

令和元年6月20日現在

機関番号：82645

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2017～2018

課題番号：17K18427

研究課題名(和文) 高次精度非構造格子法による超並列・圧縮性LESの技術確立

研究課題名(英文) Establishment of basic technology for massively parallel and compressible LES by higher order unstructured grid method

研究代表者

芳賀 臣紀 (Haga, Takanori)

国立研究開発法人宇宙航空研究開発機構・研究開発部門・研究開発員

研究者番号：30646930

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,200,000円

研究成果の概要(和文)：本研究は、航空宇宙工学分野で重要な圧縮性乱流の数値シミュレーションを高精度化し、実用設計における活用を目指すものである。これを実現するために複雑形状への適合性が高くかつ乱流の解像度に優れた高次精度非構造格子法を用いた高速・超並列ソルバーを開発した。本手法を実用化するには以下の要求を満たすことが不可欠であり、従来課題を克服する基本技術を提案した。1) 安定かつ高精度を両立する物理モデル及び数値スキームの確立、2) 複雑形状への適合、3) 計算時間の短縮。圧縮性乱流のベンチマーク問題や複数超音速ジェットの空力音響問題に本手法を適用し、その優れた性能を確認した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

高次精度・非構造格子法の研究は特に海外で数多く行われているが、従来法と比べて安定性が低く、計算コストが高いという欠点が指摘されてきた。本研究で提案した基本技術は新規性が高く、不連続有限要素法に分類される他の手法にも適用可能である。今後より複雑な形状への適用が求められるが、圧縮性乱流の実用的な問題に対して従来手法と比べ少ない計算コストで大幅な解像度の向上が得られることを示した。メニーコア化が進む次世代の計算機環境でも高い性能が期待でき、高速な実用ソルバーとしての活用が期待される。

研究成果の概要(英文)：This research aims to improve numerical simulation of compressible turbulence important in the aerospace engineering field and to use it in practical design. In order to realize this, we have developed a high-speed, massively parallel solver using a high-order unstructured grid method, which has high adaptability to complex shapes and excellent resolution of turbulent flow. In order to meet the following requirements that are essential for the practical application of this method, we proposed basic technologies that overcome the conventional problems. 1) Establishment of physical model and numerical scheme compatible with stability and high accuracy, 2) Adaptation to complex shape, 3) Reduction of computational time. We applied this method to the benchmark problems of compressible turbulent flow and the aeroacoustic problems of multiple supersonic jets, and confirmed its superior performance.

研究分野：数値流体力学

キーワード：数値流体力学 先進アルゴリズム LES 有限要素法 並列計算 流体工学

様式 C - 19, F - 19 - 1, Z - 19, CK - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

工学分野の乱流数値シミュレーションではレイノルズ平均ナビエ・ストークス (RANS) 方程式が主に使われているが、境界層の剥離や再付着、遷移など伴う流れの予測精度に優れたラージエディシミュレーション (LES) の利用が求められている。LES を工学設計に活用するためには計算コストの低減が不可欠であり、次の二つの課題を克服する必要がある。一つは、複雑形状を扱う実用計算に用いられる非構造格子法の精度が2次精度と低く、マルチスケールの渦や音波を十分に解像することが難しいこと。もう一つは、開発中の「ポスト京」、次世代のエクサスケールスパコンと計算機性能が飛躍的に向上していく中で、流体計算はメモリ転送に対して演算量が少なく、近年の計算機が苦手とする分野となっていることである。現在、格子を完全自動生成できる直交格子法が使われ始めているが、1) 物体形状は階段状のデータを基に再構築されるので曲面の忠実性が低い、2) 直交等間隔格子であるため、格子サイズを最も厳しい壁面垂直方向の解像度に合わせると莫大な格子点数が必要、という欠点がある。

本研究は Discontinuous Galerkin (DG) 法に代表される、高次精度の非構造格子法に着目する。類似手法として Spectral Difference (SD) 法や Flux Reconstruction (FR) 法が提案されているが、いずれも定式上は重み付き残差法と見なせることから Discontinuous Finite Element Methods (DFEM) と呼ばれることもある。これらの手法は1) 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自由度分だけであり、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、上記の直交格子ソルバーに代わる方法論として期待できる。加えて実効演算性能の観点からも1セル内の多自由度を全てキャッシュに乗せることでメモリアクセスを減らすことができ、近年の計算機に適した手法といえる。境界適合格子を用い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セルに多自由度を持つことから、数億自由度の解析でも必要な格子は数百万セル程度であり、直交格子法と比べて物体形状を忠実に再現した解析が可能である(図1)。本研究では DFEM の中でも定式化の一般性が高く、アルゴリズムも簡潔な FR 法を採用し、圧縮性 LES の実用化に必要な基本技術の確立を目指す。

