

## [共同研究成果]

# 非構造格子に基づく流体数値計算法の並列化

中橋和博<sup>†</sup>、藤田 健<sup>‡</sup>

### 1. はじめに

「CFDが怒涛のごとく押し寄せてきた」というのは20年近く前に年輩の流体力学研究者から出た言葉である。確かに何百年ものあいだ紙と鉛筆、そして風洞実験で行われてきた流体力学研究にスーパーコンピュータという「飛び道具」を持って乗り込んで来たCFD（Computational Fluid Dynamics）は、今日では流体力学研究で非常に大きなウエイトを占めるまでになっている。その牽引役として航空宇宙分野も重要な役割を担ってきたが、すでに翼や機体形状あるいはエンジン要素の空力設計にCFDは欠くことのできない道具になっている。そして、更に高い性能の航空機を開発するために、より高い精度でより早く結果をだす計算アルゴリズム開発の必要性が一層強くなっている。並列計算機はその要求に応えるための手段であり、かつ、長い歴史の流体力学研究に新たな展開をもたらしてくれるものでもある。

ここでは、CFDのこれまでの進展と近年の状況を簡単に述べるとともに、東北大学情報シナジーセンターとの共同研究として実施したCFDソルバーの並列化について、具体的なアルゴリズムとその結果を紹介する。

### 2. CFDの発展と現状

CFDのこれまでの進展を振り返った場合、いくつかのブレークスルーがあった。70年代初頭に遷音速流れの計算が可能になり、70年代中頃から80年代にかけては境界適合座標の導入や陰的時間積分、高精度解法の開発等で翼型周りの流れの精度良い数値解析が飛躍的に進展した。今日の旅客機はマッハ0.8前後で飛んでいるが、このような音速近くを効率良く飛ぶための翼設計にはCFDは不可欠なツールである。

90年代のCFDは3次元実形状周りの流れの計算を目指した時期とも言えよう。もちろん3次元計算は70年代から行われている。しかし、多くは鈍頭円柱や単独の翼、あるいは翼と胴体程度の簡単な3次元形状の計算が主で、実際の飛行機周りの計算には数ヶ月、時には数年もの作業時間を要していたのも実状である。航空機の3次元形状設計にはとても使えるレベルではなく、CFDはきれいな絵を出すためのColorful Fluid Dynamicsだとの悪口も言われていた。

流れの数値計算には、流れ場を非常に細かな網の目（格子）で覆い、個々の網の目毎に流速なり圧力を求める事を行う。その計算量は特に精度の要求される航空分野では膨大なものであり、70年代から80年代にかけては如何に効率良く計算を行うかが最重要な研究課題であった。そこで用いられたのが先に述べた境界適合座標の格子上での計算法である。網の目が順序よく並んでいるために何百万もの未知数をもった連立方程式でも効率よい計算が可能である。しかしながら、そのような整然と並んだ格子は幾何学的な制約を伴い、2次元では有効だったこの手法も、実際の飛行機全体

---

<sup>†</sup> 東北大学大学院工学研究科航空宇宙工学専攻

<sup>‡</sup> 東北大学大学院工学研究科航空宇宙工学専攻博士課程

形状の3次元計算では格子を作ることに何ヶ月もの時間を費やすこととなった。

90年代は、それまで主流だった境界適合座標格子(構造的格子)に基づく計算法から離れ、実形状を扱うために格子点の並びに構造的でない非構造格子(3次元では4面体セルの集合)を用いる方法へとアルゴリズム研究者の関心が移った。しかしながら、構造的な格子からの脱却には様々な新しい計算アルゴリズムの開発が要求される。3次元空間を何百万もの四面体で隙間無く自動的に埋めるにはどうするか、無秩序に並んだ格子点で流体運動の方程式を如何に効率良く解くか、あるいは航空機設計に必要な計算精度を非構造な格子で得るにはどうするか、等が主要な研究課題であった。

現在、この非構造格子を用いた計算法はかなりのレベルにまで達している。我々も非構造な格子生成法[1-3]や計算時間を大幅に短縮する陰的時間積分法[4]、物体移動を扱うための非構造格子オーバーセット法[5]等の独創的なアルゴリズムの提案を行ってきた。また、それら計算手法を用いて様々な実形状流れ問題に適用している[例えば6-8]。

図1は、航空宇宙技術研究所で現在進められている超音速実験機プロジェクトに関する共同研究の一部である。これは次世代超音速旅客機開発の基礎研究として、CFDで低抵抗な形状を作りだし、それを飛行試験で実証しようというものである。抵抗の少ない形状を生み出すには、翼面上に設計者の希望通りの圧力分布を生み出す形状を求めるなり、あるいは抵抗値を最小化する形状の探索が必要となる。そのためにはCADで定義された形状から素早くCFD計算を行うことが求められる。図のような計算も、10年前は数ヶ月を要していたが、数年前は数週間、そして今日では1日で数値解を得るまでに達した。並列計算機への対応により、更に数時間、数十分に収まるよう計算コードを改良することが今回の目的である。

