多数の自由度を全てキャッシュに乗せることで近年の計算機の苦手とするメモリ転送を極限まで減らした高速解析を実現する可能性がある．非構造格子ベースであるため格子の完全自動生成ができないことが欠点ではあるが，1 セルに 1000-8000 自由度を持つことから，汎用格子ソフトウエアで作成出来る規模の格子（1000 万格子）でも 10 億－100 億自由度の解析が可能であり，直交格子解析に比して物体の形状を忠実に再現した高精度解析が期待される．

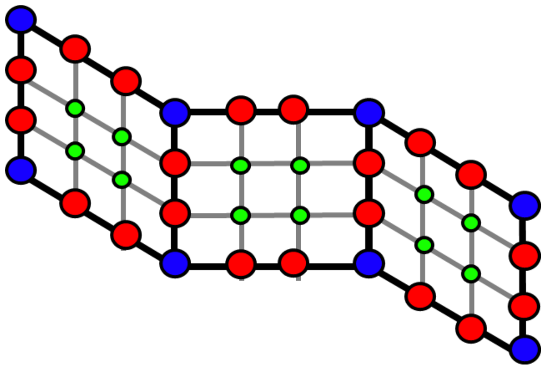


図 1：流束再構築法の自由度のイメージ図，緑色：解の定義点，赤色：境界流束の定義点，青色：幾何形状の定義点

２．研究の目的

本研究では流束再構築法における以下の根幹的な問題点を解決することを目的とした．1)粗い非構造格子の中に多自由度を入れるため，物体形状を表すためにセルの幾何学表現を曲線で扱う必要があるが，この場合に圧縮性乱流において重要な保存量保存・一様流保持性を両立する手法が確立できていない，2)現在のコンピュータのキャッシュサイズと計算負荷から 1000－8000 自由度，10-20 次精度程度の解析で初めて上記の高解像度，高速ソルバーが実現するが，このような非常に高い精度では数値安定性が確保できていない．そこで，以下の項目を研究した：

1) 完全な保存量保存・一様流保持を曲線座標で両立する手法の開発・再整理,

2) 運動エネルギ保存による高解像度かつ高安定な数値解析の実現

上記に付け加えて，1 セルに多自由度を持つ利点を最大限に生かし，

3) キャッシュ・レジスタチューニングを中心に，エクサスケールコンピュータで問題となるメモリ転送を最小限にした実装方法

を明らかにし，高速流体解析ソルバーのための技術確立につなげる．

３．研究の方法

本研究では，主に数値解析のためのアルゴリズム開発及び数値解析コードのチューニングを行った．解析コードは流体の方程式である圧縮性 Navier-Stokes 方程式を流束再構築法で離散化したコードである．アルゴリズムの開発には，ディスカッションを通じての新規アルゴリズムの構築作業，数学ソフトウエアによる検証，実際にテスト問題を通じての実証という流れで研究を進めた．実証の際のテスト問題解析には主に数値解析用ワークステーションおよび JAXA のスーパーコンピュータを利用した．また，チューニングに関しては，議論を通じてこれまでの経験を活かしたコードの最適化方針を決め，改変と検証を繰り返すことでこれを実施した．

４．研究成果

まずアルゴリズム開発について述べる．研究開始当初，移動変形格子でも一様流保持問題を解決する方法の構築を途中まで進めており，この解決方法の構築の完成を図った．一様流は流体方程式の自明な特解の一つであり，数値解析ではこれが満たされるよう様々なテクニックが用いられてきた．我々のグループでも以前に，静止格子における流束再構築法の一様流保持法を提案しており，それを移動・変形格子に拡張する研究を行った．静止 6 面体格子に適応した流束再構築法に於いてこの特性をもつアルゴリズムは我々の提案したものが唯一であり，世界的に他のグループからも利用されているようであることを付け加えておく．

このアルゴリズムでは，メトリクス，ヤコビアンという座標変換時に用いる変換係数を事前に用意するが，これらの量を求める際に工夫を加える．一般的な差分法で一様流保持を満たす方法の一つである保存型のメトリクス，ヤコビアンを利用し，かつその数値

