

メニーブロックソルバーによるフレキシブルな空間高次精度 CFD

松山 新吾
宇宙航空研究開発機構

Development of a Many-Block Solver for Geometrically Flexible and High-order Accurate CFD

by
Shingo Matsuyama (JAXA)

ABSTRACT

A many-block solver is developed for geometrically flexible and high-order accurate CFD method. To achieve an N -th order spatial accurate scheme in the many-block solver, hexahedral parent cells are sub-divided into structured N^3 cells. A finite volume method in a similar manner with structured solver is applied to solve the governing equations in the sub-divided cells. High-order spatial accuracy is achieved by interpolating the primitive variables at the cell interfaces of sub-divided cells with a fifth-order polynomial. The developed fifth-order many-block solver is tested for the Taylor-Green vortex problem at $Re = 1600$. The time evolutions of kinetic energy, kinetic energy dissipation rate, enstrophy field, and vorticity contours obtained by the many-block solver on a fine mesh with $(100 \times 5)^3$ cells are in excellent agreement with a reference solution obtained using a pseudo-spectral method. The computational speed and cost of many-block solver are evaluated on the JAXA supercomputer system. The many-block solver achieves a computational speed at 2.2 Tflops on 63 nodes (2016 cores) which is approximately 3.3 percent of the system theoretical peak performance. The computational time and memory usage of many-block solver are approximately 1.4 and 3.3 times higher, respectively, than those of a conventional structured multi-block solver.

1. はじめに

複雑形状を取り扱う CFD では非構造格子が最も広く用いられている手法である。非構造格子では、トポロジー的な制約を受けることなく空間を四面体（テトラ）・三角柱（プリズム）・四角錐（ピラミッド）などの多面体で埋めることができるため、構造格子を用いた場合と比べて複雑形状への対応が容易である。その反面、有限体積法による非構造格子ソルバーでは空間高次精度を実現することが難しく、MUSCL 法などを用いた場合には空間精度が二次程度程度にとどまる。複雑形状を伴う内部流などの解析において非構造格子ソルバーを用いる利点は非常に大きいですが、DNS・LES といった非定常乱流解析を行う場合には空間精度が十分でないことが致命的な欠点になっている。

近年、非構造格子において空間高次精度を実現する手法として discontinuous Galerkin (DG) 法¹⁾、flux reconstruction (FR) 法²⁾や spectral volume (SV) 法³⁾が注目を集めている。これらの手法では、セル内部に自由度（内点）を導入することで空間高次精度を構成しており、四次精度以上の非構造格子解法がすでに実現されている^{4,5)}。内部自由度を導入するため計算コストが高いなどの課題も指摘されているが、今後、複雑形状を伴う流れ場の高精度な解析に適した手法として最も有望なものの一つである。

構造格子では空間高次精度を実現することは比較的容易であるが、一般的なマルチブロックタイプの格子で複雑形状を取り扱う場合には格子作成に大変な労力が必要となる。直交格子法による複雑形状への対応⁶⁾も研究されているが、壁面境界条件を精度良く取り扱うためには immersed boundary 法などの付加的な手法が必要になる⁷⁾。重合格子法⁸⁾も複雑形状を取り扱うための手法として広く利用されているが、格子の重なり部分を処理するプログラムの実装が複雑であり、個々の研究者が自身の所有するソルバーに導入するのは少し敷居が高いように思われる。

本研究では、六面体（ヘキサ）セルをベースにして DG 法などと同様にセル内部に自由度（サブセル）を導入し、そのサブセルを“構造格的に解く”ことで空間高次精度を実現するソルバーを提案したい。図 1 に、本研究で提案するソルバーの概要を示す。まず、解析で使用する多面体セルはヘキサセルに限定する。このヘキサセルで構成される

格子系は完全に非構造格子である。ただし、ヘキサセル内部のサブセルは構造格的に (i, j, k 方向に) 分割され、構造格子ソルバーの計算手法をそのまま適用する。以降、ヘキサセルを“親セル”，内部セルを“サブセル”と定義する。 N 次精度のスキームを構築する場合には N^3 のサブセルで分割する必要があるが、図 2 では五次精度のスキームを実現する例として、一つの親セル内部を 5^3 のサブセルで分割（各方向に 5 分割、 $i, j, k = 1 \sim 5$ ）する。各サブセルはセル中心のデータを保持しており、通常の有限体積法を適用して個々に支配方程式を解く。空間高次精度はサブセルの境界面で物理量を高次に再構築することにより実現される。

