

大規模格子ボルツマン法流れソルバーの ベンチマークテスト

山出吉伸ⁱ, 加藤千幸ⁱⁱ, 飯田明由ⁱⁱⁱ

Benchmark tests of Flow solver based on Lattice Boltzmann Method.

Yoshinobu YAMADE, Chisachi KATO, Akiyoshi IIDA

格子ボルツマン法に基づく流体解析ソルバーFFXを開発している。FFXはスーパーコンピュータで高速に動作することが確認され、また、任意の複雑形状に対し完全自動に計算格子を作成できる特長を有している。本稿では、演算性能に関するベンチマークテストに加え、一様等方性乱流、球まわり流れに関する精度検証計算の結果を報告する。

(キーワード): 格子ボルツマン法, Large Eddy Simulation, ベンチマークテスト, 一様等方性乱流, 球まわり流れ

1 はじめに

現在、ものづくりの様々な分野では、流体解析ソフトウェアを用いた製品の性能や信頼性の評価が日常的に行われている。市販の流体解析ソフトウェアによる計算の大半は乱流中の微小な渦の運動による運動量や熱等の輸送をモデル化する Reynolds Averaged Navier-Stokes (RANS) に基づいているが、RANSは時間平均モデルに基づいているため、非定常流れを高精度に予測することは困難である。筆者の一人である加藤らは乱流現象を高精度に予測できる Large Eddy Simulation (LES) をベースとする有限要素法流体解析システム FrontFlow/blue (以下、FFB) を開発し^{1,2)}、これをターボ機械、船舶、車等の流れの解析に適用してきた³⁻¹¹⁾。これらの解析により、LESにより乱流現象を高精度に予測することが種々の工学的問題に対して有用であることが実証されたが、同時に、上記の解析技術をものづくりの現場に本格的に普及させるためには、製品の複雑な形状に対し、高速かつロバストに計算格子を作成する技術の確立が必須であることが確認された。

格子ボルツマン法 (Lattice Boltzmann Method, 以下 LBM) は直交等間隔格子に定義される、離散化され

た速度分布関数の時間発展を計算することにより、流れを計算する手法である。直交等間隔格子を用いているため、計算格子作成がきわめて容易であることが特長のひとつである。筆者らは、上記した計算格子作成に関する課題を抜本的に解決するため、LBMをベースとし、FFBの開発および実証で培った LES による乱流解析技術を組み合わせた流体解析システム FFX を開発している。本稿では、スーパーコンピュータ富岳における FFX のベンチマークテスト結果を報告する。

2 数値計算手法

LBMでは直交格子上に定義された粒子の分布関数の時間発展を計算する。密度、速度等のマクロ変数は分布関数を積分することにより計算できる。各粒子の速度は、速度と時間刻みの積が格子幅になるように定義される。したがって、LBMでは、ある時刻ある格子に存在する粒子は、次の時間ステップでは隣の格子に移動する。このため、対流や伝播現象を正確に予測することができる。粒子モデルとして、3次元の場合、自分の点を含め15点、19点あるいは27点の隣接点に対応した速度成分の分布関数を定義する

ⁱ サイエンスソリューション部 社会インフラチーム 課長

ⁱⁱ 東京大学生産技術研究所

ⁱⁱⁱ 豊橋技術科学大学

選択肢があり，これらをそれぞれ D3Q15, D3Q19, D3Q27 と称する．本システムでは D3Q15 および D3Q27 を採用している．

分布関数 $f_i(t, x_\alpha)$ の時間発展は粒子の移動（以降，並進と称する）および衝突で表される．衝突は格子における分布関数の変化を介して粒子間の密度，運動量およびエネルギーの交換を表す．分布関数の時間発展を記述する方程式を格子ボルツマン方程式という．一般に広く使われている衝突項を単純化した離散化 BGK（Bhatnagar-Gross-Krook）方程式を以下に示す．

$$f_i(t + \Delta t, x_\alpha + c_{i,\alpha}\Delta t) = f_i(t, x_\alpha) - \frac{1}{\tau} [f_i(t, x_\alpha) - f_i^{eq}(t, x_\alpha)]$$

