

計算機の進歩と大規模流体シミュレーションの進展



加藤 千幸
Chisachi Kato

東京大学生産技術研究所 教授
革新的シミュレーション研究センター長
[専門分野] 流体機械・流体音・数値解析, 他

スパコンの性能は過去50年以上にわたり、ハードウェア的なさまざまな技術革新により、3年間で約10倍、10年間で約1,000倍という割合で向上してきています。このような計算機の性能向上に伴い、従来よりも桁違いに大規模なシミュレーションを実施することが可能になっており、それにより、モノづくり分野においても技術革新が期待されています。ここでは、空気や水の流れなどの数値シミュレーションを例にとり、大規模な流体シミュレーションを実現するために必要となるさまざまな工夫についてご説明するとともに、自動車や船舶のまわりの流れのシミュレーションなど、実際の実証計算事例をご紹介します。

はじめに

原子の運動や電子の挙動、物体の運動、構造物の振動、空気や水の流れなどはその挙動を記述する基礎方程式が確立されていますが、工学的に重要となる場に対して、これらの基礎方程式の解を理論的に求めることはほとんどの場合はできません。一方、計算機を駆使してこれらの基礎方程式の近似解を求める計算科学シミュレーションに関しては1960年代から研究が行われ、1980年代から構造解析や流体解析などの計算科学シミュレーションの産業応用も進んでいます。

さて、スパコンの性能は過去50年以上にわたり、ハードウェア的なさまざまな技術革新により、3年間で約10倍、10年間で約1,000倍という割合で向上してきています。2012年9月に

スーパーコンピュータ京が本格的な運用を開始しましたが、京の演算性能は、構造解析や流体解析が産業界の研究開発や製品設計に応用され始めた当時のスパコンの性能と比べると10億倍以上に向上しています。スパコンの性能は2020年頃まではこのようなペースで向上していくことが見込まれています。欧米各国や中国でもスパコンによる計算科学シミュレーションは国家基幹技術の一つとして位置づけられており、ハードウェアおよびソフトウェアの開発競争にしのぎが削られていて、我が国でも京の100倍の実効性能を有する次のスパコン(ポスト京)の開発プロジェクトが一昨年5月に正式にスタートしています。

京の登場により、従来よりも桁違いに大規模・高度な計算科学シミュレ

ーションが多くの分野で可能になり、そのような計算科学シミュレーションを産業応用することによる技術革新に関しても新たな可能性が見えてきています。ここでは、筆者の専門である流体の数値解析を例にとり、大規模な流体シミュレーションを実現するためにどのような工夫がなされているのかということと、実際に京を利用して実施した大規模な流体シミュレーションの産業応用例をご紹介します。

大規模流体シミュレーションの実現

一般に計算科学シミュレーションでは、応力、歪、流速、流れの圧力、原子や分子の位置、電子の密度などの求めたい変数を基礎方程式の近似式から計算して求めます。たとえば、流体解

析では、計算する領域を要素やセルとよばれる微小な領域に分割し、各要素やセルの流速や圧力に関して、基礎方程式である連続の式とナビエ・ストークスの式の近似方程式を立てます。計算領域内の全ての要素やセルに対する近似方程式を連立させてその解を求めることにより、流速や圧力などを計算することができます。要素やセルの大きさはできるだけ小さい方が近似の精度が上がり、精度の高い近似解を得ることができますが、解くべき方程式の数が増え、計算規模が大きくなってしまいます。これまで実用的な流体解析に用いられていた要素やセルの数は多くても数千万程度でしたが、最先端のスパコンの演算能力を駆使すれば数百億要素を用いた実用的な数値シミュレーションも可能になっています。ただし、このような大規模計算を実現するためにはさまざまな工夫が必要になります。

まず、流体解析を実施するためには、計算したい領域を微小な要素やセルに分割する必要があります。この作業はメッシュ分割とよばれ、オペレーターがモニターを見ながら、CADデータなどの入力データから手作業で計算メッシュを作成していました。しかし、このような方法では最大でも数千万要素のメッシュまでしか作成できません。この問題の解決策としてはいくつかの方法が考えられますが、ここでは二つの方法をご紹介します。一つはメッシュの細分化を利用する方法です。この方法では、従来手法により数千万要素の初期メッシュを生成しまして、ひとまずそのようなメッシュで解析を実施します。次に、解析精度を向上させるために、並列計算を実行している最中にメッシュの細分化を自動的に実施

