高速流体ソルバ FaSTAR の開発

橋本 敦,村上 桂一,青山 剛史 (JAXA),菱田 学,大野 真司 (菱友システムズ), 坂下 雅秀 (大興電子通信),ラフール パウルス (計算力学研究センター),佐藤 幸男 (アドバンスソフト)

Development of fast flow solver FaSTAR

by

Atsushi Hashimoto, Keiichi Murakami, Takashi Aoyama, Manabu Hishida, Shinji Ohno, Masahide Sakashita, Paulus Lahur, Yukio Sato

ABSTRACT

A flow solver, FaSTAR(FAST Aerodynamic Routines), has been developed in the Digital/Analog Hybrid Wind Tunnel project. This solver is designed for efficient aerodynamic database creation before wind tunnel testing. First, a performance target was determined from the requirement of the Hybrid Wind Tunnel and feasibility study. Our target is 1 hour/case for RANS computation using 10M grid. Next, we investigated the schemes employed by famous flow solvers in the world and designed the software based on the investigation. The developed FaSTAR is 10 times faster than a commercial software and takes 1.8 hour per case. We plan to accelerate the solver more using numerical techniques such as multigrid and GMRES methods.

1. はじめに

JAXA では、「デジタル/アナログ・ハイブリッド風洞プロ ジェクト[1]」(以後、ハイブリッド風洞)を推進しており、 風洞試験を効率化するための情報システムを構築している。 多くの機能がシステムに組み込まれる予定であるが、その 主な機能の1つに事前 CFD 解析機能がある。風洞試験の事 前に、CFD を用いてパラメトリックスタディを行う機能で あり、試験模型の設計、試験計画の策定、計測データの健 全性評価に活用する予定である。

ここでは、ハイブリッド風洞で使われる CFD ソルバ FaSTAR を事前 CFD 解析の要求をもとに仕様を決定する。 FaSTAR は平成 19 年度に検討を開始し、平成 20 年度から 開発に着手した。まず、その開発において定めた性能目標、 その目標を目指したソルバの設計について(データ構造、 スキームなど)述べ、次に解析例を示す。さらに、開発中 の Multigrid 法についても解説する。

2. 性能目標、解析規模の設定

まず、開発を行う前に、ハイブリッド風洞で事前解析を 行うケース数、期間から要求性能を見積もった。典型的な 2週間の風洞試験を想定すると、1日200ケースの試験を8 日間実施し、合計1600ケースの計測を行う。全ケースを CFDで解析するのは非現実的なため、1/5のケース数 (=320ケース)を解析することにする。また、解析する期 間を20日(1ヵ月の実働時間)とすると、1ケースあたり の計算時間は1.5時間となる。この値を丸めて1時間/ケー スをハイブリッド風洞におけるCFDの要求性能と設定した。 また、摩擦抵抗まで考慮した抵抗値を予測するため、 RANSで解析する。さらに、格子は複雑形状に対応するた め、非構造格子を採用する。

JAXA の保有している JAXA Supercomputer System (JSS) は、スカラ計算機の M システムで 3000CPU である。この システムでは、100CPU 程度の並列計算であれば、日常的 に使用することが可能であるため、使用可能な計算資源を 100CPU とした。

次に、格子点数を決定する。図 1 に第 2 回及び第 3 回 AIAA CFD Drag Prediction Workshop (DPW2, DPW3)^[2]の参 加者が使用した流体ソルバの計算時間の比較を示す。ここ では、1000 万点格子、100CPU を使用したときの計算時間 を示している。この比較より、ワイオミング大学の NSU3D^[4]が最速であり、1 時間/ケースを達成している。よ って、NSU3D を参考に世界最高速レベルの流体解析ソルバ を開発できれば、1時間/ケースという要求性能を満たして、 かつ1000万格子を使用することが可能である。

最後に、1000 万格子を使ったときの精度を検討する。い くら高速に計算できても、精度が悪いと CFD を使う利点が 失われる。航空機の設計では、抵抗予測の誤差が 1%以下 という、非常に高い精度が要求されるが、現状の CFD 技術 では困難である。ここでは、村山ら^[3]が行った DPW3 の結 果を参考に、誤差を推定した。図 2 に格子収束性の結果を 示す。これを見ると、1000 万点のとき 10 カウント程度(1 カウントは 10⁴)の誤差であることがわかる。この程度の 精度があれば、当初の目的である、模型設計、計画策定、 計測データの健全性評価に十分使うことができる。