右辺第一項は並進項であり，時刻 t ，位置 x_α における分布関数は次の時間ステップ $t + \Delta t$ には，隣の格子点 $x_\alpha + c_{i,\alpha}\Delta t$ にコピーされることを表している．第2項は衝突項であり， τ は緩和時間， f_i^{eq} は平衡分布関数である．FFX では，各粒子成分の衝突項を各粒子の非平衡成分で表す Single Relaxation Time (SRT)¹²および，分布関数をモーメントに変換し，モーメント空間において衝突を記述する Multi Relaxation Time (MRT)¹³を実装している．

Sub Grid Scale(SGS)モデルには，Standard Smagorinsky Model (SSM)および Wall-adapted local eddy-viscosity (WALE)¹⁴を実装している．SSM では壁面近傍で渦粘性係数を過大評価する課題がある．Dynamic Smagorinsky Model (DSM)¹⁵を適用すればこの課題が解消されるが，DSM では演算コストが大きく，特にグリッドあたり計算ステップあたりの演算コストが小さい LBM（演算回数は数百回/GRID/STEP）に，DSM を適用するのは計算コストの観点から難しい．一方，WALE は，壁面近傍で渦粘性が過大評価されることはなく，また，渦粘性係数が局所の速度場から計算されるため，DSM のように平均処理が必要ないため計算コストが低い利点がある．

前述した通り，本研究の目的は，実製品を対象とした LES 解析における計算格子作成のコストを抜本的に低減することにある．これを実現するため，本システムは計算実行時に計算格子を自動作成する機能を具備している．本稿では割愛するが，車両等，複雑形状を含む計算対象に対して，計算実行時に高速かつ自動に計算格子を作成できることを確認している．

3 ベンチマークテスト

3.1 Weak Scale ベンチマークテスト

富岳における，ノードあたり 4,300 万格子を用いた FFX の Weak Scale ベンチマークテストの結果を図 1 に示す．最大で富岳の 32,768 ノードを用いて，4.4 PFLOPS を達成し，1.4 兆グリッドを用いた計算を 1 時間ステップあたり 0.08 秒で計算できることを確認している．LBM は陽解法であり時間刻みが小さく，時間ステップ数が長くなるが，典型的な時間ステップ数は 100 万ステップ程度であるため，22 時間程度で計算できる．