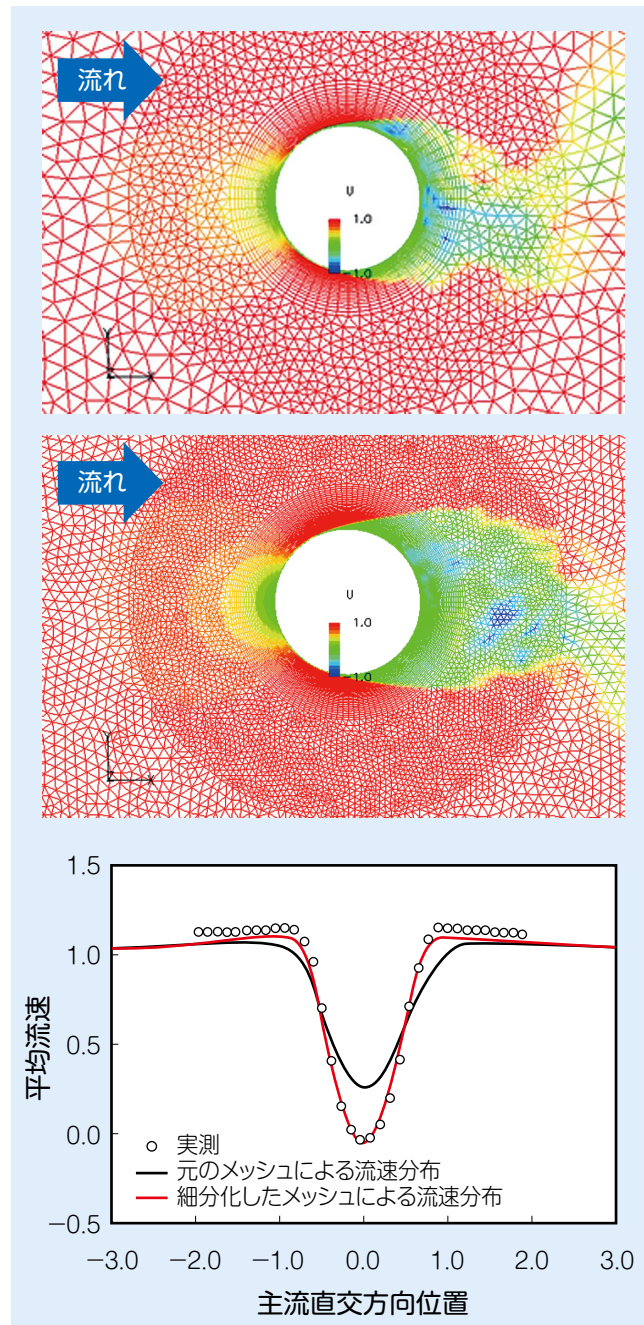


図1 メッシュの自動細分化を利用した計算例(上図：元のメッシュによる流速分布, 中図：細分化したメッシュによる流速分布, 下図：円柱背後の流速分布の実験との比較)

します。必要な回数だけメッシュの細分化を実施することにより、必要となる解像度の計算を実現することができます。その際、CADデータも参照しながら細分化処理を実施することにより、解像度だけでなく、形状の再現性も同時に向上させることが可能になります。

もう一つの方法はボクセルメッシュとよばれる方法です。この方法では、格子は直交格子しか用いることができませんが、CADデータから直接大規模な解析格子を作成できます。流体計算では壁面近傍の格子を細かくする必要がありますから、壁面近傍では自動