検討した性能目標、解析規模をまとめると以下のように なる。

- ・計算時間:1時間/ケース
- ・方程式: RANS
- ·格子:非構造格子
- ・計算資源: JAXA スパコン 100CPU
- 格子点数:1000 万点
- ・精度:10カウント程度

3. ソルバの設計

第2節で検討した要求性能を満たすため、代表的な非構 造格子用ソルバに用いられているスキームの調査を行った。 目標とする性能は NSU3D^[4]であるが、他の著名なソルバ USM3D^{[5][6]}、FUN3D^[7]、TAU^[8]、Edge^[9]、BCFD^[10]、TAS^[11]、 UG3^[12]の調査を行った。結果をまとめると以下のようにな った。

- ✓ 高速なソルバには、Multigrid法^[4]、GMRES法^[13]、 Residual Smoothing法等の収束加速法が導入されている。
- ✓ ほとんどのソルバは、並列計算の通信にMPIを用い、領 域分割にMetis^[14]を用いている。また、乱流モデルとして は、Spalart-Allmaras^[15]モデルとSSTモデル^[16]の2種類の乱 流モデルを組み込んでいる。格子はハイブリッド格子 (六面体、四面体、ピラミッド、プリズム)に対応して いる。
- ✓ セル中心法、セル節点法ともによく使われている
- ✓ 流束評価では、1つの手法で全速度域をカバーするのは 困難なため、低亜音速から極超音速用の各種数値流束が 用いられている。
- ✓ 勾配評価は、主にGreen-GaussとLeast-squareが用いられている。



これらの調査を元に、ソルバを表 1 のように設計した。 赤字でデフォルトのスキームを示す。離散化に関しては、 今後 Hanging node にも対応できるように、セル中心法を採 用した。また、高速化を行うため、データ構造を面ベース とした。非構造格子の場合は、セル同士の接続関係を保持 する必要があるが、本ソルバでは面に隣接するセルの情報 (面番号→隣接セル番号)だけ保持することにした。勾配 計算、流束計算、時間積分など、ほぼ全ての計算を面のル ープで構築した。このデータ構造は、NSU3D(セル節点法 なのでエッジベース)、USM3D^[5]でも使用されている。さ らに、キャッシュミスを抑えるため、セル番号、面番号の 並び変えを Cuthill-Mackee 法を用いて行う。

非粘性流束の計算には、低亜音速から極超音速まで対応 できるように、表1にリストアップした定評のある手法を 組み込んだ。ちなみに、SLAU^[17]は低亜音速用(M<0.1)の 流束である。勾配制限関数には、精度を維持しつつ安定性 を向上するために、新たに開発した勾配制限関数 (Hishida^[18])を導入した。この制限関数が最も安定なため、 デフォルトとしている。

乱流モデルには、SA と SST を組み込み、格子が粗い場 合でも計算できるように、自動壁処理^[19]を追加した。

領域分割には、サンディア国立研究所が開発しているラ イブラリ Zoltan^[20]を使用した。この中には、ParMetis (Metisの並列版)をはじめ、Recursive Coordinate Bisection (RCB), Hilbert Space-Filling Curve (HSFC), Hypergraph Partitioningの PHG 等の多様な領域分割手法が含まれている。 手法の切り替えが容易にできることが、Zoltan のメリット である。Metis は高速に領域分割可能である一方、分割に 失敗することがあるため、他の手法にも切り替えられる Zoltan を採用した。

また、収束加速に必要な Multigrid 法、GMRES^[21]を今後 導入する予定であり、現在開発中である。今年度中に、こ れらを組み込んだバージョン(ver 3.0)をリリースする計 画となっている。このような収束加速法は、今後も格子点 数が増え、解析規模が大きくなった場合は必須となる。 LU-SGS 法のみでは、格子点数が増加するにつれて、収束 に必要な反復回数が増加するが、Multigrid 法では基本的に 格子点数に依存しない。Multigrid 法については、導入の進 捗状況を後述する。