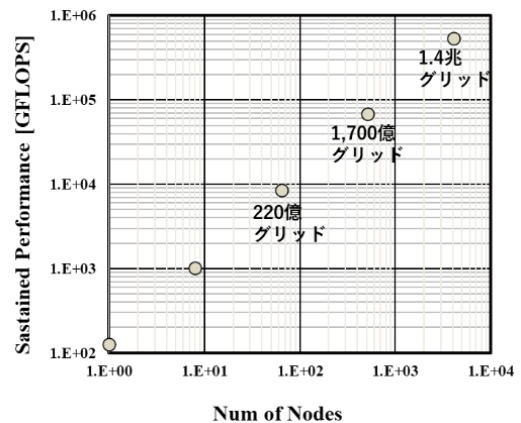


図 1 富岳上で実施した weak scale ベンチマークテスト

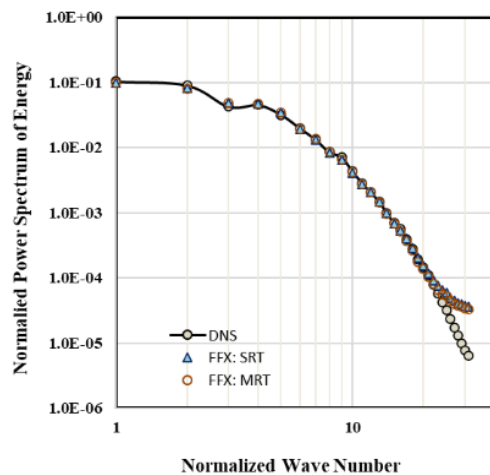


図 2 一様等方性乱流におけるエネルギースペクトルの比較

3.2 一様等方性乱流

壁面境界条件の影響のない乱流の予測精度の検証のため、一様等方性乱流の解析を実施した。初期流れにおける速度の RMS および基準長さ（計算領域× 2π ）を基準とするレイノルズ数は 121 である。解析領域は立方体とし、3 方向に周期境界を与えた。初期流れ場として、棚橋 16)らが実施した DNS 解析と同じ初期条件を用いた。SGS モデルは用いていない。粒子モデルは D3Q27 を用いたが、D3Q15 でも同等の結果が得られることを確認している。1 方向あたりの格子数は 64 とした。図 2 にエネルギースペクトルの比較、図 3 に第二不変量の等値面により可視化した乱流渦構造を示す。エネルギースペクトルは、FFX の SRT および MRT による計算結果と、棚橋らのスペクトル法による DNS 解析結果を比較している。FFX によって計算されたエネルギースペクトルはスペクトル法による DNS の結果と概ね一致しており、DNS と同等の予測精度があることを確認した。

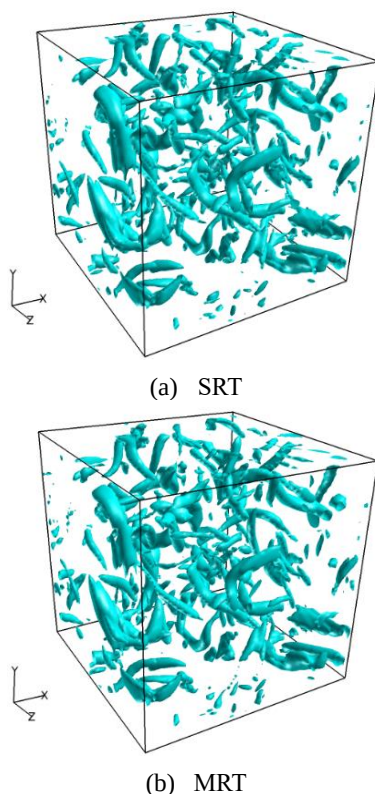


図 3 一様等方性乱流の渦構造の可視化結果

3.3 球まわり流れ

ブラフボディまわり流れの予測精度の検証のため、球の直径 D および主流速度を基準とするレイノルズ数が 10^4 , 2.5×10^4 , 5×10^4 , 10^5 , 3×10^5 , 4×10^5 の 6 通りの球まわり流れの LES 解析を実施した。計算領域は主流方向 (X 方向) に $40D$ 、残る 2 方向に $20D$ の長さをもつ直方体とし、入口境界から $10D$ の距離の面 ($X/D=10$) の中央に球を配置した。計算格子は球近傍で細かく遠方で粗くなる階層的解像度を有している。図 4 に本計算で使用したキューブの配置を示す。ここでキューブとは同一解像度の計算格子で構成される立法体領域である。計算格子の解像度は $D/4096$ でありグリッド数は約 370 億である。球表面に発達する層流境界層の厚さはよどみ点から 90 度後方において、レイノルズ数 4×10^5 の場合に直径 D のおよそ 0.7% であり、境界層内に約 29 格子が配置されていることになる。粒子モデルは D3Q27、衝突モデルは SRT、SGS モデルは WALE を用いた。