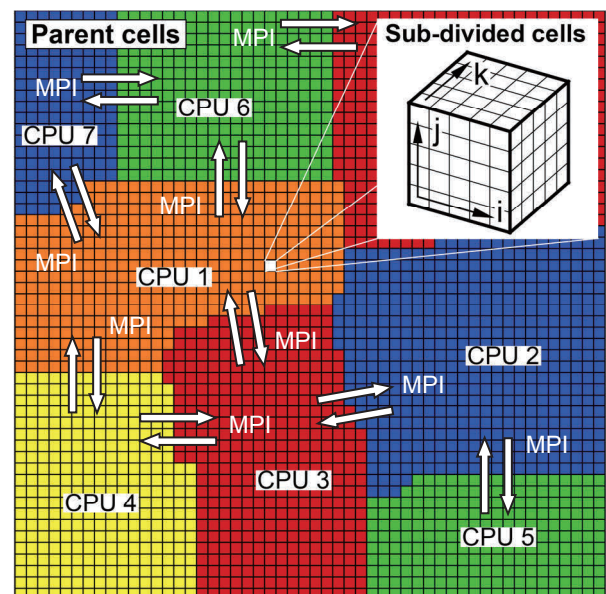


図 1 メニーブロックソルバーの概要。領域分割されたヘキサセル（親セル）と 5^3 の内部セル（サブセル）の例を示す。

サブセルは格子系が完全に構造格子であるため、構造格子ソルバーで用いられる WENO 法⁹⁾などの高次精度化手法をそのまま用いることができる。親セル内部の端に位置する $i, j, k = 3$ 以外のサブセルでは五次精度を実現するための

ステンシルが不足するが、図 2 に示すようにゴーストセルを配置（インデックスを $-2 \sim 0, 6 \sim 8$ とする）することで解決する。ゴーストセル上のデータは隣接する親セルからデータを取得するが、隣接セルが同ノードにある場合は単純にメモリからデータをコピーし、別ノードにある場合は MPI によりデータ転送する（図 1 を参照）。これによって、全てのサブセルのセル界面上で高次精度補間を実現することができる。粘性項についても構造格子の手法がそのまま適用でき、本研究では四次精度の中心差分を用いる。以上のアルゴリズムは内部に N^3 セルの構造格子系を埋め込んだヘキサセルによる非構造格子とみなすことができる。実際に本アルゴリズムによるソルバーは FV-UNS 形式のヘキサセル非構造格子データを読み込む仕様になっている。また、 N^3 セルを一つのブロックとしたマルチブロック構造格子とみなすこともできるが、通常のマルチブロック構造格子と比べるとブロック数が膨大な数になるため、ここでは本ソルバーを暫定的に“メニープロックソルバー”と命名する。

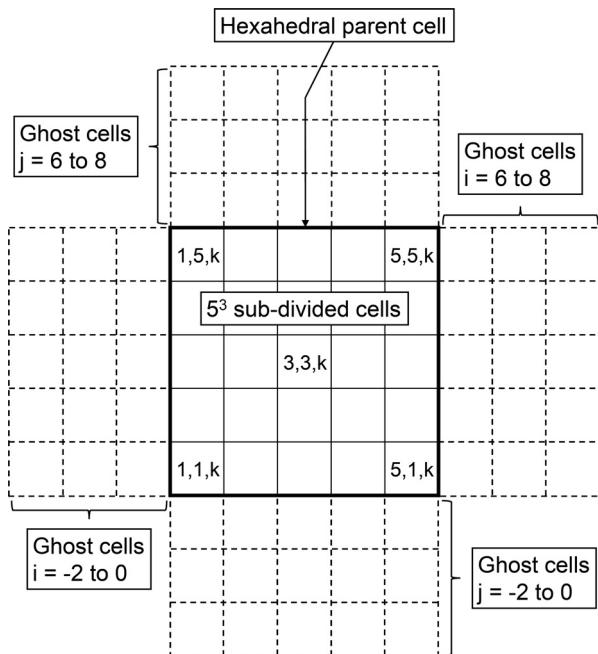


図 2 サブセルの構造格子系（空間五次精度の例）。

本研究で提案するメニープロックソルバーの長所は、サブセルに構造格子ソルバーの高次精度化手法がそのまま利用でき、親セルの直交性が良い場合には理想的な高次精度化が実現できる点にあると考える。短所はゴーストセル部分でメモリ・演算が重複するために計算コストが増大することである。本稿では、ベンチマーク問題として Taylor-Green vortex¹⁰⁾ をメニープロックソルバーにより解いた結果について報告する。