表1 ソルバを構成するスキーム

(小子はケノオルドのスイーム)			
支配方程式	Euler, Full N-S		
格子	ハイブリッド格子		
離散化	セル中心		
データ構造	面ベース		
並び替え	Cuthill-Mackee		
非粘性流束	HLLEW, Roe, HLLE, AUSM		
	\pm UP, SLAU		
勾配評価	Least-square, Green-Gauss		
勾配制限関数	Hishida, Venkatakrishnan,		
	Barth-Jespersen		
乱流モデル	SA, SST (自動壁処理)		
領域分割	Zoltan (Metis)		
ノード間通信	MPI		
時間積分	LU-SGS(定常/非定常、		
	local/global time stepping)		
収束加速 (開発中)	Multigrid (FAS), GMRES		
	Residual Smoothing		

以上述べたスキームを用い、ソフトウェアの開発を行う。 ソフトは、前処理(Pre-Process)、ソルバ(Solver)、後処 理(Post-Process)に分離した(図3)。前処理では、格子 データの変換、領域分割、面積・体積の計算、並び替え等 を行う。ソルバで流体解析を行い、後処理で可視化用のデ ータを作成する。前処理部分が、通常の解析ソルバに比べ 大きくなっているが、開発作業の効率化とメンテナンス性 を考え、このような設計にした。非構造格子では、質の悪 い格子にも対応するように、体積・面積計算アルゴリズム を工夫する必要があるため、前処理開発の負荷も大きい。 前処理、ソルバ、後処理を含めた一連のソフトを、 FaSTAR (FAST Aerodynamic Routines)と名付けた。

格子ソフトは、Gridgen、TAS-Mesh^[22]、HexaGrid^[23]に対応している(表 2)。細かな物理現象まで精度良く解析したい場合や研究要素の強い解析には、高品質な構造格子が好まれるが、一方、誤差がある程度許容される概念設計などの場合には、完全自動生成の格子が好まれる。FaSTARは、これらの手動、半自動、完全自動のソフトに対応することで、幅広い用途に使用可能である。

一方、可視化ソフトについては、商用ソフトの Fieldview や Tecplot、フリーソフトの ParaView^[24]に対応している。 商用ソフトを所有していなくても、可視化できるように ParaView にも対応させた。

4. コーディング手法、開発手法

CFD のソフト開発手法には、UPACS^[25]や elsA^[26]で使わ れた、オブジェクト指向的な設計がある。また、FAAST プ ログラム^[27]では、新しいコーディング手法、共同開発手法 を取り入れて開発を行っている。ただし、どの手法も開発 の効率化、メンテナンス性を重要視したもので、計算速度 を重要視する FaSTAR の開発には向かない。よって、高速 性能を維持しつつ、見やすいプログラムを作るため、新た にコーディングルールを作成して、開発を開始した。ルー ルを作る際には、気象庁や FUN3D の Fortran コーディング ルール^{[28][29]}を参考にして作成した。開発言語としては、開 発担当者のスキルとスパコンで使用することを考慮し、 Fortran90 を採用した。さらに、バージョン管理ツールの Subversion、課題管理ツールの Trac が組み込まれた Trac Lightningを使用し、文章化には Doxygen を使用して、開発 の効率化を行った。加えて、定期的(年1回程度)に、リ ファクタリングとチューニングを行うことで、プログラム の見やすさと性能を維持するようにしている。



衣 2 刈応俗士ノノト		
格子ソフト	種類	生成法
Gridgen	マルチブロック 構造格子	手動
	非構造格子 (四面体ベース)	半自動
TAS-Mesh	非構造格子 (四面体ベース)	半自動
HexaGrid	非構造格子 (六面体ベース)	完全自動

表2 対応格子ソフト

5. 解析例

新規に CFD ソルバを開発するにあたって、衝撃波管問題 (Sod's Problem)、平板境界層などの基本的な検証から、 DLR-F6 などの標準模型に対する検証を行った。ここでは、 その中で代表的な解析例を紹介する。