図 5 に球に作用する抵抗係数 (C_d) の時刻暦を示す。また、図 6 に Wieselsberger 17), Voloshuk 18) による C_d の計測結果および FFX による予測結果の比較を示す。図中の赤線は Voloshuk 18) のデータより構築した相関式である¹⁹⁾。計測結果より、 C_d はレイノルズ数 $2 \sim 4 \times 10^5$ の範囲で急に低下することがわかる。計算においてもレイノルズ数 4×10^5 において、 C_d の急低下を再現できている。図 7 および図 8 に球近傍および後流における主流方向運動量の瞬時時分布を示す。 C_d が小さくなる前のレイノルズ数 3×10^5 の場合、境界層が層流のまま剥離しているが、 C_d が小さくなるレイノルズ数 4×10^5 の場合、境界層は減速領域に入った直後に乱流遷移するため、境界層はしばらく剥離することなく、剥離点が後方にシフトし、これにより C_d が小さくなっている。

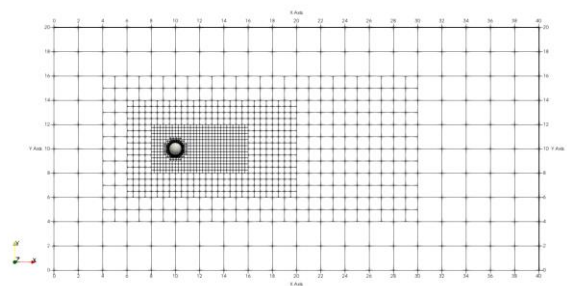


図 4 球まわり流れ計算におけるキューブ配置

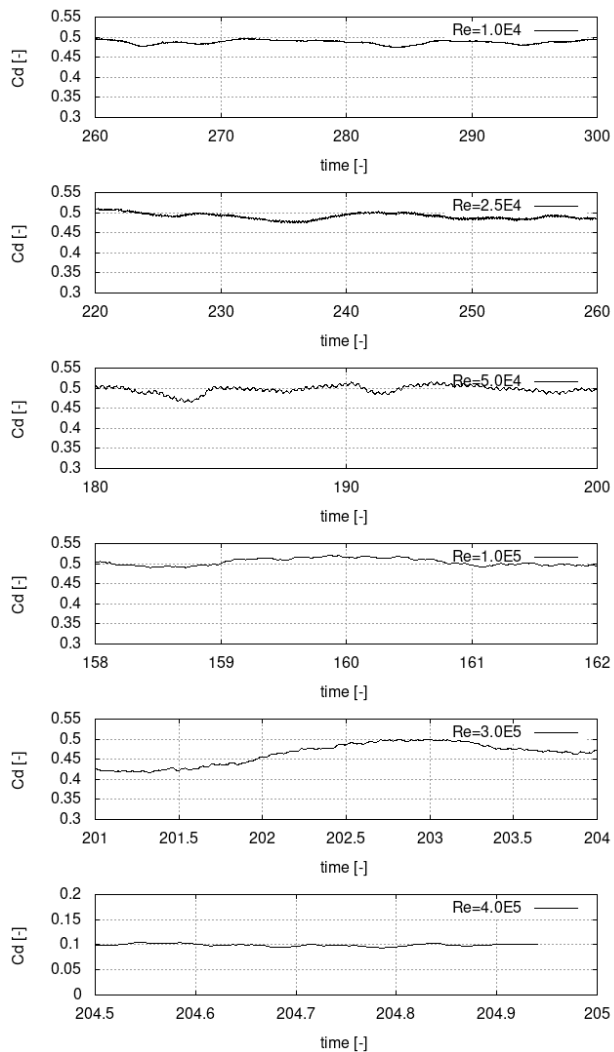


図5 球に作用する抵抗係数 C_d の時刻暦

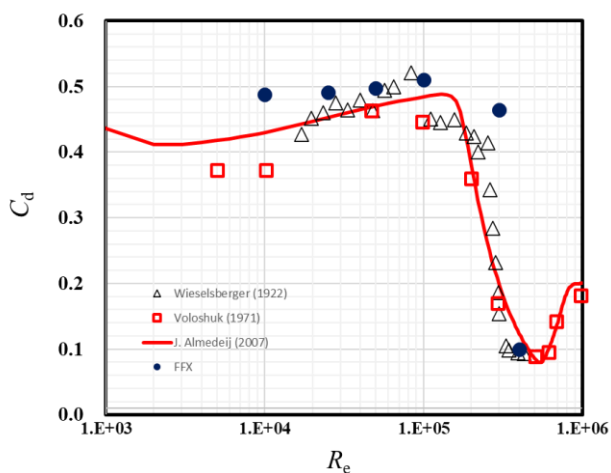