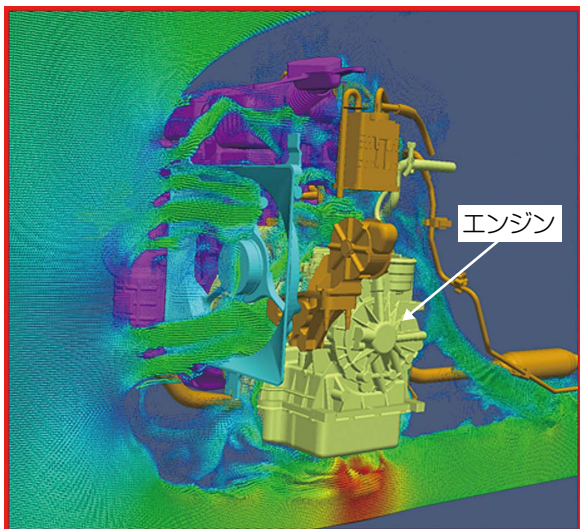


図2 ボクセルメッシュによるエンジンルーム内の気流の計算例

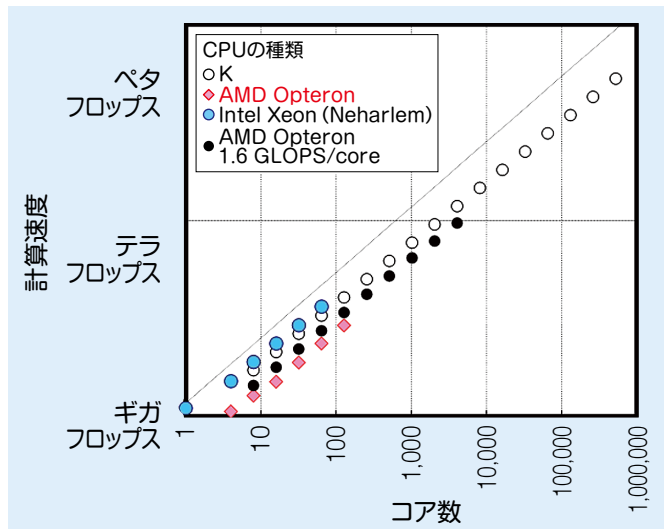


図3 FrontFlow/blue (FFB) の並列計算速度の測定結果

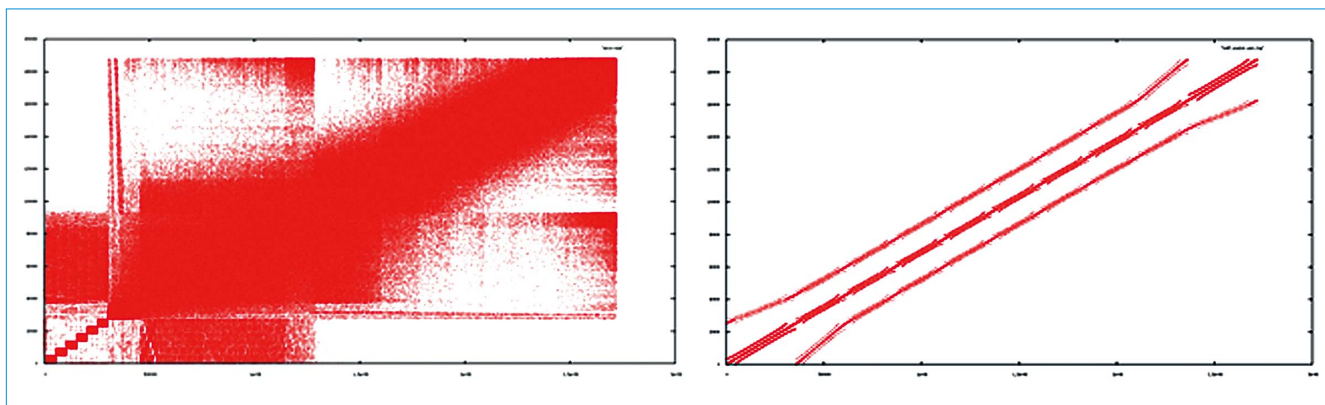


図4 FrontFlow/blue (FFB) の最適化の一例。

図中の赤点は係数行列の位置を示します。データの並び替えにより、広範囲に広がっていたデータ(左図)がある領域に集中できている(右図)ことがわかります。

的に格子が細くなるようにします。また、直交メッシュだと曲率を持った表面はぎざぎざの形状になってしまいますが、直交メッシュで滑らかな曲面形状を表現する方法もいくつか提案されています。格子の自動細分化を利用した計算例とボクセルメッシュを利用した計算例をそれぞれ図1と図2に示します。