的な評価時に打切り誤差の次数を適切に保ちながら評価する「適切な保存型メトリックス」「適切な保存型ヤコビアン」を利用することで，様々な精度の解析に於いて誤差を著しく低減し，移動変形格子において一様流保持ができることを示した．この成果は学術論文発表を行っている．

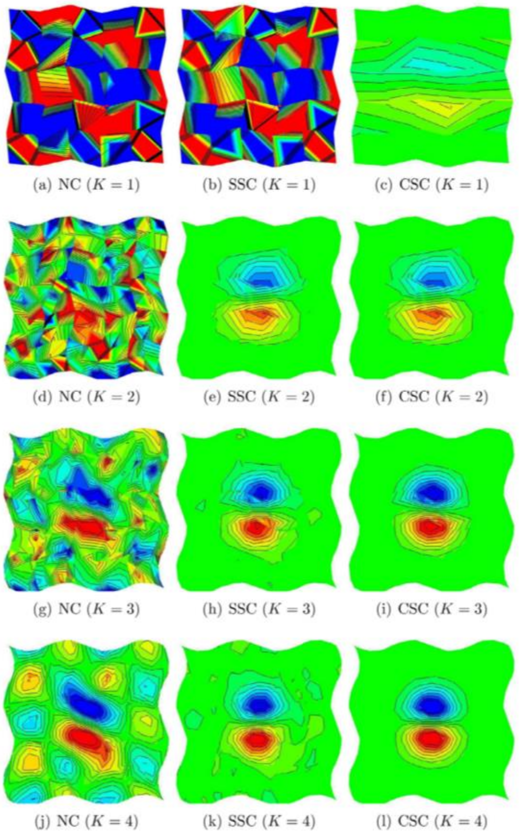


図 2：波状格子上での渦移流問題の結果，左の列：従来型メトリクス，真ん中の列：打ち切り誤差を意識しない保存型メトリクス，右の列，提案する打切り誤差を意識した適切な保存型メトリクス．1 行目 : 1 次精度，2 行目 : 2 次精度，3 行目：3 次精度，4 行目：4 次精度．

次に本研究の核心部分である，運動エネルギの保存に関しての研究を行った．運動エネルギの保存に関しては差分法において Morinishi らの研究により，示されており，これを流束再構築法に拡張することを検討した．圧縮性流体解析においては運動エネルギを保存し安定化するための差分の型として，「分割型」が差分法において提案されてきた．本研究では，まず分割型を含む様々な対流項の型について整理し，その上で，過去の研究で提案された Fe 法，KG 法を流束再構築法に拡張した．流束再構築法では，セル内の流束分布から仮の微分値を求め，セル境界での流束の値でこれを修正することで流体の状態量（自由度）を時間発展させる．この手順の中で，セル内の流束分布の微分値を求める際に，差分の型である各種の「分割型」を試行した．「分割型」は，運動エネルギの保存を近似的に（差分法では厳密にする方法も提案されている）満足することにより，数値的な安定性の向上が期待される一方，本質的には非保存型となるため，従来型の解析コード（少なくとも我々のグループのコード）では自明に得られていた保存量の保存特性を失う可能性がある．そこで，「保存量の保存特性」および「運動エネルギの保存特性」の 2 点に関して（近似的に）保存するための条件をそれぞれ数式で示し，実際に前者に関しては厳密に保存できるかどうか，後者に関しては安定な数値解析ができるかどうかの観点で調べた．

まず「保存量の保存特性」に関しては，2 次の分割（Fe 型は 2 次，KG 型は特殊な形を除き 3 次）による「分割型」を用いた上で，セル境界に流体量の自由度が置かれているかどうか，が重要であり自由度の置き方の一つである Gauss-Lobatto 法を用いて解析コードを実装することでこれが可能であることを示した．「保存量の保存特性」を渦移流問題で示した結果を表 1 にまとめる．提案する 2 次の分割型である Fe 分割型は Gauss-Lobatto 点を利用することで保存量の保存ができている．

表 1：保存量の保存誤差（相対量），すべて Gauss-Lobatto 点を利用．

	密度保存	エネルギ保存
従来型保存型	5.027E-13	9.213E-13
分割型（Fe）	4.962E-13	9.319E-13
分割型（KG）	4.971E-13	9.210E-13