2. 解析対象

本稿では、メニープロックソルバーの精度を検証するベンチマーク問題として Taylor-Green vortex¹⁰⁾ を解析の対象にする。Taylor-Green vortex は International Workshop on High-Order CFD Methods¹¹⁾ においてテストケースの一つとして設定されている問題で、 $-\pi L < x, y, z < \pi L$ サイズの計算領域内部で以下の分布を初期条件にして時間発展を解く。

$$u = U_0 \sin\left(\frac{x}{L}\right) \cos\left(\frac{y}{L}\right) \cos\left(\frac{z}{L}\right)$$

$$v = -U_0 \cos\left(\frac{x}{L}\right) \sin\left(\frac{y}{L}\right) \cos\left(\frac{z}{L}\right) \quad (1)$$

$$w = 0$$

$$p = p_0 + \frac{\rho_0 U_0^2}{16} \left\{ \cos\left(\frac{2x}{L}\right) + \cos\left(\frac{2y}{L}\right) \right\} \left(\cos\left(\frac{2z}{L}\right) + 2 \right)$$

ここで、 u, v, w は各速度成分、 p は圧力、 L, U_0, p_0, ρ_0 はそれぞれ代表長、代表速度、代表圧力、代表密度である。代表量で定義されるレイノルズ数は 1600、マッハ数は約 0.09 になる。本解析では、立方体計算領域の全ての境界に周期境界条件を設定した。

3. 数値解析手法

支配方程式は三次元圧縮性 Navier-Stokes 方程式であり、保存式として密度・運動量・エネルギーの保存式を解く。支配方程式は有限体積的手法により離散化し、対流流束を SLAU スキーム¹²⁾ により計算する。本研究では、セル界面での原始変数 (ρ, u, v, w, p) を五次精度の多項式¹³⁾ で再構築することにより高次精度化を行う。さらに、低マッハ数領域における数値粘性を低減するため、補間した速度成分に対して Thombor らによって提案された修正¹⁴⁾ を加える。

粘性流束は四次精度の中心差分的手法により求める。粘性係数はサザーランドの式により、熱伝導係数はプラントル数を 0.72 として評価した。

時間積分には二段階二次の Runge-Kutta 法を用いる。三段三次の Runge-Kutta 法による解析は二段二次と同じ結果を与えるため、時間積分法は二次精度でも十分な精度が達成されている。解析では CFL 数が約 0.7 を維持するように時間刻みを設定した。

本稿ではメニープロックソルバーと通常のマルチブロック構造格子ソルバー（以後、構造格子ソルバーとする）の比較を行う。いずれのソルバーでも計算領域を 125 の領域に分割することによりノード並列化を行う。メニープロックソルバーは FV-UNS 形式の六面体非構造格子を読み込む仕様になっており、Metis¹⁵⁾ などの格子分割ソフトウェアを用いた格子分割にも対応するが、今回の解析では構造格子的に x, y, z 方向にそれぞれ 5 等分した格子を読み込んで解析を行った。これはメニープロックソルバーと構造格子ソルバーとで MPI によるデータ通信量を同一にしてベンチマーク結果が公平になるようにするためである。解析は宇宙航空研究開発機構 (JAXA) に設置されている JAXA スーパーコンピュータシステム (JSS2) 上で 32 ノード (1024 コア) もしくは 63 ノード (2016 コア) を用いて解析を実施した。

4. 解析結果

本稿では、無次元時間を $t_0 (= L/U_0)$ として $t = 0 \sim 20 t_0$ について Taylor-Green vortex の解析を実行した。計算精度を評価する指標として、次式で定義される kinetic energy E_k ,

$$E_k = \frac{1}{\rho_0 (2\pi L)^3} \int_V \rho \frac{\mathbf{u} \cdot \mathbf{u}}{2} dV \quad (2)$$

とその散逸率 ε ,

$$\varepsilon = -\frac{dE_k}{dt} \quad (3)$$

さらに、エンストロフィー ζ ,

$$\zeta = \frac{1}{\rho_0 (2\pi L)^3} \int_V \rho \frac{\boldsymbol{\omega} \cdot \boldsymbol{\omega}}{2} dV \quad (4)$$

について時間発展を計算して比較する。

Taylor-Green vortex を解くために用いる計算格子は完全に直交な格子で構成されているため、原理的にはメニブロックソルバーの結果は構造格子ソルバーと完全に一致することが期待される。