演算コア

たとえば、京には8個の演算コアを持っているCPUが約8万個搭載されています。

さて、現在のスパコンは多くのCPUで構成されており、また、CPUの中に演算コアとよばれる計算ユニットが多数含まれています(参照)。大規模な流体シミュレーションを実現するためにはこのような計算機の演算性能を発揮できるようにするための工夫も必要となります。

多数のCPUを同時に使用するためには並列計算を実施する必要があります。流体シミュレーションでは通常は計算領域全体を複数のサブ領域に分割し、各CPUがそれぞれのサブ領域の

計算を担当します。このような計算方法は領域分割計算とよばれています。領域分割計算では、インターコネクトとよばれる通信装置により境界上にあるデータを隣接するサブ領域間で転送する必要があります。インターコネクトの通信速度は一般的なメモリーの読み書きの速度に比べて一桁以上遅いので、プログラミングするには通信による遅延が発生しないように工夫する必要があります。筆者らが開発している流体解析プログラム(FrontFlow/blue)に関して、CPUの数を増やして

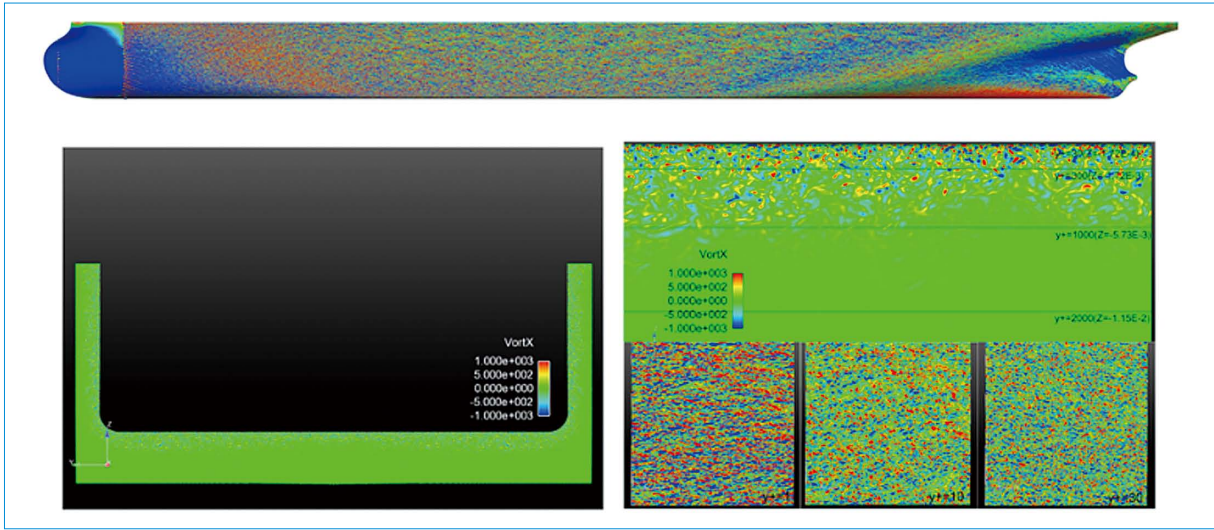


図5 船体周りの流れの直接計算の例

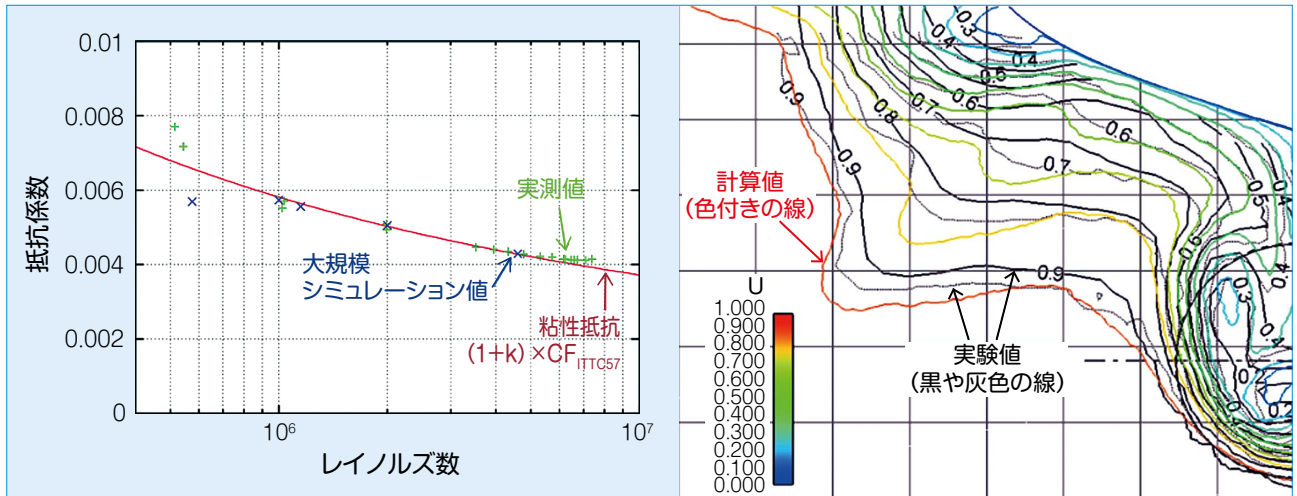


図6 推進抵抗(左)とプロペラ面の流速分布(右)の実験値との比較

いった場合にどのように計算速度が向上するかを調べた結果を図3に示しますが、CPUの数にほぼ比例して計算速度が向上していることがわかります。

CPUの中の演算器を使うためには、メモリーやキャッシュとよばれているデータが格納されている領域から、演算器に直結されているレジスターとよばれる部分にデータを移動したり、逆に、計算された結果をレジスターからキャッシュやメモリーに格納したりす

る必要があります。このようなデータの移動を高速に行わなければ現在のCPUの高い性能を発揮させることができません。このようなデータの移動を高速に行うためのさまざまな工夫も必要になります。このような工夫の一例として、データの並び替えを実施した例を図4に示します。詳細な説明は割愛しますが、このような工夫により2倍以上の計算速度の向上が図られています。

大規模流体シミュレーションの産業応用例

図5は約320億要素を用いた、船体周り流れの大規模流体シミュレーションの例^{1),2)}であり、京の2万CPUを用いて計算しました。流れの中には乱流渦といって非常に小さい渦が存在し、従来はこのような渦の効果をモデル化して計算していたため、予測精度に限界がありました。このシミュレーションでは全ての渦の運動を計算すること