まず、商用ソフト(Fluent)との速度を比較するために、 ONERA-M6 翼の解析を行った。格子は HexaGrid で生成し、約 54 万セルである。また、一様流マッハ数は M=0.84、迎 角はα=3.06°である。非粘性計算によって得られた圧力分 布を図 4 に示す。ラムダ型の衝撃波が翼面上に見られ、正 しい解が得られている。同じ格子、同様の手法を用いて、 Fluent でも計算を行った。両者を比較すると、FaSTAR で は 1.8 秒/step であるのに対し、Fluent では 20.9 秒/step であ った。なお、収束に必要な反復回数はほぼ同じである。よ って、約 10 倍程度の速度が得られていることがわかる。因 みに、JAXA スパコン (JSS: JAXA Supercomputer System) で FaSTAR をプロファイラを用いて解析すると、約 1GFlops (理論ピークの約 10%)の速度を達成していること がわかった。従って、非構造格子のソルバとしては、非常 に高速なソルバを開発することができた。

次に、標準模型である DLR-F6 FX2B の解析を行った。 計算条件は、JAXA 遷音速風洞で行われた試験と同じ条件 で、マッハ数 M=0.75、レイノルズ数 Re= 1.5×10^5 、迎角 α = 0° とした。乱流モデルとしては SA モデルを用いた。格 子は HexaGrid で作成し、約 670 万セルである(図 5)。格 子生成には、JSS のログインノードで TSS 実行した場合、 約25分要した。今後、風洞試験結果との比較を行うが、こ こでは計算速度のみを評価する。JSSの100CPUを用いて、 CFL=30で局所時間刻みによりRANS定常解析を行った。 10,000ステップ程度で収束し、計算時間には76分要した。 単純にこの結果を1000万セルに換算すると、約1.8時間と なる。現時点では、第2節で設定した目標には届かないが、 今後Multigrid法やGMRES法等の収束加速法を用いて、目 標性能である1時間/ケースを満たしたFaSTARの完成を目 指す。

また、精度を検証するために、DPW4 で採用された NASA-CRM の解析を行った。解析条件は、マッハ数 M=0.85、迎角 $\alpha=0^{\circ}$ 、 $Re=5 \times 10^{6}$ である。格子は HexaGrid で作成し、約 1200 万セルである。図 7 に計算によって得ら れた表面圧力を示す。表 3 では、実績のある TAS コードと の比較を行っている。現状では、 C_D で 8 カウントの差が生 じているが、開発の初期段階としては妥当な結果であると 考えている。この差については、今後、格子収束性等を検 討する予定である。



図 4 ONERA M6 翼の表面圧力分布





表3 空力係数の比較

	FaSTAR	TAS
CL	0.1497	0.1551
CD	0.0190	0.0182
СМ	0.0806	0.0762

6. Multigrid 法

ここでは、Multigrid 法の適用について述べる。まず、 Multigrid 法を使うためには、細かい格子に加えて粗い格子 を用意する必要がある。構造格子の場合は、比較的簡単に 粗い格子が作れるが、非構造格子の場合は、いくつかの格 子を合体させて粗い格子を作る。このように合体した格子 を用いた Multigrid 法を Agglomeration Multigrid^[4]と呼ぶ。ま た、流体の方程式は非線形なので、通常の線形問題に使わ れる Multigrid 法は使えない。非線形用に拡張した Full Approximation Storage (FAS)^[4]法を適用する。粗い格子は、 HexaGrid の生成過程で用いているデータ構造(八分木構 造)を利用して生成した。ONERA-M6の格子に対して生成 した粗い格子を図 8、9に示す。直交格子の部分は、細かい レベルのところから、順に粗くする方法を採用した(図 8)。一方、プリズム格子の部分は、NSU3D と同様に、垂 直方向に合体する方法を採用した。