本稿では、格子解像度による解析結果への影響を評価するために格子解像度を変化させて (125³, 250³, 500³ セル) 解析を実施した。メニブロックソルバーによる解析は 5³ セルのサブセルを含むため、親セルには格子解像度を 5 倍に粗くした計算格子を用いる。従って、メニブロックソルバーにより 25³ の格子で解析を行う場合、サブセルを含めたセル数 (25×5)³ = 125³ を実質的なセル数として構造格子ソルバーとの比較を行う。表 1 に解析に用いる格子のセル数を示す。

表 1 解析に用いる格子のセル数

Mesh	Many-block solver	Structured solver
Fine	(100×5) ³	500 ³
Medium	(50×5) ³	250 ³
Coarse	(25×5) ³	125 ³

4. 1. メニブロックソルバーの精度検証

図 3 に kinetic energy E_k について時間発展を比較した結果を示す。メニブロックソルバーによる解析結果は、いずれの格子解像度についても構造格子ソルバーによる結果と完全に一致する。また、リファレンスとなる擬似スペクトル法による解析 (512³ 格子点)¹⁶⁾ とほぼ同じ結果を与えることがわかる。

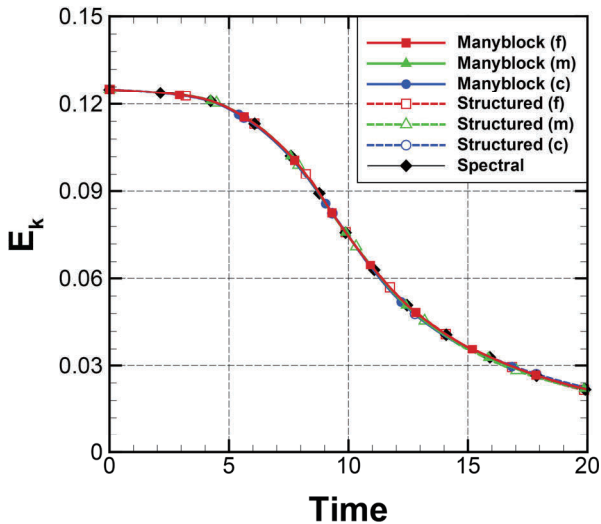


図 3 Kinetic energy E_k の時間発展。

図 4 に kinetic energy の散逸率 ε について時間発展を比較した結果を示す。メニソルバーによる解析結果は、最も解像度の低い coarse 格子で散逸率にずれが確認できるが、これは構造格子ソルバーも同様である。Fine および medium 格子の結果はどちらも擬似スペクトル法の解析結果をかなり良く再現している。

図 5 にエンストロフィー ζ について時間発展を比較した結果を示す。エンストロフィーの結果は格子解像度への依存性が大きく、coarse 格子による解析ではかなり過小評価

されている。Medium 格子による解析も過小評価気味な傾向がみられるが、fine 格子による解析とともに擬似スペクトル法の結果と良く一致している。これらの解析結果は、International Workshop on High-Order CFD Methods において報告されている有限差分法、DG 法などの解析結果と比較しても遜色は無く、十分な空間精度が実現されていると考えられる。詳細は Workshop ウェブサイトに掲載されているレポート¹⁷⁾を参照されたい。エンストロフィーの解析結果においては、メニブロックソルバーと構造格子ソルバーの結果で若干の差が見られる。特に coarse 格子においてメニブロックソルバーで少し散逸的な傾向が見られるが、この差が生じる要因については今後さらに調査したい。