### 3. 並列計算機への対応

1万分の1のオーダーで抵抗係数を議論する航空機空力設計では、目に見えない微妙な形状変形でも空力性能を大きく変え、それが構造設計、ひいては航空機重量に影響を及ぼす。空力と構造等との厳しい妥協点探索のためにも膨大なシミュレーションが必要となり、数値計算時間の短縮は非常に重要である。

従来、CFDにおける計算アルゴリズムはベクトル計算機を念頭に開発されてきた。そのプログラムの並列化は、しかしながら一様ではない。先に述べた境界適合格子(構造的格子)上でのソルバーの並列化は比較的単純である。プログラム内のDOループを並列処理して行くだけでかなりの並列化効果が得られる。一方、同様な方法で非構造格子(非構造格子)上でのソルバーを並列化してもなかなか並列性能が上がらない。非構造格子(非構造格子)上でのソルバーでは、無秩序に並んだ格子点の相対位置を覚えるために階層的な配列を多用しており、このことが並列処理の性能向上を妨げているようであるが詳しい原因は不明である。

そのため、ここでは計算領域を予め分割し、それぞれの領域を各CPUに処理する領域分割法に基づく並列化プログラムを作成した。領域間はMessage Passing Interface(MPI)ライブラリを用いて情報交換を行う並列化手法である。このような領域分割に基づく並列処理は、そのための大幅なプログラム修正が必要であるが、一旦並列化プログラムができあがると、コンパイラに依存しない汎用性のあるコードともなる。

#### 4. 領域分割法

領域分割法では、最初に計算前処理として計算空間に張られた格子の領域分割を行わなければならない。本研究では、ミネソタ大学で開発されたフリーソフトウェア METIS[9,10]をベースに領域分割プログラムを開発した。図 2 に領域分割のフローチャートを示す。最初に、METIS によりユーザーの設定した分割数で非構造空間格子を分割する。オリジナルの METIS では単一の要素からなる格子が基本となっているが、ここでは四面体やプリズム、ピラミッド要素が含まれるハイブリッド格子も取り扱えるように修正した。次に、領域間の接合面上の節点は複数の領域にまたがって存在するため、最も節点数の少ない領域に存在する節点を”Sending Vertices”と分類し、その節点に対応する他の領域の節点を”Receiving Vertices”とする。ここで”Sending Vertices”は物理量や勾配などの情報を他の領域に送る点で、”Receiving Vertices”は他の領域からそれらの情報を受け取る点である。最後に”Sending Vertices”に分類された節点にオーバーラップする要素を追加し、その時追加された節点を”Receiving Vertices”に分類する。なお、その節点に対応する他の領域に存在する節点は”Sending Vertices”に分類される。

この方法により領域間の節点数および辺数の差が数%程度に抑えられ、CPU 間のロードバランスが整えられることが確認された。

#### 5. 並列非構造格子 CFD ソルバー

並列化のベースとなるソルバーは、セル節点有限体積法に基づく非構造格子 3 次元 Navier-Stokes/Euler ソルバーを用い[4]、各領域の流体計算を別々の CPU に割り当てることで並列実行している。図 3 に情報交換の手順を示す。始めに、”Sending Vertices”にある情報（物理量や勾配）を単一の配列 sbuf に記録し別の PE に送る。sbuf が送られた PE ではその情報を配列 rbuf として受け取り、rbuf の情報を”Receiving Vertices”に割り振る。この方法は多数の節点の情報を 1 つの配列の通信で受け渡しするため、点から点へ情報交換を行うよりも通信のオーバーヘッドを減らす効果がある。なお、このソルバーはベクトル化されているため、キャッシュベースの並列計算機のみならずベクトルベースの並列計算機についても利用することが可能である。

#### 6. 計算精度とスケーラビリティ

計算精度を検証するため、研究室所有の ALPHA クラスタマシンを用いて ONERA M6 翼に対する Euler 計算を行った。この空間格子の節点数は 234,621、四面体数は 1,210,089、辺数は 1,507,152 である。この空間格子を 16 分割した際の格子を図 4 に示す。図 5 に、ONERA M6 翼の 44% 半スパン長における  $C_p$  分布を、並列化されていない非構造 Euler ソルバーおよび実験値と比較する。並列化されていないものと完全に一致しており、並列化による計算精度の影響が無いことを確認した。