保存量の Restriction (細かい格子から粗い格子へのコピー)は式(1)のように体積平均を用い、残差については式(2) のように総和の値を用いた。一方、Prolongation (粗い格子から細かい格子へのコピー)は、式(3)のように初期値との 差を、そのまま代入する方法 (Injection)を用いた。

$$Q_{i}^{2h} = \sum_{j} Q_{j}^{h} V_{j}^{h} / V_{i}^{2h}, \quad V_{i}^{2h} = \sum_{j} V_{j}^{h} \qquad (1)$$

$$R_{i}^{2h} = \sum_{j} R_{j}^{h} \qquad (2)$$

$$Q_{j}^{h} \leftarrow \left(Q_{iupdate}^{2h} - Q_{i0}^{2h}\right) \qquad (3)$$

また、最も細かい格子では勾配評価に基づく 2 次精度で流 束の計算を行うが、粗い格子では 1 次精度で計算する。加 えて、粗い格子では各セルを合体しているので、Level 2 で は 24 面体、Level 3 では 96 面体になる。よって、細かい格 子の面のままで計算すると、粗い格子の計算コストが高く なる。ここでは、コストを下げるために同一のセルに隣接 している面は合体させて、1 つの面として扱う手法^[4]を用 いた。

次に、計算例を示す。使用した格子は約40万セルで、図 8、9に示した3レベルの格子を用いて、Vサイクルで非粘 性計算を行った。Vサイクルとは、簡単に手順を示すと以 下のようになる。

1. Level 1で計算

- 2. Level 1から2へRestriction
- 3. Level 2で計算
- 4. Level 2から3へRestriction
- 5. Level3で計算
- 6. Level3から2~Prolongation
- 7. Level2から1~Prolongation

この外にも W サイクル、Full Multigrid (FMG) 法などがあ るが、今回は最も簡単な V サイクルを適用した。

得られた圧力分布の結果を図 10 に示す。この分布は、 Multigrid 法なしの結果と一致していることを確認している。 図 11 には密度の残差履歴、図 12 には抵抗係数の収束履歴 を示す。それぞれのグラフでは、Multigrid 法なしの場合と ありの場合で比較している。さらに、各レベルで内部反復 を 1 回の場合と 3 回の場合で比較している。これらの結果 より、Multigrid 法を用いることで、少ない反復回数で収束 解が得られることがわかる。また、各レベルでの内部反復 の回数を増やすことで、さらに収束を加速できることがわ かった。

しかし、横軸を時間にとった場合を図 13 に示すが、 Multigrid 法の効果が得られていない。この原因として、粗 い格子の生成方法に問題があると考えている。通常の Multigrid 法では、格子数が一段階粗い格子で 1/8, 二段階粗 い格子で 1/64 になる。しかし、今回の粗い格子では、そう なっていない。直交格子部分では、一番細かいレベルの部 分のみを順に粗くしており、プリズムの部分も垂直方向に のみ粗くしている。よって、粗い格子での計算コストが高 くなっている。今後、粗い格子の生成方法を改良して、効 率を上げる予定である。

7. まとめ

ハイブリッド風洞の性能要求を満たす、実現可能な性能 目標及び解析規模を検討し、「格子 1000 万点の RANS 解 析を 100CPU で 1 時間」と設定した。様々な検討をした結 果、この計算規模であれば、10 カウント程度の精度で抵抗 予測が可能であることが分かった。そして、この目標を達 成するために、各非構造ソルバのスキームを調査し、新規 開発ソルバで採用するスキームを決定した。

その設計を基に一連の流体解析ソフト: FaSTAR の開発 を行い、現状では、Fluent の 10 倍の速さとなる、1.8 時間/ ケースで計算可能である。今後、収束加速法(Multigrid 法、 GMRES 法)の改良を継続し、1 時間/ケースを満たすソル バを開発する予定である。

参考文献

- [1] 口石茂他, "JAXAにおけるEFD/CFD融合に向けた試み -デジタル/アナログ・ハイブリッド風洞構想(第3報)-", 第42回流力/ANSS講演集, 2A4, 2010.
- [2] AIAA CFD Drag Prediction Workshop, http://aaac.larc.nasa.gov/tsab/cfdlarc/aiaa-dpw/
- [3] Murayama, M., et al., "Comparison Study of Drag Prediction for the 3rd CFD Drag Prediction Workshop by Structured and Unstructured Mesh Method," AIAA paper 2007-258, 2007.
- [4] Mavriplis, D., "Third Drag Prediction Workshop Results Using the NSU3D Unstructured Mesh Solver," Journal of Aircraft, vol. 45, no. 3, 2008, pp. 750-761.
- [5] Frink, N. T., "Recent Progress Toward a Three-Dimensional Unstructured Navier-Stokes Flow Solver," AIAA paper 94-0061, 1994.
- [6] Pandya, M., et al., "Aggolomeration Multigrid for an Unstructured Grid Flow Solver," AIAA paper 2004-759, 2004.
- [7] Anderson, W. K., et al., "An Implicit Upwind Algorithm for Computing Turbulent Flows on Unstructured Grids," Computers Fluids, Vol. 23, No. 1, 1994, pp. 1–21.
- [8] Gerhold, T., "Overview of the Hybrid RANS Code TAU,"