2. 研究の目的

圧縮性 LES を工学設計ツールとして効率的に利用するため、複雑形状問題において高解像度を達成できる FR 法に着目し、実用解析で必要となる以下の基本技術を確立する。1) 高解像度かつロバストなスキームの構築。2) 複雑形状に対する高次要素物体適合格子への拡張。さらに1セル内に多自由度を持つ利点を活かし、3) メモリ転送を最小限にした高速・超並列ソルバーを開発する。

FR 法を含む DFEM はセル内の内部自由度を用いて高次の多項式補間を行うことで先述の利点がある半面、従来手法にはない欠点も存在する。即ち、1) 衝撃波のような不連続がセル内に存在する場合、多項式による近似が難しいこと、2) 少ないセル数で物体形状を表現するためにセルの幾何学表現を曲線で扱う(高次要素の利用)必要があることである。これらに加え、流体計算に共通の問題として対流項に起因する非線形不安定が特に高レイノルズ数流れへの適用を妨げている。本研究ではこれらの根本課題を解決することで安定かつ高精度な実用解析手法を構築する。

3. 研究の方法

以下の計画で研究を進める。

(1) 安定かつ高精度を両立する物理モデル・数値スキームの構築

衝撃波捕獲法

衝撃波のような不連続を安定に捉え、乱流の渦は減衰させない手法として局所人工粘性(LAD)法を用いる。非構造格子への拡張にあたり高階微分および平滑化フィルタの適切な離散化手法を明らかにする。

自乗量保存スキーム

非線形移流項に起因する数値不安定の抑制に有効な分割型移流項を採用した FR 法を境界適合格子と組み合わせた非構造格子へ拡張する。

(2) 複雑形状および高レイノルズ数流れへの対応

High-Order(HO)メッシュへの対応

実用の複雑形状への適用においては格子生成や可視化を含むプリポストツールとの連携が不可欠である。内部自由度を有

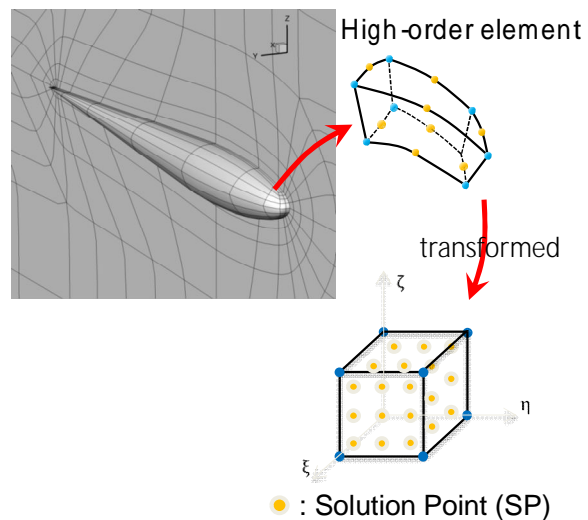


図1 High-order mesh around a streamlined body. Transformation of a computational cell is also shown.

する DFEM では従来手法に比べ少ないセル数で高精度な解析が可能であるが、特に曲面の形状再現性を維持するため高次要素に対応した H0 メッシュが必要となる。非構造六面体格子については、表面格子の NURBS 補間により境界適合の高次要素を作成可能な商用ソフト QuickMesh が利用できる。プリズムやピラミッドなどを含むハイブリッド格子については汎用格子生成ソフト (Pointwise 等) に導入予定がある。格子生成ソフトの開発状況によっては、ハイブリッド格子の H0 メッシュが生成できない可能性もあり、既存ツールで複雑形状の解析が可能なオーバーセット格子を利用する。

LES 壁面モデルの導入

実用解析では高レイノルズ数壁面乱流のモデル化が不可避であり、従来は RANS や RANS/LES ハイブリッド手法が利用されている。しかし RANS で用いられる壁面近くの偏平なレイヤー格子は、H0 メッシュ化の際に内側に移動する格子点によってセル形状が破綻してしまう問題が知られている。本研究ではこの問題を回避するため、RANS 用のレイヤー格子を利用せず LES 用の格子でより高精度な乱流境界層の計算が可能な壁面応力モデルを導入する。