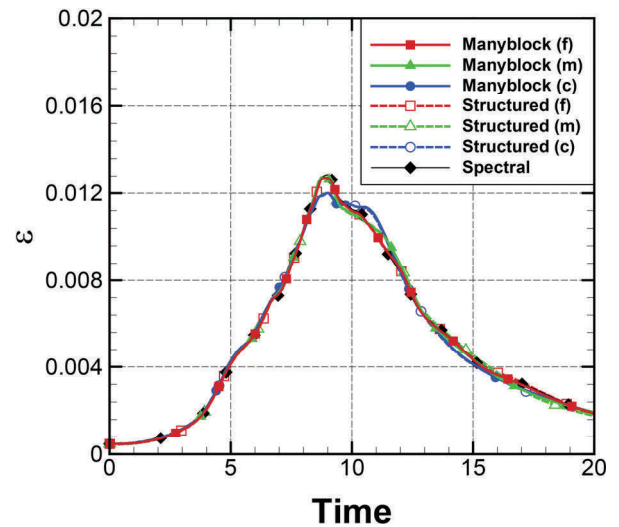


図 4 散逸率 ε の時間発展。

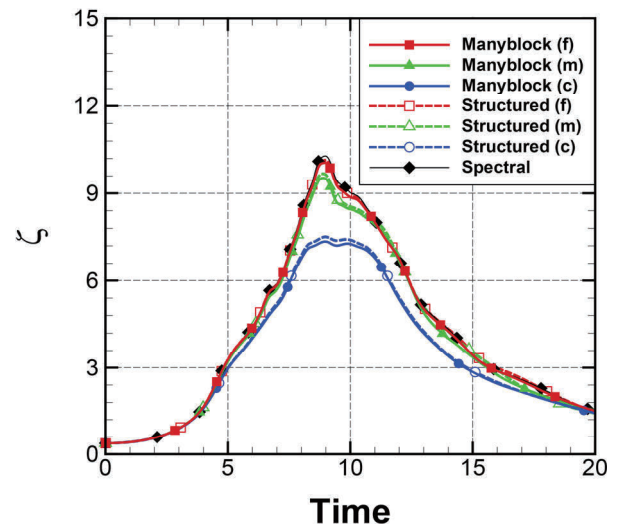


図 5 エンストロフィー ζ の時間発展。

図 6 および 7 に、それぞれ、メニブロックソルバー、構造格子ソルバーにより計算した瞬時の渦度分布を示す。これらの結果は、散逸率がピーク値に近くなる $t = 8 t_0$ において、 $x = -\pi L$ での断面分布 ($0 < y < \pi L/2, \pi L/2 < z < \pi L$) を示している。最も解像度が低い coarse 格子による解析結果で若干の差が見られるが、メニブロックソルバーは構造格子ソルバーの結果をほぼ完全に再現している。図 8 に擬似スペクトル法により得られた結果¹⁶⁾を参考に示す。メニブロックソルバーの結果は擬似スペクトル法と比較しても全く遜色がない。

図 9 にメニブロックソルバーによる解析 (fine 格子) で得られた渦の三次元構造を示す. 図の結果は $t = 8 t_0$ における渦度 $|\omega| = 12 U_0/L$ の等値面を示す. 解析によって微細な三次元渦構造が捉えられており, メニブロックソルバーが十分に高い空間精度を実現していることがわかる.

表 2 計算コストの比較

Mesh size	Elapsed time, s	Memory, MB
Many-block (c)	0.018870 ^a	1460.9 × 32
Many-block (m)	0.13296 ^a	5960.4 × 32
Many-block (f)	0.50938 ^b	21354 × 63
Structured (c)	0.014515 ^a	1169.9 × 32
Structured (m)	0.092067 ^a	2444.9 × 32
Structured (f)	0.35603 ^b	6519.3 × 63

^a SPARC64 X1fx × 32 on JAXA Supercomputer system.

^b SPARC64 X1fx × 63 on JAXA Supercomputer system.

4. 2. 計算コストの評価

メニブロックソルバーの計算コストを評価した結果を表 2 に示す. まず, 時間ステップあたりの計算時間を構造格子ソルバーと比較すると, メニブロックソルバーは coarse, medium, fine 格子でそれぞれ約 1.3, 1.4, 1.4 倍の計算時間を必要とする. また使用メモリサイズについても, 構造格子ソルバーに対して約 1.2, 2.4, 3.3 倍の容量が必要である. メニブロックソルバーにおけるコスト増加は, 親セルが隣接するセルと重複する形でゴーストセルを持つことが原因と考えられる.

表 3 に, JSS2 で提供されている性能プロファイルを使用して演算性能を評価した結果を示す. 構造格子ソルバーでは CPU のピーク性能に対しておおむね 3~4 % 程度の性能が得られている. メニブロックソルバーでは若干演算性能が低下しているが, 約 3 % の実行性能を達成した. 今後, チューニングと使用メモリの効率化を行い, さらなる性能向上を目指したい.

表 3 プロファイルによる演算性能の比較

Mesh size	Gflops	% to PEAK
Many-block (c)	860.3 ^a	2.50
Many-block (m)	1092 ^a	3.19
Many-block (f)	2246 ^b	3.27
Structured (c)	1030 ^a	3.00
Structured (m)	1309 ^a	3.81
Structured (f)	2523 ^b	3.67

^a SPARC64 X1fx × 32 on JAXA Supercomputer system.

^b SPARC64 X1fx × 63 on JAXA Supercomputer system.