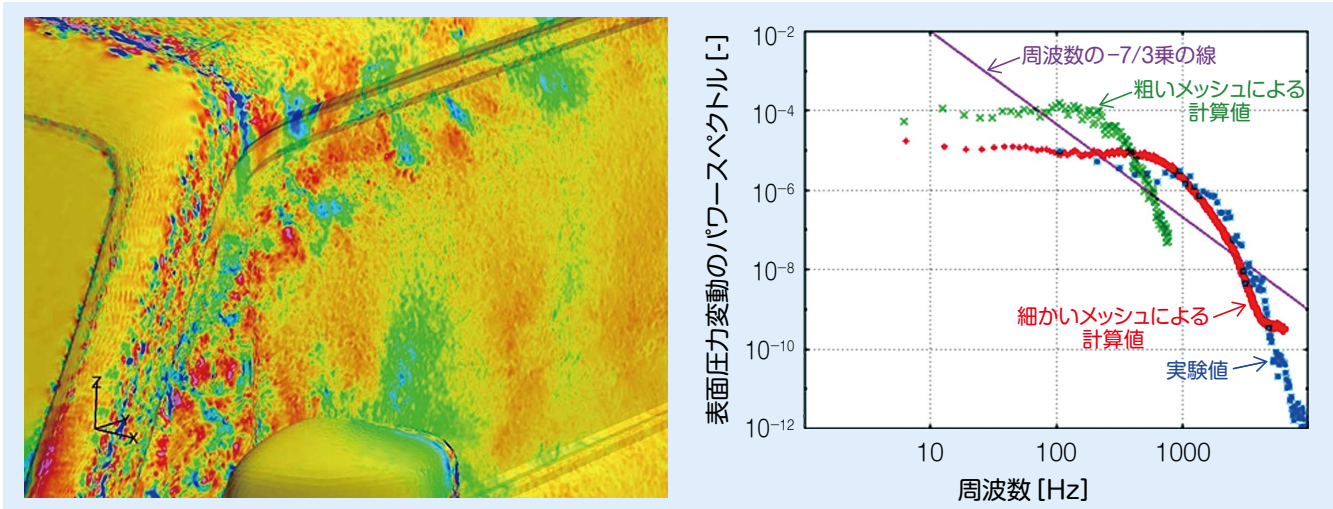


図7 Aピラー（運転席と助手席の斜め前にある柱）まわりの瞬時の渦度の分布（左）と車体表面の圧力変動スペクトルの実験値との比較（右）

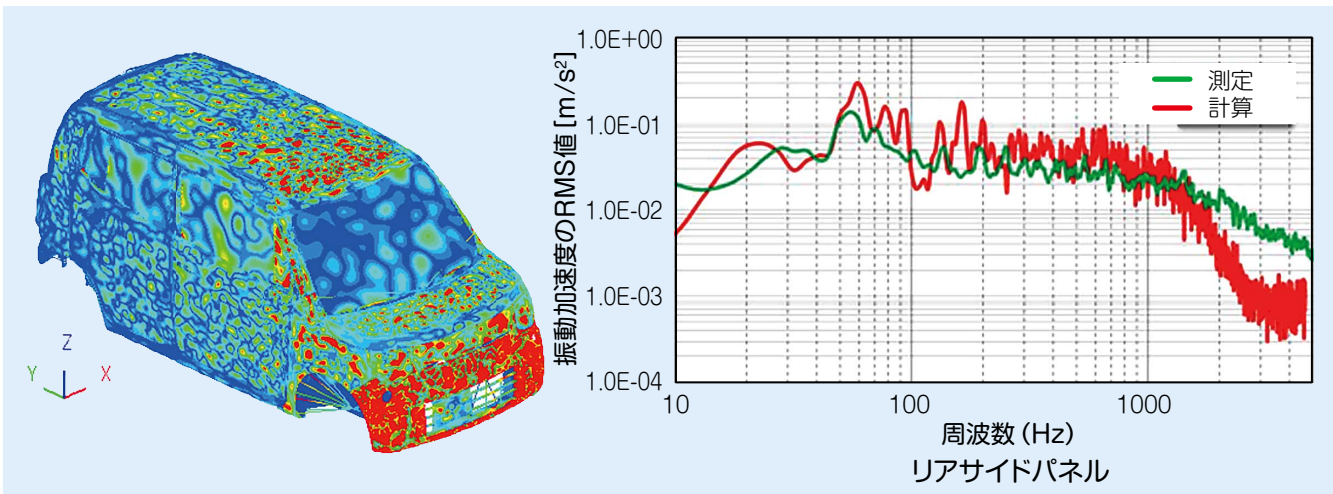


図8 車体の振動解析結果（左）と振動加速度の周波数スペクトルの実験値との比較（右）

が可能になり、図6に示すように、推進抵抗やプロペラ面における速度分布とともに実験値を良く再現する結果が得られています。このような大規模解析の実現により、船舶の曳航水槽試験を始めとして、自動車の風洞試験、流体機械の性能・騒音試験など、さまざまな試験が大規模な数値シミュレーションにより代替できる可能性が見えてきています。このような試験をシミュレーションにより完全に代替することが可能になれば試作をする必要が無く

なり、開発期間が飛躍的に短縮されることが期待されています。

大規模な流体解析では流れの中の微細な渦の運動まで計算するため、高周波数の流れの変動まで高精度に予測できます。このため、流体騒音解析や流体構造連成解析を飛躍的に高度化することも期待されています。このような解析の一例として、自動車の車室内騒音の予測例を図7から図9に示します³⁾。この解析では、まず騒音源として車両表面の圧力変動を流体解析により求め

(図7)、次にボディーの振動伝播を構造解析により求めます(図8)。最後に、振動解析から求めたボディーの内表面の振動速度を音響解析の境界条件(粒子速度)として与え、車室内の音場を求めます(図9)。流体解析に用いた要素数は約400億であり、振動解析の自由度は約1,200万です。各解析結果は実験値と良く一致しており、このような解析が実用化されれば、設計時に車室内騒音の評価が可能となり、車両の開発期間の短縮が期待されています。