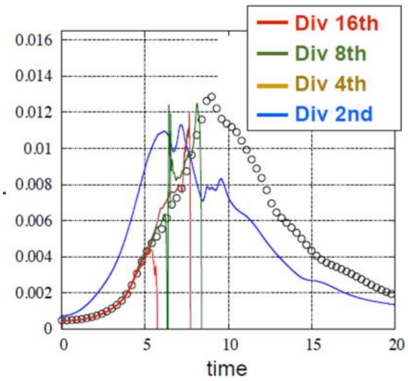
次に，「運動エネルギの保存」に関しては計算コードには陽には現れない「運動エネルギ」の発展方程式を「密度」および「運動量」の時間発展方程式から導きその条件を調べた．その結果，Gauss-Lobatto 法を用いた上で流束の修正時に用いる修正関数がある特性を持つことが運動エネルギの近似的な保存のための十分条件であることを明らかにした．この条件を満たす修正関数がこれまでに提案されてきた g2 修正関数が持つことを明らかにし，g2 修正関数を利用して数値解析を行うことで運動エネルギを近似的に保存でき，数値解析が安定になることが示唆された．

これらの条件により実際に数値解析が安定化するか，ベンチマーク問題である Taylor-Green-Vortex 問題を解くことで検証した．数値解析の精度はこれまでに実現されていない最大 16 次精度まで試みた．16 次精度は非常に高い精度であるが，前述のように今後のスーパーコンピュータの特性を考えるとメモリ・キャッシュが効率的に利用できる規模の自由度であると考えている．さらに従来手法と比較すると圧倒的に少ない誤差が期待できる．

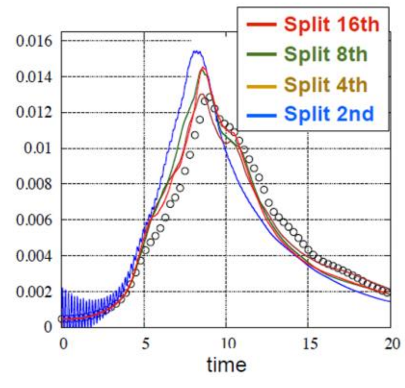
結果を図 3 に示す．従来法では，数値粘性

を加えているにも関わらず途中で数値解析が破綻した．一方，提案した分割型では 16 次精度においても安定に数値解析ができることが示された．興味深いのは，提案した分割型の数値解析において数値粘性の有無を調べた結果である．数値粘性を極限まで減らしても数値解析は安定に実施できることを示したが，一方で数値粘性がある程度あったほうが，厳密解との良い一致が得られた．これは、本解析の格子解像度では乱流の最小スケールの渦を解像するには不十分で，数値粘性が LES におけるサブグリッドスケールの役割を担ったため，数値粘性があったほうがより良い結果となったと予想している．この点に関しては今後さらに議論を深め，適切な乱流解析のためにどのような数値解析をすべきかを明らかにしていく必要があると考える．この結果は学会発表とともに国際的なワークショップで発表し，同様の問題を解いてきた他のグループに対して同じ自由度で圧倒的に低い誤差を実現して，注目を浴びたことを付け加えておく．

さらに本手法を渦移流問題に適用し，同じく 16 次精度でも問題なく数値解析ができていることを確認した．さらにより実用的な乱流境界層問題などへの適用も行った．この結果は学会発表済みである．さらにここまでの結果をまとめて現在国際誌に論文投稿中である．



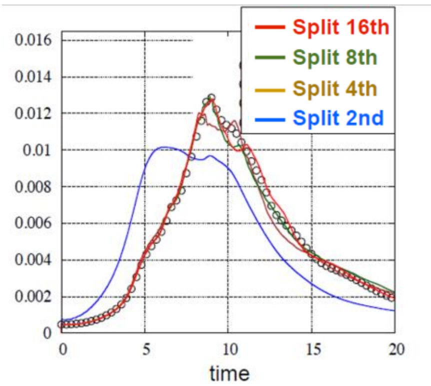
(a) 従来手法(保存型)



(b)提案手法(分割型)数値粘性なし

図 3： Taylor-Green-Vortex 問題の結果

(〇：参照解)