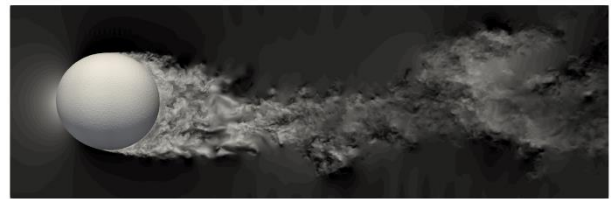
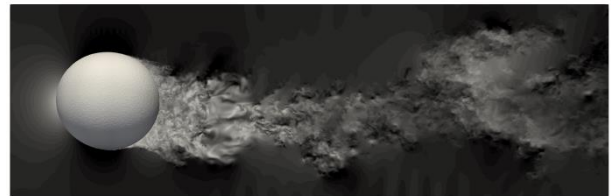


図6 球に作用する抵抗係数 C_d の比較

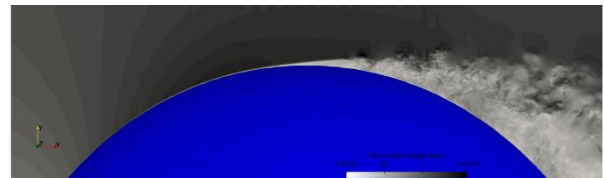


(a) $Re = 3 \times 10^5$

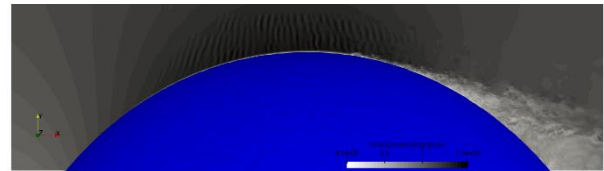


(b) $Re = 4 \times 10^5$

図7 球まわりおよび後流における運動量絶対値の瞬時分布



(a) $Re = 3 \times 10^5$



(b) $Re = 4 \times 10^5$

図8 球近傍の運動量絶対値の瞬時分布

4 まとめ

本稿ではLBMベースの流体解析システムFFXの富岳におけるベンチマークテストとして、富岳のノードあたり4,300万格子を用いたweak-scaleベンチマークテストおよび一様等方性乱流・球まわり流れを対象とした精度検証計算の結果を報告した。これらのベンチマークテストにより、FFXが富岳上で高速に動作し、最大1.4兆グリッドの計算が可能であること、一様等方性乱流、球まわり流れを高精度に計算できることを確認した。今後は、複雑形状を有する車両まわり流れの解析等の実証計算を実施する予定である。