(3) メモリアクセスチューニング

上記と並行して計算コードのチューニングを行い、超並列・圧縮性 LES ソルバーを開発する。研究開始時点において、MPI によるプロセス並列化、OpenMP によるスレッド並列化、さらに FX100 上における SIMD 化およびソフトウェアパイプライン化など基本的なチューニングは実施済みであり、ノード内性能で理論ピーク比の約 5% を達成している。本研究ではセル内のローカルデータを最大限に活用するメモリ・キャッシュチューニングを実施する。

4. 研究成果

(1) 圧縮性 LES のための安定かつ高精度なスキームの開発

衝撃波捕獲法

LAD 法では、流れ場の特徴量 ($\nabla \cdot u$ など) の高階微分を計算することで不連続を検出し局所的に人工粘性を導入する。既往研究では非構造格子上で高階微分を用いた場合の数値不安定が指摘されていたが、微分の連鎖率に従い適切な離散化を行うことで安定性を向上することができた。さらに人工粘性のプロファイルを決定する平滑化フィルタについて、非構造格子に適したセル内多項式フィルタを提案した。これにより空力音響計算に適した手法を構築でき、超音速ジェットスクリーチの予測に適用した。高次精度の非構造格子法でこのような乱流と衝撃波が干渉する複雑な流れを解析した例は非常に少なく、提案手法の優れた性能を示し、国際学術誌に掲載された []。

自乗量保存スキーム

先行研究で提案した、分割型移流項により運動エネルギー保存を満たす FR 法については、保存の条件を明らかにし、空間 16 次精度という非常に高い精度でも安定に乱流のベンチマーク解析である Taylor-Green vortex の LES が可能となることを示し論文に掲載された []。これまでの研究では直交格子への適用に留まっていたが、複雑形状を有する実用解析に適用するため境界適合格子における有効性を調査した。超音速ジェットスクリーチ、複数超音速ジェットとロケット発射支持台干渉、および航空機高揚力装置翼型の空力音響解析等に適用したところ、従来の保存型移流項では特に格子解像度が低い場合に計算が破綻することがあったが、本手法では不安定化が起こらず長秒時の解析が可能であることを確認した。近年、高レイノルズ数の LES における数値不安定を解消するために乱流サブグリッドスケール (SGS) 成分のモデル化が報告されているが、本手法では陽的な SGS モデルを用いずにセル境界の風上数値流束による数値粘性を利用した陰的 LES でも安定かつ高精度な解析が可能であることを示している。さらに

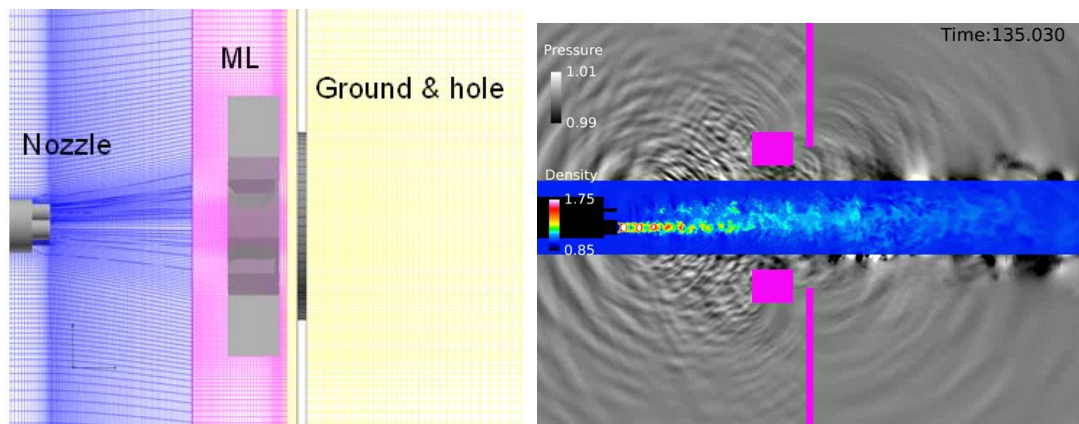


図 2 Overset grids (left) and result (right). The grids are created by dividing the domain into three parts of 1) rocket nozzle, 2) launch pad, and 3) circular hole flat plate, and these are overlapped at the desired lift position. 274.4M DoFs using p3 FR-LAD.