次に東北大学情報シナジーセンターのスーパーコンピュータ NEC SX-4 および汎用サーバー NEC TX7/AzusA を用いてスケーラビリティの測定を行った。前者はベクトルベースプロセッサを搭載し、後者はスカラーベースの並列計算機である。

始めに、航空宇宙技術研究所（NAL）が開発を行った超音速ロケット実験機（NEXST-1）に対する Euler 計算を、並列ソルバーを用いて行った。このモデルには

ピトー管やロケットブースターとの取り付け金具、発射台への固定金具など搭載され、実機に忠実な形状となっている(図6参照)。この形状は3次元CADソフトにより定義され[8]、STLファイルを出力し、表面格子生成プログラム Edge Editor[3]および Delaunay 分割法[1]により空間を四面体で離散化した。このような複雑な形状に対しても非構造格子を用いることで容易に格子生成を行える。この非構造空間格子の節点数は 1,016,066、辺数は 6,715,503、四面体要素数は 5,524,311、三角形要素数は 350,254 である。さらにこの空間格子を7つの領域に分割したものを図7に示す。この Euler 計算に必要なメモリサイズは約 2.2GB であり、NEC SX-4 を用いて並列化性能を測定した(図8参照)。十分な並列化性能を達成しているものの、20PE からわずかに頭打ちになっている。全メモリサイズは 1PE の計算と大きく変わらず、32PE の時に 1PE あたりのメモリ使用量が 70MB 程度になってしまうため、十分なベクトル長が確保できず性能を十分発揮していないことが原因である。実際、図9に 1PE あたりの平均ベクトル化率と MFLOPS 値を示すが、32PE の際に平均ベクトル化率が 98% を下回っている。なお、図9のエラーバーは各値の最小値および最大値を示す。

次に、より大規模なスケラビリティの測定のために、図10に示すリージョナルジェット機に対する Navier-Stokes (NS) 計算を行った。この格子では、境界層を十分離散化するため壁面付近をプリズム要素で離散化するハイブリッド格子を用いており、さらに主翼後縁部分に存在するわずかな厚みも再現しているため非常に大きなメモリサイズを要する。空間格子の節点数は 2,180,582、辺要素数は 10,577,008、四面体要素数は 3,839,284、プリズム要素数は 2,943,184、ピラミッド要素数は 27,322 となっており、計算に必要なメモリサイズは約 4GB である。

NEC SX-4 および TX7/AzusA におけるスケラビリティの結果をそれぞれ図11、図12に示す。流体ソルバーは陰解法を用いているため 3000 ステップ程度で収束解を得ることができるが、この 3000 ステップの計算を SX-4 の 1PE で実行すると 3 日かかる。一方、32PE で実行することでわずかに 2 時間半で結果を得ることができる。これらにより、並列非構造格子ソルバーがベクトルベースおよびスカラーベースの並列計算機で優れた並列化性能を達成することが示された。なお、SX-4 の 32PE を用いることで 10GFLOPS もの性能を達成した。

## 7. おわりに

METIS をベースとした領域分割プログラムと、MPI ライブラリにより並列化された非構造 CFD ソルバーを用いた並列非構造格子 CFD 計算システムを構築した。このソルバーを情報シナジーセンター所有の NEC SX-4 および TX7/AzusA を利用し、並列化性能の測定を行った。その結果、ベクトルベース、スカラーベース双方の並列計算機で優れた並列化性能を達成し、計算精度も十分であることが示された。特にベクトルベースの NEC SX-4 で得られた高い並列化性能は重要である。

非構造格子を用いた流体計算法は実形状を容易に扱えることが大きな利点であり、例えば図13のような、表面に 400 程ものディンプルを持ったゴルフボールの空力解析や[11]、図14のような昆虫を忠実に計算機内で再現し[12]、その羽ばたき飛翔を調べるような計算も可能になりつつある。しかし、リアルな形状の再現には膨大な計算量も必要である。今回の並列化ソルバーの開発により、今まではどうも無理であった様々な流体問題にチャレンジして行くことが可能となる。航空機開発においても、

これまでの静的な解析だけでなく、飛行の動的な解析までも視野に入れた数値シミュレーションが始まろうとしている。今後の超大規模な流体数値計算が楽しみである。

## 8. 謝辞

本研究は、東北大学情報シナジーセンターとの共同研究として行われた。SX-4 および TX7/AzusA 上での計算コードの並列化・最適化および実行に際して情報シナジーセンターから適切かつ有益な助言を頂いた。この場を借りて感謝したい。

