

## 1 2 - NA 1 4

# 超大規模数値計算に基づく核融合炉先進ブランケットデザイン条件における高精度 MHD 熱伝達データベースの構築

山本 義暢 (山梨大学)

**概要** 核融合炉デザイン条件下(高レイノルズ数, 高ハルトマン数, 高プラントル数)を対象とした MHD 乱流熱伝達の高精度 DNS データベースを構築することを目的として, 現在までにベクトル並列計算機及びスカラ並列計算機上での, 高速大規模数値計算コード開発に成功した. 具体的には, 最速で実行演算速度 21TFLOPS の高速演算が可能となった. 開発コードを用いて, 実際の核融合炉ブランケットデザイン条件下での DNS データベースの構築に成功し, その精度を検証した. また得られた DNS データベースに基づき乱流モデル開発に不可欠な乱流構造解析を実施するとともにその評価及び修正方法について新たな知見を得た.

### 1. 研究の目的と意義

核融合炉次世代ブランケット冷却材 (及び増殖材) の有力候補の一つである FLiBe 溶融塩(LiF と BeF の混合溶融塩)は, 1) 化学的安定性, 2) 磁気流体力学的 (MHD, Magneto-Hydro-Dynamics) 圧力損失の劇的低減, 3) 冷却材のみならず増殖材及び中性子増倍材といった多機能性を有している反面, [1]腐食, [2]伝熱劣化の問題点が指摘されている.

この FLiBe 溶融塩はプラントル数 20-40 程度の高プラントル数流体(プラントル数: 運動量拡散と熱拡散の比, プラントル数 40 の場合, 熱拡散は運動量拡散の 1/40 であることを示す)であるため, その伝熱特性は乱流熱伝達に強く依存する. しかしその高プラントル流体における MHD 乱流熱伝達の知見は非常に少ない. 原因としては, 非定常性・3次元性を有する強非線形・散逸力学現象であり, 理論的取り扱いが困難であること, さらに実験的手法においても磁場下を対象とするため, 電子機器を用いた高精度計測機器が適用できないこと, また不透明流体であるためレーザ等の光学測定や可視化が困難であることが挙げられる.

そこで本研究では, 近年目覚ましい進展を遂げつつある計算科学的手法に着目し, 磁性効果・乱流効果・熱輸送効果を高精度に予測可能な直接数値計算手法(DNS, Direct Numerical Simulation)の開発及びその精度の検証を実行するとともに, 実際の

核融合炉デザイン条件(: 高ハルトマン数(磁性効果), 高レイノルズ数(乱流効果), 高プラントル数(熱拡散効果), に適用し, 高精度 DNS データベースの構築を目指すものである.

### 2. 当拠点公募型共同研究として実施した意義

#### (1) 共同研究を実施した大学名と研究体制

東北大学サイバーサイエンスセンター

#### (2) 共同研究分野

超大規模数値計算系応用分野

#### (3) 当公募型共同研究ならではの事項など

共同研究先の全面的な協力を得て, コード開発を実施することができた. さらにその性能評価においては, 全システムを占有してのベンチマークを行うことができ, プログラム開発上非常に有益であった.

### 3. 研究成果の詳細と当初計画の達成状況

#### (1) 研究成果の詳細について

3.1 ベクトル並列計算機における直接数値計算手法の高速化(詳細は中間報告書を参照)

#### (1) 計算対象及び体系

本研究では, 高プラントル流体熱輸送を伴う MHD 乱流場の直接数値計算を対象とする. 解析対象は図 1 にブランケット冷却流路を簡略化した平行平板間流であり, 壁垂直方向に磁場が印加されている. FLiBe 溶融塩

を用いた核融合炉ブランケットのデザイン条件<sup>1)</sup>はバルクレイノルズ数： $10^4$ - $10^5$ ，ハルトマン数： $10$ - $100$ ，プラントル数： $25$  程度となる。したがって計算格子としては，レイノルズ数が低い場合において  $1000^3$  の格子が必要となり，さらに磁場効果による乱流変調及び温度輸送を解析するために，非磁場下の計算と比べて， $10$  倍- $50$  倍の時間積分長が必要となってくる。