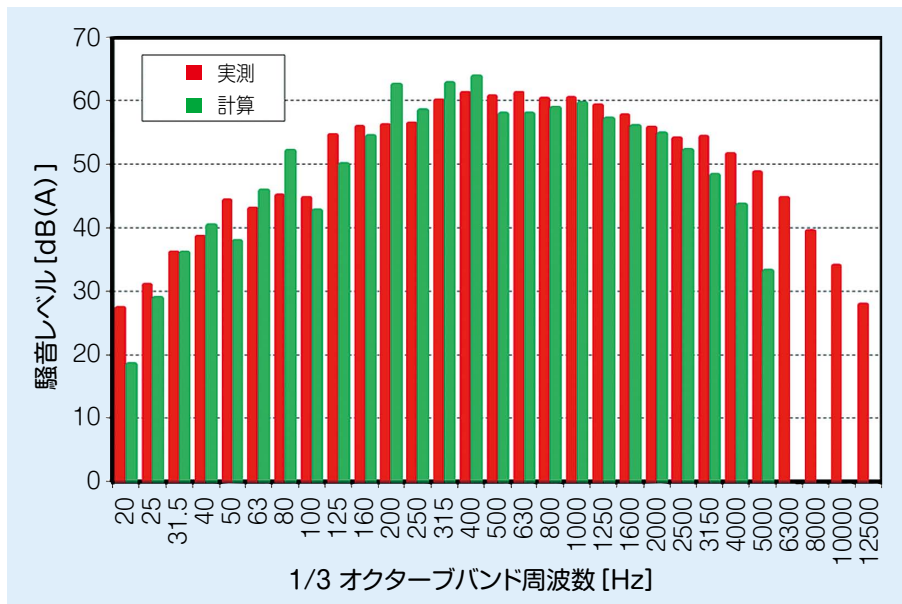


図9 運転者位置における騒音スペクトルの実験値との比較

おわりに

今から5年経てば京の100倍の実効性能を有するポスト京コンピューターが稼働を開始することになっています。ポスト京コンピューターの計算性能は計算機シミュレーションが産業に応用され始めた当初と比較するとなんと1兆倍も向上します。このような速度の向上はハードウェア的なさまざまな技術革新の成果として成されてきたものですが、ソフトウェア側でも計算機の性能を引き出すためのいろいろな工夫が必要になってきています。本稿ではその一端をご説明するとともに、大規模流体シミュレーションの産業応用事例をご紹介します。

現在、京を用いて大規模数値シミュレーションの実証研究がさかんに行われており、ここでご紹介したような大規模流体シミュレーションも数年後には実際の設計・開発の現場で実用化されていることが期待されています。しかし、このような期待を現実のもの

し、スパコンによるシミュレーションにより我が国の産業競争力の強化を図るためには解決すべき課題も山積されています。大規模数値シミュレーションの産業応用に関する明確なビジョンを描き、産学が連携してその実現のための課題を解決していくことが求められています。

最後に、エンジンルーム内の気流の解析結果は理化学研究所計算科学研究機構の小野謙二博士の計算結果です。また、船体まわりの流れの大規模解析は東京大学と一般財団法人日本造船技術センターとの共同研究において得られた成果から掲載しました。車内騒音の解析事例は、東京大学、豊橋技術科学大学、ならびに株式会社スズキとの共同研究の成果から掲載しました。また、これらの共同研究は文部科学省高性能汎用計算機高度利用事業費補助金による「HPCI戦略プログラム」分野4「次世代ものづくり」の一環として京

コンピューターを利用して実施されたものです。それぞれここに記して謝意を表します。[RRR]

文献

- 1) Nishikawa, T., Yamade, Y., Sakuma, M., and Kato, C.: "Application of Fully-resolved Large Eddy Simulation to KVLCC2 - Bare Hull Double Model at Model Ship Reynolds Number -", 日本船舶海洋工学会論文誌, Vol.16, pp.1-9, 2012
- 2) Nishikawa, T., Yamade, Y., Sakuma, M., and Kato, C.: "Fully Resolved Large Eddy Simulation as an Alternative to Towing Tank Resistance Tests-32 Billion Cells Computation on K computer", 16th Numerical Towing Tank Symposium (NuTTS'13), Duisburg, Germany, 2013
- 3) 飯田明由, 加藤千幸, 他, "空力・構造振動・音響連成解析による自動車車室内騒音の予測", 第27回数値流体力学シンポジウム, 東京, 2013