## 9. 参考文献

- [1] Sharov, D. and Nakahashi, K., "A Boundary Recovery Algorithm for Delaunay Tetrahedral Meshing," 5th International Conference on Numerical Grid Generation in Computational Field Simulation, pp.229-238, 1996.
- [2] Sharov, D. and Nakahashi, K., "Hybrid Prismatic/Tetrahedral Grid Generation for Viscous Flow Applications," AIAA Journal, Vol.36, No.2, pp.157-162, 1998.
- [3] Ito, Y. and Nakahashi, K., "Direct Surface Triangulation Using Stereolithography Data," AIAA Journal, Vol.40, No.2, pp.490-496, 2002.
- [4] Sharov, D. and Nakahashi, K., "Reordering of Hybrid Unstructured Grids for Lower-Upper Symmetric Gauss-Seidel Computations," AIAA Journal, Vol.36, No.3, pp. 484-486, 1998.
- [5] Nakahashi, K., Togashi, F., Sharov, D., "An Intergrid-Boundary Definition Method for Overset Unstructured Grid Approach," AIAA Journal, Vol.38, No.11, pp.2077-2084, 2000.
- [6] Nakahashi, K., "Progress in Unstructured- Grid CFD", *Proc. 1st ICCFD, Computational Fluid Dynamics 2000*, Springer, pp.3-13, 2000.
- [7] Murayama, M., Nakahashi, K., Sawada, K., "Simulation of Vortex Breakdown Using Adaptive Grid Refinement with Vortex-Center Identification," AIAA Journal, Vol.39, No.7, 1305-1312, July 2001.
- [8] Fujita T., Ito Y., Nakahashi K. and Iwamiya T., "Computational Fluid Dynamics Evaluation of National Aerospace Laboratory Experimental Supersonic Airplane in Ascent," *Journal of Aircraft*, Vol. 39, No. 2, pp. 359-364, 2002.
- [9] G. Karypis and V. Kummar, "A fast and high quality multilevel scheme for partitioning irregular graphs", Technical Report 95-035, University of Minnesota, 1995. A short version appears in Intl. Conf on Parallel Processing 1995.
- [10] <http://www-users.cs.umn.edu/~karypis/>
- [11] Kato T., Fujita T., Ito Y., Nakahashi K. and Kohama Y., "Computational Analysis of Separated Flow around a Golf Ball Using Unstructured Grid CFD," AIAA Paper 2001-2569, 15th AIAA Computational Fluid Dynamics Conference, 2001.
- [12] Togashi, F., Ito, Y., Murayama, M., Nakahashi, K. and Kato, T., "Flow Simulation of Flapping Wings of an Insect Using Overset Unstructured Grid," AIAA 2001-2619, 15th AIAA Computational Fluid Dynamics Conference, 2, 2001.

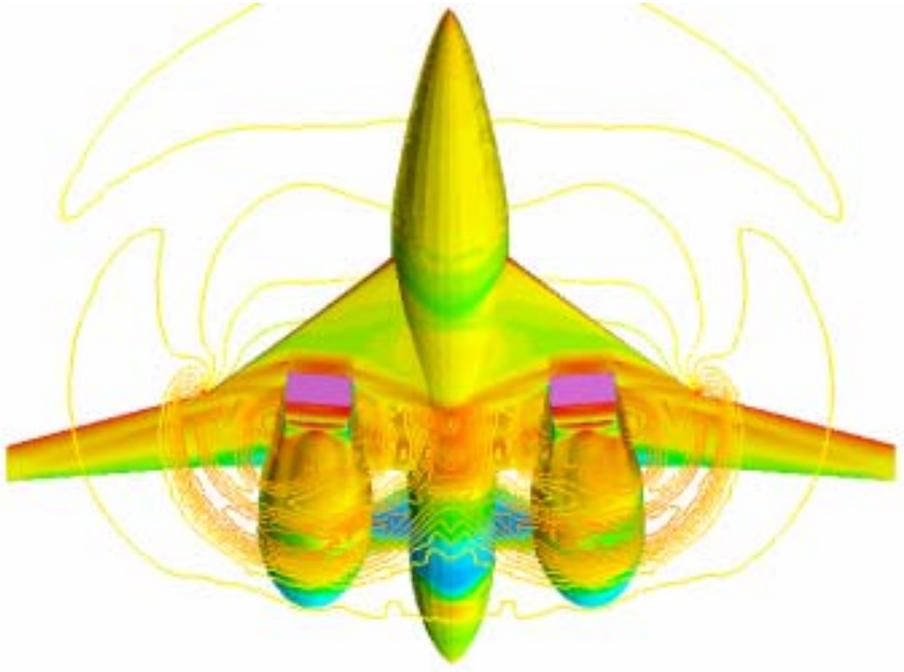


Fig.1 Computed pressure distribution around the NAL experimental supersonic airplane NEXST-2.