5. まとめ

本研究では, 六面体の親セル内部を N^3 の構造格子系サブセルで分割することで N 次精度を実現するメニブロックソルバーを提案した. 本ソルバーではサブセルの格子系に構造格子ソルバー用の高次精度化手法がそのまま適用できるため, 空間高次精度が容易に実現可能である. 本稿では提案したアルゴリズムを CFD ソルバーへ実装し, 五次精度の空間高次精度ソルバーを構築した. ベンチマーク問題として Taylor-Green vortex について解析を行った結果, 通常のマルチブロック構造格子ソルバーや擬似スペクトル法と同じレベルで空間高次精度を実現することが可能であることが示された.

今後の課題として, コードのチューニングによる演算性能の向上とメモリ使用の効率化を行うことが重要である. また, 本稿の結果は完全に直交な格子で解析を実施した理想的な条件であるため, 格子の直交性が悪化する複雑形状

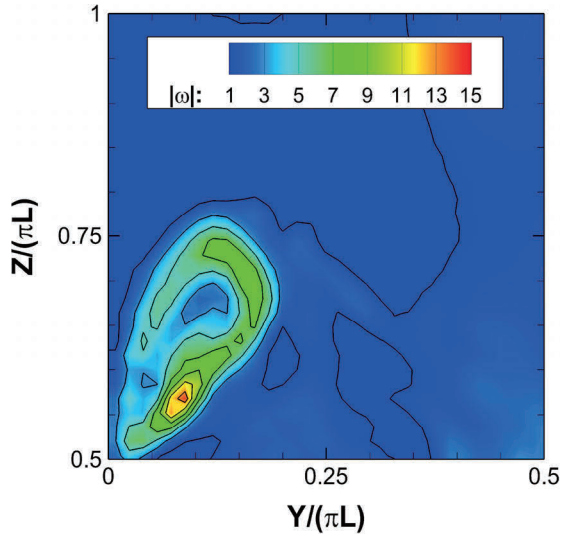
周りの解析によって精度を検証することが次のステップである.

謝辞

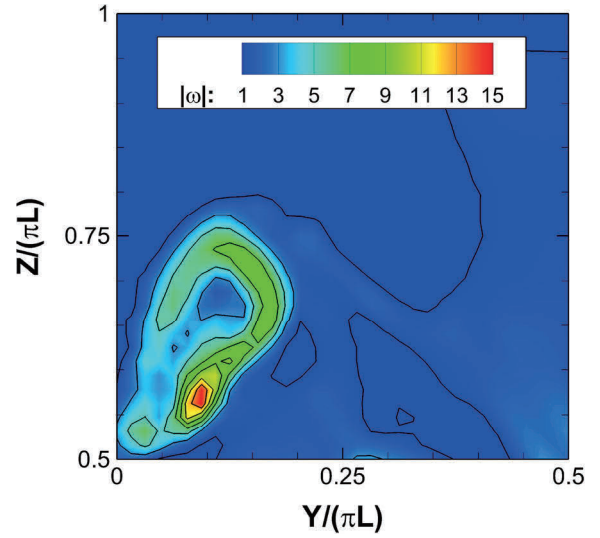
本研究では数値計算を実行するにあたって, 宇宙航空研究開発機構スーパーコンピュータ『JSS2』を用いた. ここに記して関係者各位に謝意を表す.