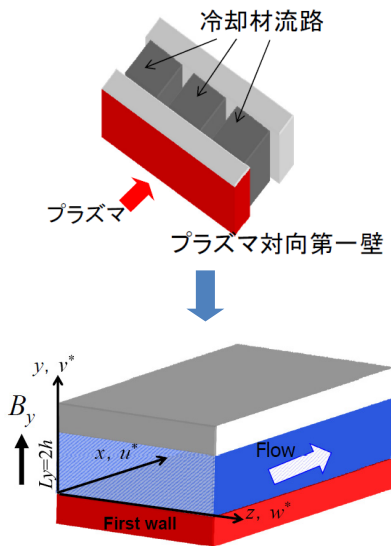


図 1 ブランケット冷却流路と計算体系

(2)基礎方程式<sup>2)</sup> 支配方程式は，磁場効果によるローレンツ力を加えた，非圧縮性流体の運動方程式及び連続式，磁場に関するポアソン方程式，そしてパッシブスカラーを仮定したエネルギー方程式である。

(3)計算手法<sup>2)</sup> 空間の離散化において，主流及びスパン方向にフーリエ・スペクトル法，壁垂直方向に 2 次精度中心差分を用いた。また主流及びスパン方向のエイリアジング誤差に関しては，移送シフト法によりこれを除去した。時間進行は対流項に 3 次精度 Runge-Kutta 法，拡散項に Crank-Nicolson 法，圧力勾配項に Euler 陰解法により行った。

(3)境界条件<sup>2)</sup> 境界条件は全物理量に対し，主流及びスパン方向に周期境界条件とし，壁面で

no-slip 条件，電位ポテンシャルは絶縁壁を仮定し，勾配 0，温度は一定とした。またスパン方向の平均電流は 0 とした。

#### (4)ベクトル並列計算機上における性能評価

ベクトル並列計算機上での性能目標は， $1000$  並列以上において，実行効率 20%以上の高速直接数値計算コードの開発を目標としたプログラム改良を実施した。その結果，中間報告時点で目標を完全に達成し，海洋研究開発機構の地球シミュレータ(128 ノード/1024 並列，一般利用の最大ノード)において実行演算速度： $21$ TFLOPS，実行演算効率： $20.1\%$ を達成した。また東北大学サイバーサイエンスセンターの SX-9(16 ノード/256 並列)において，実行演算速度： $6.4$ TFLOPS，実行演算効率： $24.8\%$ の値が得られている(図 2 参照)。

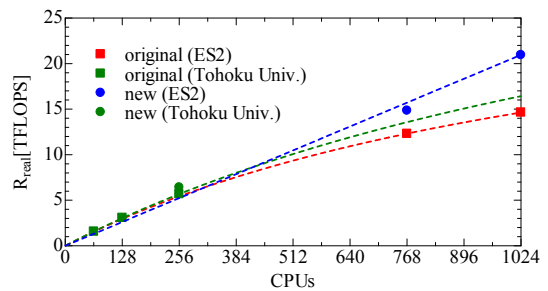


図 2 開発コードの性能評価 (実行演算速度)

### 3.2 スカラ並列計算機における MHD 乱流直接数値計算手法の検討

本課題においては，MHD 乱流直接数値計算コードのスカラ並列計算機上への拡張についても検討を行った。中間報告においては，理化学研究所の京(256 ノード/2048 並列)を用いた場合，約  $2$ TFLOPS(実効効率： $6.3\%$ )であった。

#### (1)通信部分の最適化

本項目においては，中間報告後，京を対象として再度通信部分を再考した。従来 alltoall 通信部分においては，派生データタイプを用いた MPI\_ISEND/IRECV による 1 対 1 通信が最速であり，非同期通信の利点である通信と演算とのオーバーラップによる効率向上を基本としていた。

しかし昨年 11 月以降に，京における Tofu イン

ターコネクト上で最適化された MPI ライブラリが提供された<sup>4)</sup>ため、本 DNS コードにおいても、1 対 1 通信から集団通信(MPI\_ALLTOALLV)への書き換え作業と性能評価を実施した。

図 3 に alltoall 通信部分を集団通信へ変更した場合の実行演算速度を示す。また参考のため地球シミュレータ(ES2)での値もプロットしている。京での実行演算速度は、1024 ノード使用時に 6.8TFLOPS であり、予測値を上回っている。1024 ノードと 2048 ノードの比較により算出した並列化率は、99.997%である。また実行効率は、1024 ノード時に 5.2%、4096 ノード時に 3.6%程度であるため、実行効率の向上をさらに図る必要がある。しかし今回の通信方法の修正により、4096 ノード時には、17.6TFLOPS となり、演算速度の絶対値においては、ベクトル並列計算機並の値が得られるようになっている。