風上流束を用いず完全に数値粘性を排したスキームも構築可能であり、より高度な SGS モデルと組み合わせたアプローチへの展開も期待できる。

(2) 複雑形状および高レイノルズ数流れへの対応 オーバーセット格子への拡張

H0 メッシュの生成ツールについては大学やソフトベンダーで開発が進められており、研究計画時点ではツールの利用を前提に複数セル種が混在する非構造ハイブリッド格子の利用を想定していた。しかし、当初の想定よりも各種生成ツールの開発が遅く研究期間中に実用レベルで使用可能なソフトがなかったため、既存ツールを利用して複雑形状の解析が行えるよう FR 法をオーバーセット格子に拡張した。物体周りに非構造プリズムレイヤー格子を作成し、周囲の計算領域は六面体または四面体格子を別途作成し、複数格子を重合（オーバーセット）させる。高次要素が必要となるのは物体周りのプリズム格子だけであり、線形格子から H0 格子への変換に既存の格子変換ツール QuickMesh を利用した。

FR 法はセル界面のみで隣接セルのデータを参照するため、格子の重合境界における面データのみ通信が必要となり、実装が容易で並列化に適している。重合境界では保存性を厳密には満たさないが、高次精度補間により不整合の誤差は小さく、また衝撃波のような不連続があるケースでも局所人工粘性 (LAD) を用いることで安定かつ高精度に計算可能であることを確認した。本手法をロケット打ち上げ時の排気プルームと発射台の干渉解析に適用し、機体周囲の音響レベルと期待リフト量の関係の予測に活用した (図 2)。

壁面応力モデルの導入

実機スケールの高レイノルズ数流れに対応するため、乱流境界層を高精度に予測可能な壁面応力モデルを採用した。本モデルでは境界層外層を LES 格子で計算し、外層内に配置したサンプリング点の状態量から、内層の分布を平衡近似により求める。当初 FR 法への実装にあたって数値的不安定が発生したが離散化レベルの解析により原因を特定した。境界条件を適切に与えることでセル内の高次精度補間の誤差の発生を抑え、さらに壁面垂直方向にのみローパスフィルタを掛けることで誤差の増幅を抑えることに成功した。検証例として平板の乱流境界層計算に適用し、高次精度コンパクトスキームと同等の結果が得られることを確認した。

実用的なケースとして国内ワークショップ Aerodynamics Prediction Challenge (APC) の課題である航空機高揚力装置翼型の空力音響解析に適用した (図 3, 4)。近傍場圧力の PSD を実験と比較し良好な結果を得ている。本ケースは亜音速流れであるため LAD 法を用いていないが、非常に粗い格子を用いても高レイノルズ数流れの安定な計算が可能となっており提案手法の優れたロバスト性を示している。

(3) 高速化チューニング、大規模並列

セル内自由度を利用する、多項式補間や差分計算などのいわゆるステンシル計算は係数行列と総内部自由度をセル毎に並べた行列の積として計算でき、最適化された BLAS の DGEMM 関数が利用できる。実際大規模 GPU スパコンで高性能を達成しているオープンソースコード PyFR などで採用されている。本研究で開発したコードでも DGEMM を利用することでピーク性能の 50-60% を達成することを確認したが、六面体セルの場合は特に高次のスキームで係数行列の非ゼロ要素が少ない疎な行列となっており、多重ループを書き下して無駄な演算を排除した方が経過時

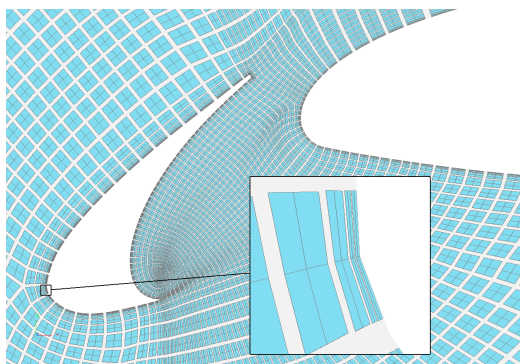


図 3 High-order (P2) mesh. Total cell number is 291,375. Each cell is displayed in shrink. Although the edge appears to be bent due to simplified visualization, in the solver, each edge is calculated as a quadratic curve to evaluate metrics.