参考文献

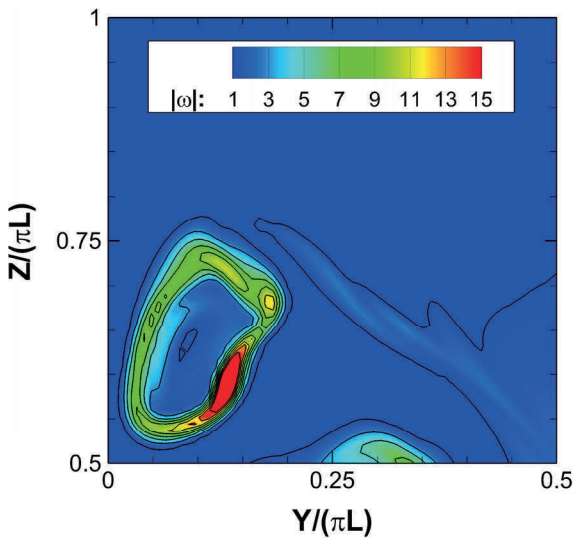
- 1) Cockburn, B. and Shu, C.-W., "The Runge-Kutta discontinuous Galerkin method for conservation laws V: multidimensional systems," *J. Comput. Phys.* 141 (1998), pp. 199-224.
- 2) Huynh, H. T., "A flux reconstruction approach to high-order schemes including discontinuous Galerkin methods," AIAA Paper 2007-4079.
- 3) Sun, Y., Wang, Z. J., and Liu, Y., "Spectral (finite) volume method for conservation laws on unstructured grids VI: Extension to viscous flow," *J. Comput. Phys.* 215 (2006), pp.41-58.
- 4) 芳賀, 堤, 河合, 高木, "高次精度非構造 FR-LAD 法を用いた超音速ジェットの空力音響解析" 46 回流体力学講演会/第 32 回航空宇宙数値シミュレーション技術シンポジウム 講演論文集, JSASS-2014-2081-F/A.
- 5) 浅田, 保江, 荻野, 澤田, "翼まわり定常計算に向けた空間 4 次精度非構造格子法の構築" 46 回流体力学講演会/第 32 回航空宇宙数値シミュレーション技術シンポジウム 講演論文集, JSASS-2014-2102-A.
- 6) Tamaki, Y. and Imamura, T., "Development of Higher-Order Accurate Spatial Interpolation Scheme for Unstructured Cartesian Grids," AIAA 2014-3307.
- 7) Takahashi, Y. and Imamura, T., "High Reynolds Number Steady State Flow Simulation using Immersed Boundary Method." AIAA 2014-0228.
- 8) Steger, J. L., Dougherty, F. C. and Benek, J. A., "A Chimera Grid Scheme," In Advances in Grid Generation, *ASME FED* 5 (1983), pp.463-.
- 9) Jiang, G.-S. and Shu, C.-W., "Efficient Implementation of Weighted ENO Schemes," *J. Comput. Phys.* 126 (1996), pp.202-228.
- 10) Taylor, G. I. and Green, A. E., "Mechanisms of the Production of Small Eddies from Large Ones," *Proceedings of the Royal Society of London A* 158 (1937), pp. 499-521.
- 11) 4th international workshop on high-order CFD methods, <https://how4.cenaero.be>
- 12) Shima, E. and Kitamura, K., "Parameter-Free Simple Low-Dissipation AUSM-Family Scheme for All Speeds," *AIAA Journal* 49 (2011), pp.1693-1709.
- 13) Matsuyama, S., "Performance of all-speed AUSM-family schemes for DNS of low Mach number turbulent channel flow," *Computers & Fluids* 91 (2014) pp.130-143.
- 14) Thornber, B., Mosedale, A., Drikakis, D., Youngs, D. and Williams, R., "An improved reconstruction method for compressible flows with low Mach number features," *J. Comput. Phys.* 227 (2008), pp.4873-4894.
- 15) George, K. and Kumar, V., METIS - Unstructured Graph Partitioning and Sparse Matrix Ordering System, Version 2.0, (1995).
- 16) van Rees, W. M., Leonard, A., Pullin, D. I. and Koumoutsakos, P., "A comparison of vortex and pseudo-spectral methods for the simulation of periodic vortical flows at high Reynolds numbers," *J. Comput. Phys.* 230 (2011), pp.2794-2805.
- 17) 2nd international workshop on high-order CFD methods, http://www.dlr.de/as/desktopdefault.aspx/tabid-8170/13999_read-35550/



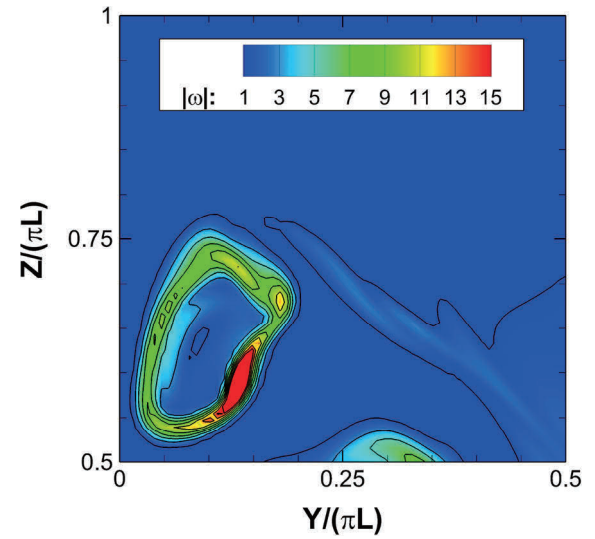
(a) Many-block solver, $(25 \times 5)^3$ cells