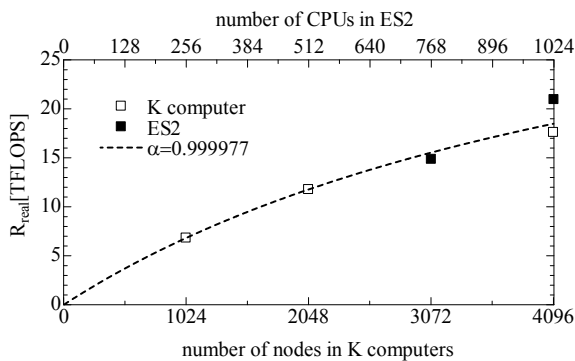


図 3 開発コードの性能評価 (実行演算速度)

## (2) アルゴリズムの検討(高次精度差分法の適用)

さらに中間報告時には、スカラー並列計算でボトルネックとなるノード間通信及び演算コスト低減を図るために、計算手法の変更として、スペクトル法部分の高次精度差分法(2 次、4 次、6 次、8 次及び 12 次精度)<sup>5)</sup>への代替を検討し、6 次精度以上の場合にスペクトル法と同等の計算精度が確保できることがわかった。しかし解析対象としては乱流レイノルズ数 150 という低レイノルズ数を対象としていたため、今回核融合炉ブランケット設計条件のレイノルズ数である、乱流レイノルズ数 1000 の場合の検討を実施した。

検証においては、6 次及び 12 次精度差分法を用

いて、高レイノルズ数(乱流レイノルズ数 1000)の場合を対象とした。格子数は、(x,y,z)方向にそれぞれ、(720, 512, 720)とした。この場合の格子分解能は中間報告時における低レイノルズ数解析の解像度と同様であり、スペクトル法による DNS における最低必要分解能でもある( $\Delta x^+ = 18$ ,  $\Delta z^+ = 9$  程度、上付き添え字+は摩擦速度と動粘性係数により規格化した値であることを示す)。また比較のために、2 次精度中心差分法を用いた計算も行った。

図 4 に平均速度及び図 5 に乱流強度の比較を示す。2 次精度中心差分法(2nd FDM)の場合は、格子解像度不足の影響による平均速度の減少が見られるが、6 次精度(6th FDM)及び 12 次精度(12th FDM)の場合は、スペクトル法の結果良好に一致する。また乱流強度の比較においても、2nd FDM の場合は、乱れの過小評価が見られるが、6th FDM 及び 12th FDM の場合は、スペクトル法の結果と定量的に一致する。