(c)提案手法(分割型)数値粘性有

図 3 続き

コードのチューニングに関しては，キャッシュチューニングを中心に行い，メモリの転送量を減らすことで，従来の実装から比べて約 2 倍程度，現状のスーパーコンピュータにおいて実行効率で 10%程度を実現できるようになった．この成果は今後発表予定である。

最後に今後の研究の方向性を示したい．現状のテスト問題は比較的数値解析が実施しやすい簡単な形状を選んで実施してきた．そのため今後はより実際の解析現場で用いられる形状でのクオリティの低い計算格子でも上述の特性が維持でき安定な数値解析ができるかを確認していく必要があると考える．また乱流境界層の解析などである程度アスペクト比を取らないといけない場合において，内部に 1000 自由度を持たせても幾何的な関係性が崩れない曲線ベースの計算格子の取り扱いも今後の課題の一つであると考える．

以上のように，計算格子に関する課題は残るものの，複雑形状でも高速・高効率に解析できる非構造格子高次精度解析手法の基礎技術が開発できたと考える．

５．主な発表論文等

（研究代表者は下線）

〔雑誌論文〕（計 1 件）

1. Yoshiaki Abe, Takanori Haga, Taku Nonomura and Kozo Fujii, “Conservative high-order flux-reconstruction schemes on moving and deforming grids” Computers and Fluids, Vol. 139 (2016) pp. 2-16. doi:10.1016/j.compfluid.2016.03.024

〔学会発表〕（計 7 件）

1. 渡邊誉良，阿部圭晃，芳賀臣紀，野々村拓，宮路幸二，“高次精度流束再構築法における移流項分割型の優位性,” 日本航空学会北部支部 2017 年講演会ならびに第 18 回再使用型宇宙推進系シンポジウム，2017 年 3 月 16 日―17 日，東北大学，仙台市．
2. 阿部圭晃，森中一誠，芳賀臣紀，野々村拓，宮路幸二，”混合型移流項に基づく超

高次精度流束再構築法の安定化とその検証計算,” 第 29 回計算力学講演会, 2016 年 9 月 22 日-24 日, 名古屋大学, 名古屋市.
3. Yoshiaki Abe, Takanori Haga, Taku Nonomura and Kozo Fujii, “Fully-cconservative high-order FR scheme on moving and deforming grids”, 22nd AIAA Computational Fluid Dynamics Conference. June, 22nd-26th, 2015, Hilton Anatole, Dallas, Texas, USA.
4. Yohisaki Abe, Issei Morinaka, Takanori Haga, Taku Nonomura, and Koji Miyaji, “High-order flux reconstruction schemes in split forms,” 4th International Workshop on High-Order CFD Methods, June 4th-5th, 2016, Foundation for Research and Technology Hellas, Heraklion, Greece.
5. Yohisaki Abe, Issei Morinaka, Takanori Haga, Taku Nonomura, and Koji Miyaji, “Conservation properties of high-order flux reconstruction schemes in split forms,” ECCOMAS2016, 2016. June 5th-10th, 2016, Creta Maris Conference Centre, Heraklion, Greece.
6. 森中一誠, 阿部圭晃, 芳賀臣紀, 野々村拓, 宮路幸二, ”移流項に擬混合型を用いた高次精度流束再構築法における保存量保存性,” 第 29 回数値流体力学シンポジウム, 2015 年 12 月 15 日-17 日, 九州大学, 福岡市.
7. 森中一誠, 阿部圭晃, 芳賀臣紀, 野々村拓, 宮路幸二, ”高次精度流束再構築法における自乗量保存スキームの安定性,” 第 28 回計算力学講演会, 2015 年 10 月 10 日-12 日, 横浜国立大学, 横浜市.

６. 研究組織

(1)研究代表者

野々村　拓（Taku Nonomura）
国立大学法人東北大学大学院工学研究科航空宇宙工学専攻・准教授
　研究者番号： 60547967

(2)研究分担者

芳賀　臣紀（Takanori Haga）
国立研究開発法人宇宙航空研究開発機構研究開発本部・研究開発員
　研究者番号：30646930

阿部　圭晃（Yoshiaki Abe）
東京工業大学工学院・東京工業大学特別研究員
　研究者番号：40785010