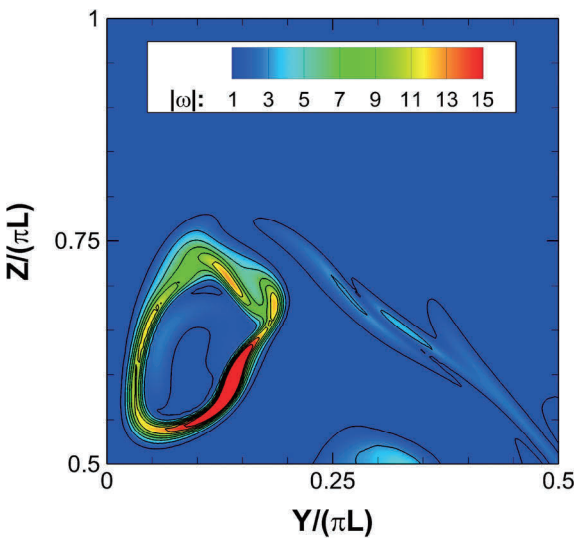
(a) Structured solver, 125^3 cells



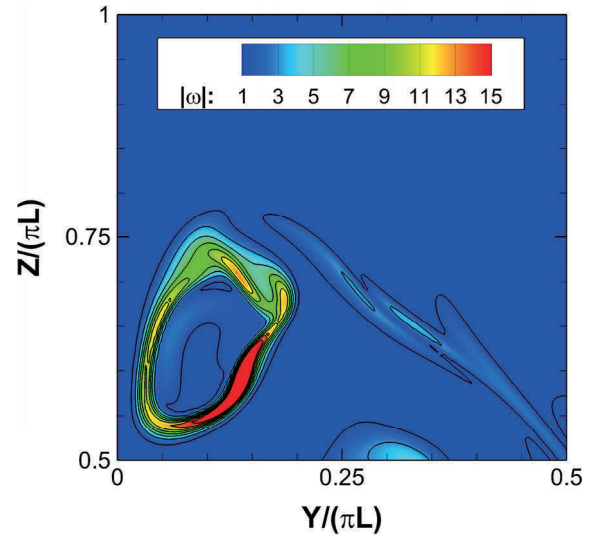
(b) Many-block solver, $(50 \times 5)^3$ cells



(b) Structured solver, 250^3 cells



(c) Many-block solver, $(100 \times 5)^3$ cells



(c) Structured solver, 500^3 cells

図 6 メニーブロックソルバーによる $t = 8 t_0, x = -\pi L$ における渦度分布.

図 7 構造格子ソルバーによる $t = 8 t_0, x = -\pi L$ における渦度分布.

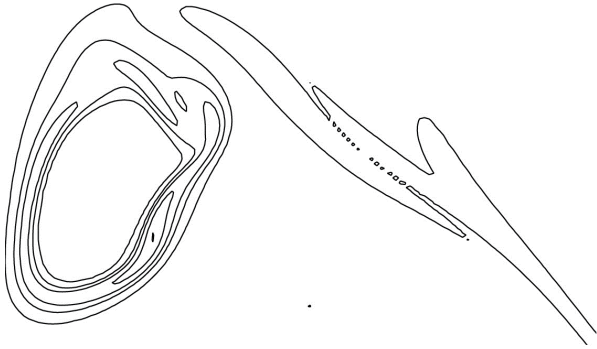


図8 擬似スペクトル法による $t = 8t_0, x = -\pi L$ における渦度分布¹⁶⁾. 512^3 格子点での解析結果.

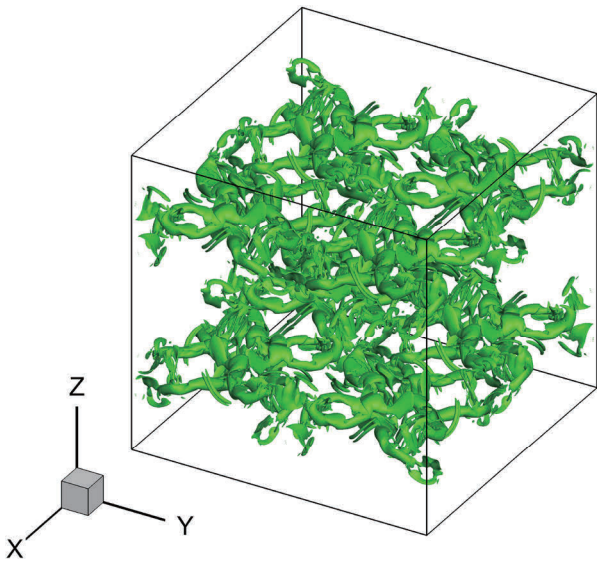


図9 メニーブロックソルバーによる $t = 8t_0$ における渦の三次元構造. Fine 格子による解析結果.