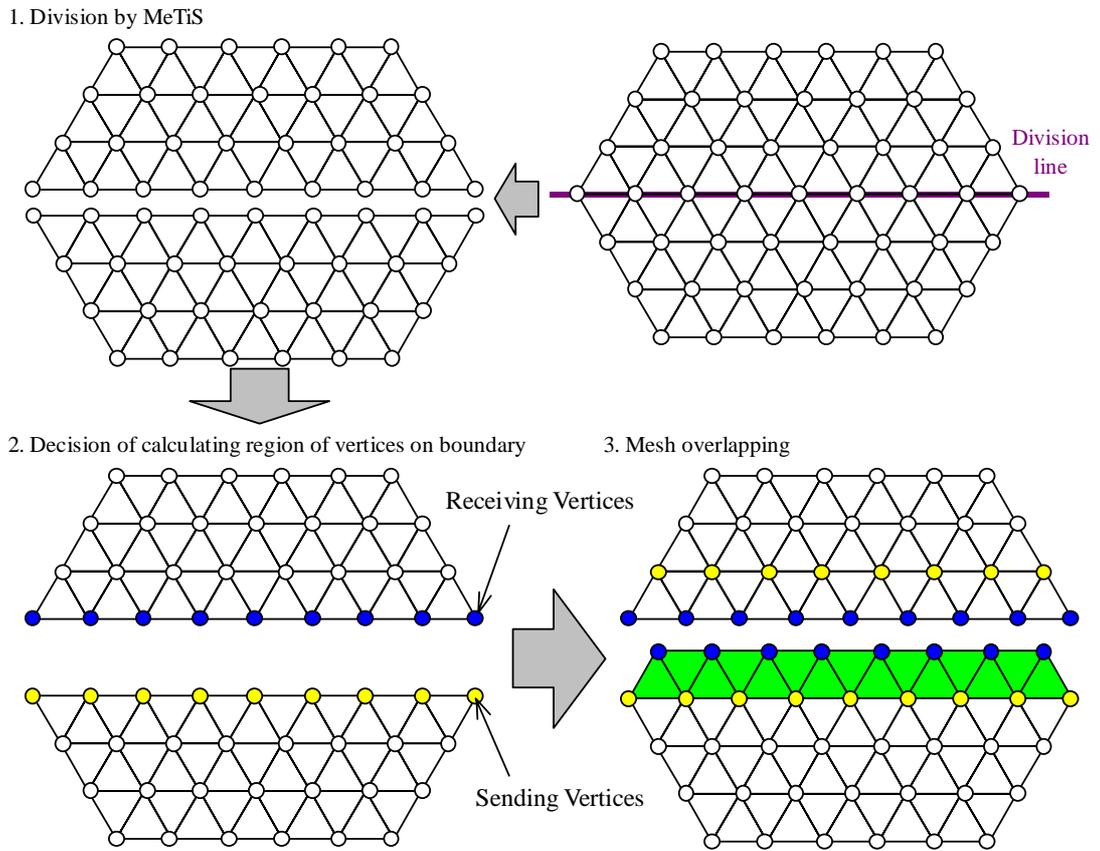


Fig. 2 Flowchart of division of unstructured grid

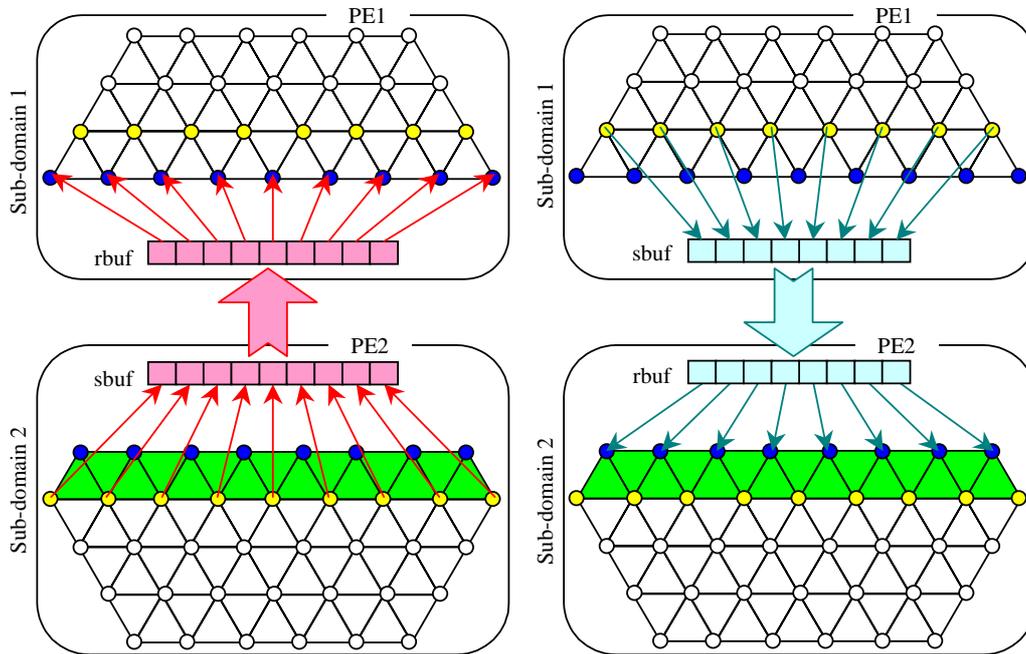


Fig. 3 Send/Receive data between two sub-domains

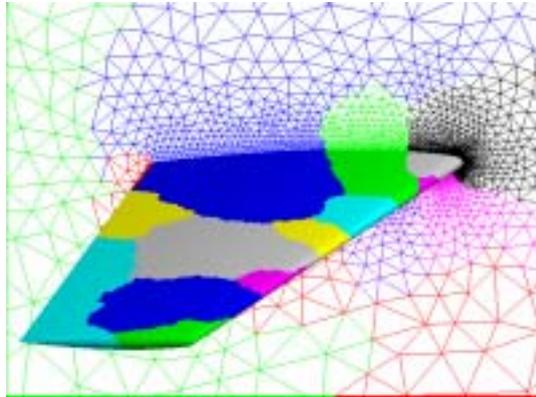


Fig. 4 Partitioned grid of ONERA-M6 wing