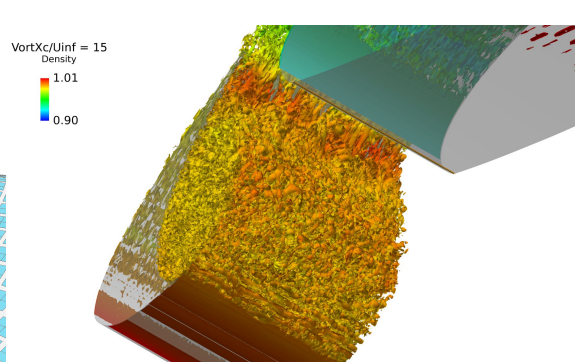


図 4 Isosurface of vorticity in the chord direction in the instantaneous field. (colored by density) 18.7M DoFs using p3 (4th-order) FR scheme.

間が少なくなることを確認した。さらにステンシル計算のメモリアクセスが連続になるよう配列インデックスを修正し、セル境界 flux 計算における不連続読み込みを書き込みに変更することでメモリアクセス待ちを削減し、ピーク比 10%という約 2 倍の高速化を達成した。FX100 のノード内の全コアを用いた 32 スレッド OpenMP 並列でもほぼ線形のスピードアップを得ており、メニーコア環境に適した手法といえる。Intel CPU 上でも従来の 2-3 割の高速化を確認しており今回採用したチューニング技法の汎用性は高い。現在は OpenACC による GPU 対応も進めており、今後さらに利便性を向上させたい。

< 引用文献 >

5. 主な発表論文等

[雑誌論文] (計 2 件)

T. Haga and S. Kawai, "On a robust and accurate localized artificial diffusivity scheme for the high-order flux-reconstruction method," *Journal of Computational Physics* (査読あり) 376 534-563 (2019) <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2018.09.052>
Y. Abe, I. Morinaka, T. Haga, T. Nonomura, H. Shibata, K. Miyaji, "Stable, non-dissipative, and conservative flux-reconstruction schemes in split forms," *Journal of Computational Physics* (査読あり) 353 193-227 (2018) <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2017.10.007>

[学会発表] (計 9 件)

芳賀臣紀, 多湖和馬, 雨宮孝, 伊藤浩之, 嶋英志, "流束再構築法による複雑形状周りの高レイノルズ数空力音響解析," 第 51 回流体力学講演会/第 37 回航空宇宙数値シミュレーション技術シンポジウム (2019)
芳賀臣紀, "流束再構築法による陰的 LES の性能評価," 第 34 回生研 TSFD シンポジウム (2019)
芳賀臣紀, 伊藤浩之, 堤誠司, 清水太郎, "流束再構築法を用いた超音速ジェットスクリーチの数値解析," 第 32 回数値流体力学シンポジウム (2018)
多湖和馬, 芳賀臣紀, 堤誠司, 高木亮治, "流束再構築法ソルバーの高速化に関する研究," 第 32 回数値流体力学シンポジウム (2018)
岡村充透, 芳賀臣紀, 嶋英志, 澤田恵介, "Matrix free defect correction を用いた陰的 FR 法の安定性解析," 第 32 回数値流体力学シンポジウム (2018)
T. Haga, S. Tsutsumi and E. Shima, "Development of a Robust Flux Reconstruction Scheme for Launch Acoustics Simulation," *High-Fidelity Industrial LES/DNS Symposium* (2018)
芳賀臣紀, 嶋英志, "FR 法による高次精度非構造オーバーセット格子法の構築," 第 50 回流体力学講演会/第 36 回航空宇宙数値シミュレーション技術シンポジウム (2018)
芳賀臣紀, "高次精度非構造オーバーセット格子法の航空宇宙問題への適用," 日本航空宇宙学会北部支部 2018 年講演会/第 19 回再使用型宇宙推進系シンポジウム (2018)
芳賀臣紀, 河合宗司, "高次精度流束再構築法による壁面モデル LES" 第 31 回数値流体力学シンポジウム (2017)

[その他]

6. 研究組織

(1) 研究協力者

研究協力者氏名: 河合 宗司, 阿部 圭晃

ローマ字氏名: (KAWAI, soshi), (ABE, yoshiaki)

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。