MEGAFLOW, Springer-Verlag, 2005, pp. 81-92.

- [9] Edge Theoretical formulation, FOI dnr 03-2870, 2007.
- [10] Mani, M., et al., "A Structured and Hybrid Unstructured Grid Euler and Navier-Stokes Solver for General Geometry," AIAA paper 2004-524, 2004.
- [11] Nakahashi, K., Ito, Y., and Togashi, F, "Some challenges of realistic flow simulations by unstructured grid CFD", International Journal for Numerical Methods in Fluids, Vol.43, 2003, pp.769-783.
- [12] 嶋英志, "三次元非構造格子NSソルバーUG3," 航空宇宙 技術研究所特別資料, NAL-SP-22, 1994, pp. 25-30.
- [13] Saad, Y. and Schultz M. H., "Generalized Minimal Residual Algorithm for Solving Nonsymmetric Linear Systems", SIAM J. SCI STAT. COMUT., Vol. 7, No.3, pp 856-869, 1986.
- [14] Karypis Lab, http://glaros.dtc.umn.edu/gkhome/
- [15] Spalart, P. R., "A one-equation turbulence model for aerodynamic flows," AIAA paper 1992-439, 1992.
- [16] Menter, F. R., et al.. "Ten Years of Industrial Exrience with the SST Turbulence Model," Turbulence, Heat and Mass Transfer 4, Begell House, Inc., 2003.
- [17] Shima, E., et al., "On AUSM-Family Scheme for All Speeds with Shock Detection for Carbuncle-Fix," AIAA paper 2009-3544, 2009.
- [18] 菱田学他,"非構造高速流体解析ソルバFaSTARにおける 勾配制限関数,"第42回流力/ANSS講演集,1C10,2010
- [19] Knopp, T., et al.,"A grid and flow adaptive wall-function method for RANS turbulence modelling," Journal of Computational Physics, Vol.220, 2006, pp.19-40.
- [20] Zoltan, http://www.cs.sandia.gov/zoltan/Zoltan.html
- [21] 坂下雅秀他, "LU-SGS右前処理付きGMRES法の高速流 体ソルバFaSTARへの適用," 第42回流力/ANSS講演集, 1C11, 2010.
- [22] Ito, Y., et al., "Improvements in the Reliability and Quality of Unstructured Hybrid Mesh Generation," International Journal for Numerical Methods in Fluids, Vol. 45, Issue 1, May 2004, pp. 79-108.
- [23] Hashimoto, A., et al., "Lift and Drag Prediction Using Automatic Hexahedra Grid Generation Method," AIAA paper 2009-1365, 2009.
- [24] ParaView, http://www.paraview.org/
- [25] 山根敬他, "CFDコード共通化プロジェクトUPACSの現 状," 航空宇宙技術研究所特別資料, NAL-SP-46, 2000, pp. 45-50.
- [26] Cambier, L., et al., "elsA : An Efficient Object-Oriented Solution to CFD Complexity," AIAA paper 2002-0108, 2002.
- [27] Kleb, W. L., "Collaborative Software Development in Support of Fast Adaptive AeroSpace Tools (FAAST)," AIAA paper 2003-3978, 2003.
- [28] 気象庁 Fortran 標準コーディングルール
- http://www.mri-jma.go.jp/Project/mrinpd/coderule.html
- [29] FUN3D F95 Coding Standard
- http://fun3d.larc.nasa.gov/chapter-9.html#f95_coding_standard





図 10 Multigrid 法で求めた圧力分布