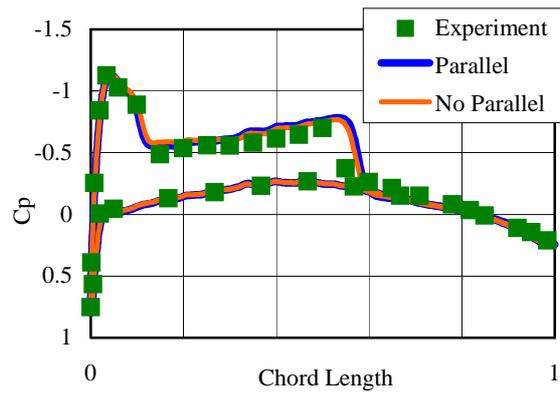


Fig. 5 Comparison of Cp distribution at 44% semi-span

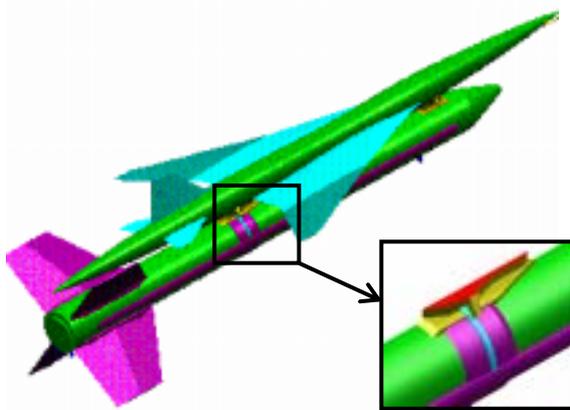


Fig.6 NAL NEXST-1 precise model

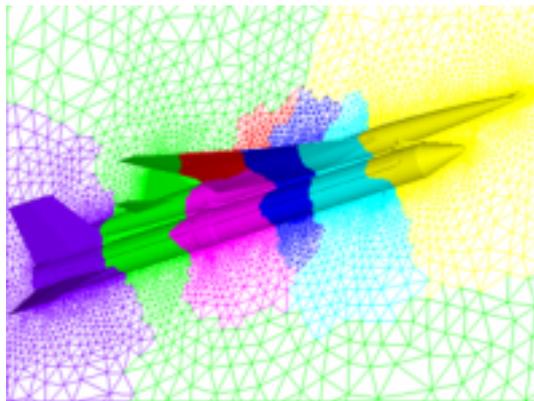


Fig.7 Partitioned grid of NAL NEXST-1

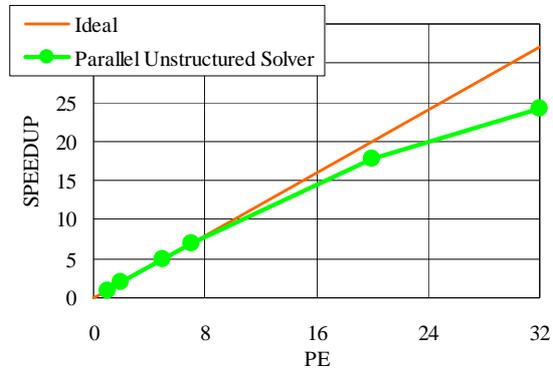