引用文献

- 1) Kato, C., Kaiho, M. and Manabe A., "An overset finite-element large-eddy-simulation method with application to turbomachinery and aeroacoustics", *Transactions of ASME, Journal of Applied Mechanics*, Vol. 70 (2003), pp. 32–43.
- 2) Kato, C., Yamade, Y., Wang, H., Guo, Y., Miyazawa, M., Takaishi, T. and Takano, Y., "Numerical prediction of sound generated from flows with a low Mach number", *Computers & Fluids*, Vol. 36, No. 1 (2005), pp. 53–68.
- 3) Yamanishi, N., Fukao, S., Qiao, X., Kato, C., and Tsujimoto, Y., "LES simulation of backflow vortex structure at the inlet of an inducer", *Journal of Fluids Engineering*, 129 (2007), pp. 587-594.
- 4) Pacot, O., Kato, C., Guo, Y., Yamade, Y., and Avellan, F., "Large Eddy Simulation of the Rotating Stall in a Pump-Turbine Operated in Pumping Mode at a Part-Load Condition", *Journal of Fluids Engineering*, 138-11 (2016), pp.111102-1-111102-11.
- 5) Yamade, Y., Kato, C., Nagahara, T. and Matsui, J., "Suction Vortices in a Pump Sump -Their Origin, Formation, and Dynamics-", *Journal of Fluids Engineering*, 142(3), (2022): Paper No: FE-19-1687.
- 6) Makihara, T., Kitamura, T., Yamashita, T., Maeda, K., Kato, C., Takayama, T., Yamamoto, K., Yamade, Y., and Suzuki, Y., "Identification of Vortical Structure that Drastically Worsens Aerodynamic Drag on a 2-Box Vehicle using Large-scale Simulations", 2016, *SAE Int. J. Passeng. Cars - Mech. Syst.* 9 (2)
- 7) Yamashita, T., Makihara, T., Saito, Y., Kato, C., Takayama, R. Takayama, T., and Yamade, Y., *SAE Int. J. Passeng. Cars - Mech. Syst.* 11(5) (2018), pp. 415–428
- 8) Nishikawa, T., Yamade, Y., Sakuma, M., Kato, C., "Fully Resolved Large Eddy Simulation as Alternative to Towing Tank Resistance Tests- 32 Billion Cells Computation on K computer", 2013, *16th Numerical Towing Tank Symposium (NuTTS'13)*, Duisburg, Germany.
- 9) Nishikawa, T., Yamade, Y., Sakuma, M., Kato, C., "Application of Fully-resolved Large Eddy Simulation to KVLCC2 – Bare Hull Double Model at Model Ship Reynolds Number", *Journal of the Japan Society of Naval Architects and Ocean Engineers*, 16 (2012), pp. 1-9.
- 10) Akiyama, O. and Kato, C., "Numerical Investigations of Unsteady Flows and Particle Behavior in a Cyclone Separator", *Journal of Fluids Engineering*, 139 (2017), pp. 091302-1-091302-11.
- 11) Kato, C., Yamade, Y., Nagano, K., Kumahata, K., Minami, K. and Nishikawa, T., "Toward realization of numerical towing-tank tests by wall-resolved large eddy simulation based on 32 billion grid finite-element computation", *Proceedings of the International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis*, November 2020 Article No.: 3Pages 1–13
- 12) Qian, Y. H., D'Humières, and Lallemand, P., "Lattice BGK Models for Navier-Stokes Equation", *Europhysics Letters*, 17-6 (1992), pp. 479-484.
- 13) D. d'Humières, Irina Ginzburg, Manfred Krafczyk, Pierre Lallemand and Li-Shi Luo., "Multiple relaxation time lattice Boltzmann models in three dimensions", *Phil.Trans. R. Soc. A* 360, (2002), 437–451.
- 14) F. Nicoud and F. Ducros, "Subgrid-Scale Stress Modelling Based on the Square of the Velocity Gradient Tensor", *Flow, Turbulence and Combustion* 62 (1999), 183–200.
- 15) Germano, M., Piomelli, U., Moin, P. and Cabot, W. H., "A dynamic subgrid-scale eddy-viscosity model", *Physics of Fluids A*, Vol. 3, No. 7 (1991), pp. 1760-1765.
- 16) 店橋護, 岩瀬識, 宮内敏雄, 「一様等方性乱流中のコヒーレント微細渦の三次元構造」, 日本機械学会論文集 B 編 65 巻 638 号 (1999), p. 3237-3243.
- 17) Wieselsberger, C., Weitere Feststellungen über die Gesetze des Flüssigkeits und Luftwiderstandes, *Physikalische Zeitschrift*, Vol. 23, (1922), pp. 219-224.
- 18) V.M. Voloshuk, J.S. Sedunow, The processes of coagulation in dispersed systems, Nauka, Moscow, 1971.
- 19) J. Almedeij, "Drag coefficient of flow around a sphere: Matching asymptotically the wide trend", *Powder Technology* 186 (2008) 218–223