Fig. 8 Scalability result 1 on NEC SX-4

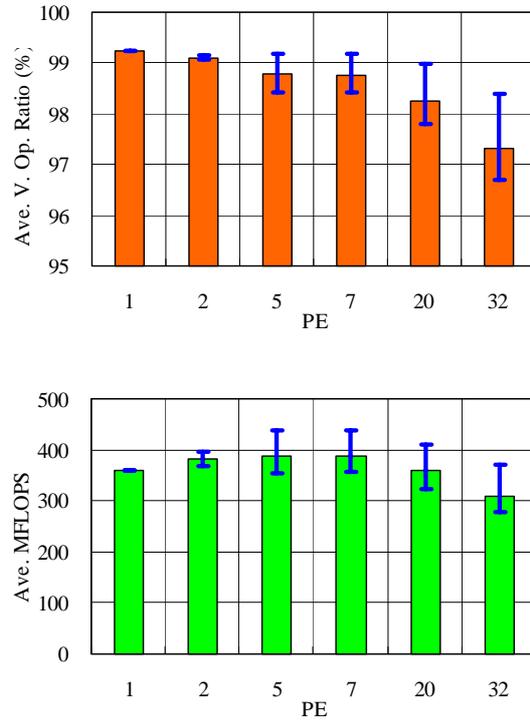


Fig. 9 Average vector operation ratio and average MFLOPS per PE

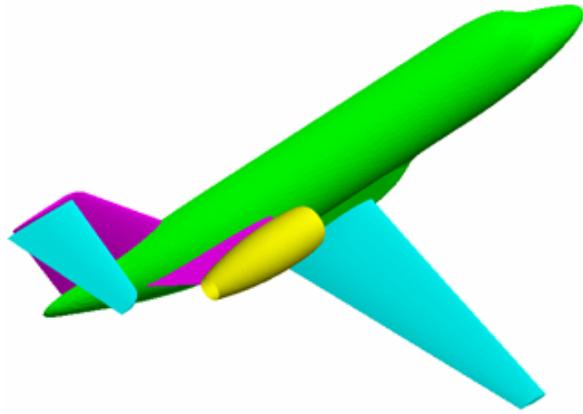


Fig. 10 Regional jet airplane

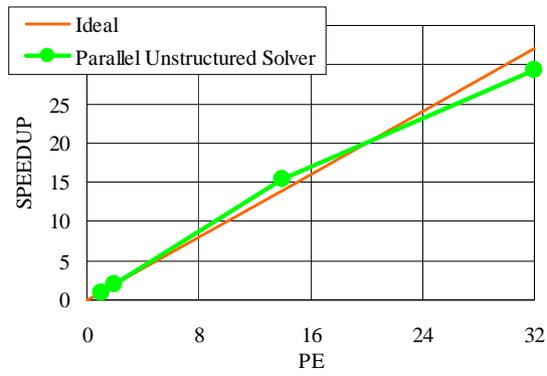


Fig. 11 Scalability result 2 on NEC SX-4

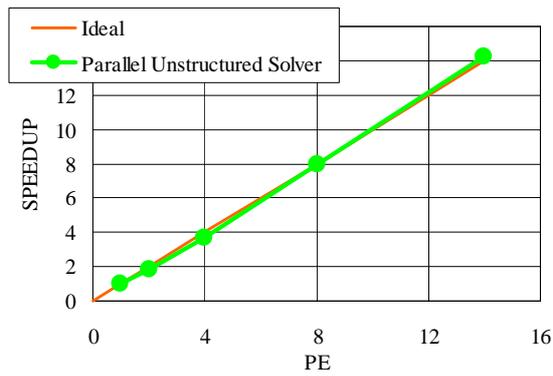


Fig. 12 Scalability result 2 on NEC TX-7/AzusaA

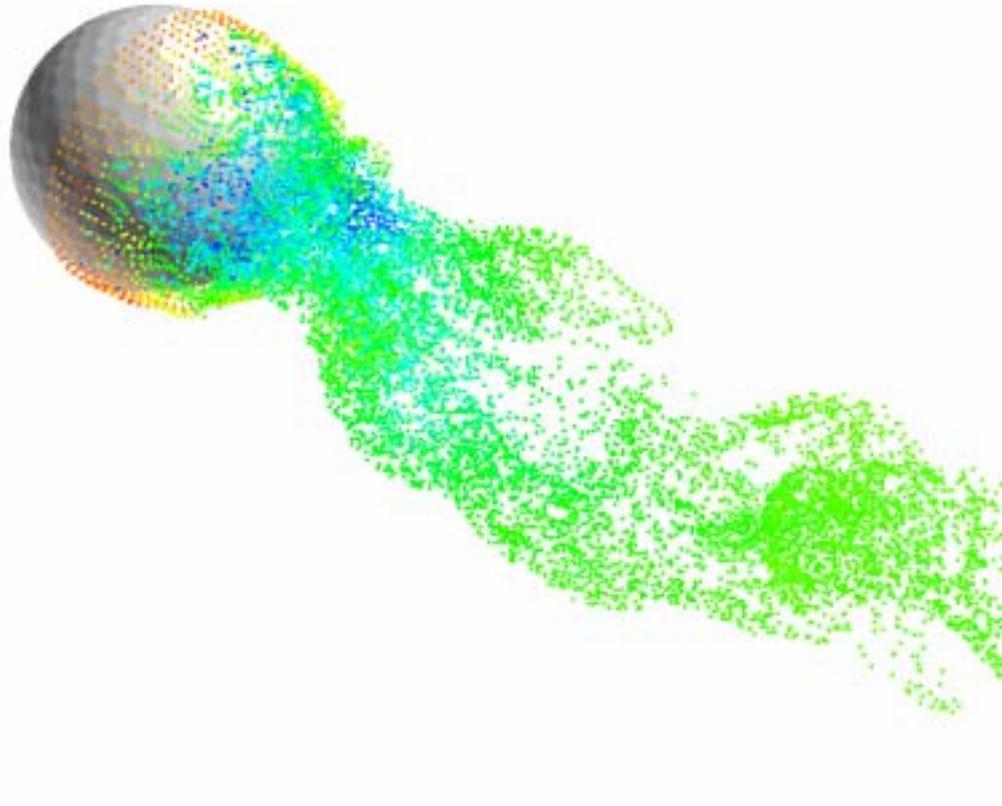


Fig.13 Flow simulation around a golf ball.

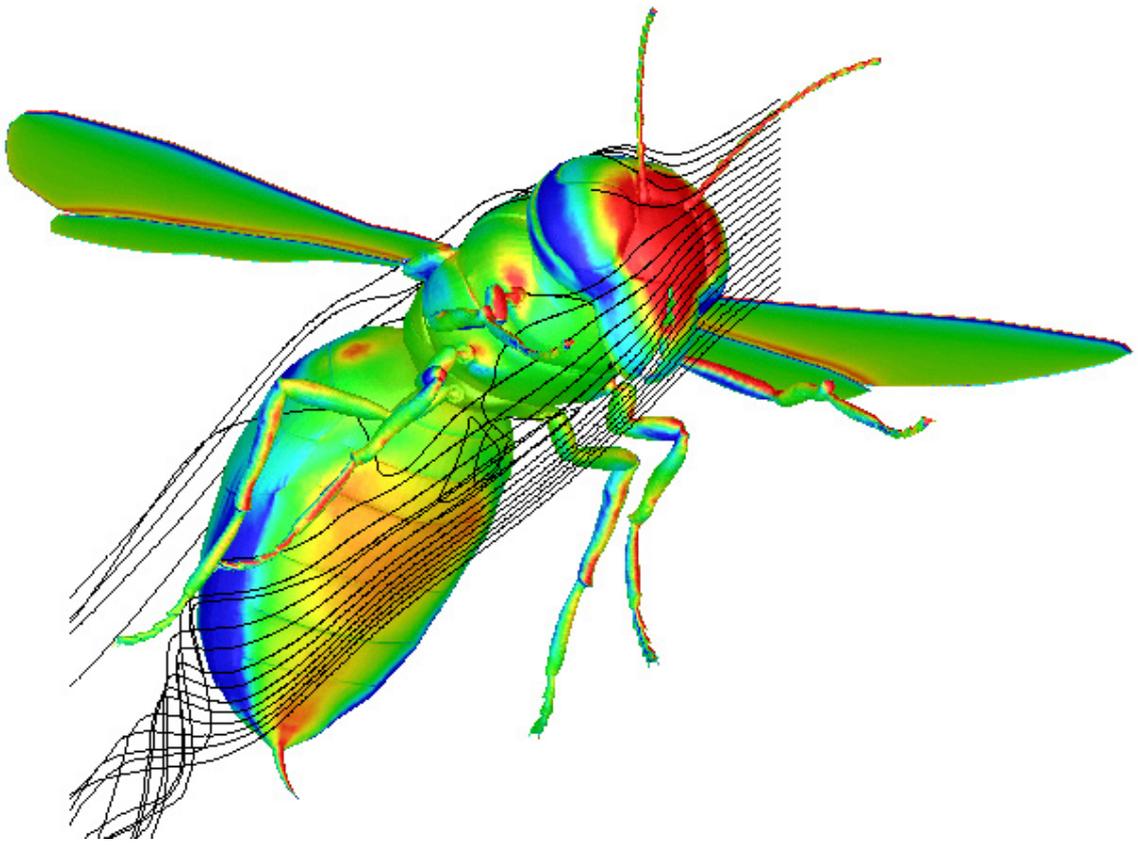


Fig.14 Flow simulation around a hornet.