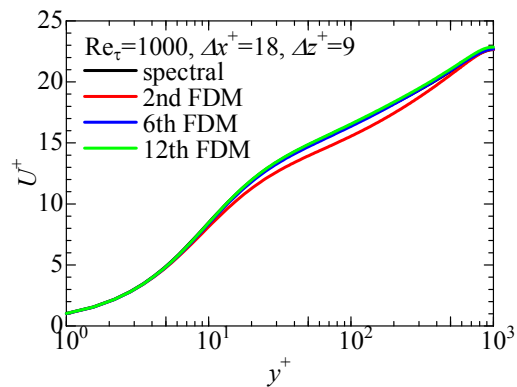


図 4 平均速度分布の比較

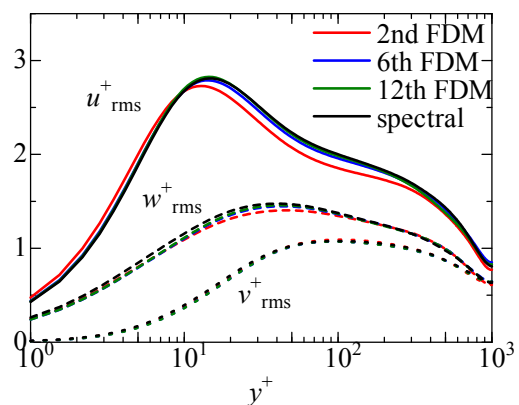


図 5 乱流強度分布の比較

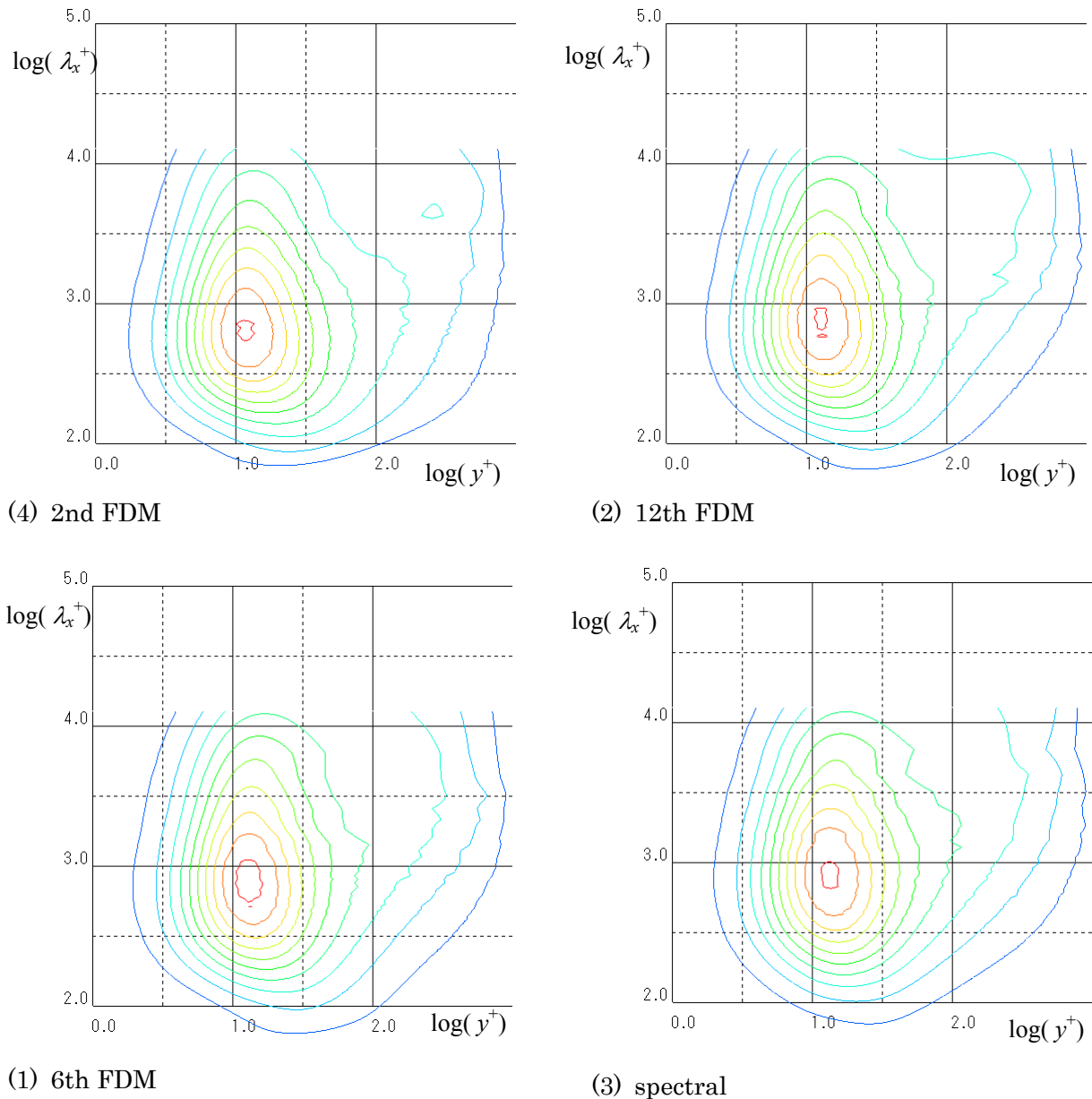


図 6 Pre-multiplied spectrum のコンタ,

$k_x E_{uu} / u_\tau = 0.2(\text{blue}), 0.4, 0.6, 0.8, 1.0, 1.2, 1.4, 1.6, 1.8, 2.0(\text{red})$

図 6 に主流方向変動速度の主流方向スペクトルに波数をかけたスペクトル(Pre-multiplied spectrum, PMS)のコンタを示す. ここに縦軸は、波長、横軸は、壁垂直方向高さを示し、両対数でプロットされている. 実験的手法においては、この主流方向変動速度の主流方向スペクトルにおいて、大規模構造の影響を議論することが多く、この物理量の再現性は、非常に重要である.

計算結果においては、いずれのケースにおいても、壁近傍の低波長部分( $y^+=15$ ,  $\lambda_x^+=1000$  程度)の乱れのピーク部分はよく一致している. しかし、 $y^+>100$ ,  $\lambda_x^+ = 10000$  程度の大規模構造の領域においては、

2nd FDM の場合は、スペクトル法の結果とのずれが確認できる. 6th FDM の場合においては、 $k_x E_{uu} / u_\tau^2 = 1, 6$  (外側から 3 本目)のラインが若干ずれているものの分布型はよく一致している. 一方、12th FDM の場合においては、全ラインにおいて、スペクトル法のケースと定量的な一致が確認できる.

12次精度中心差分法とスペクトル法とのコスト比較においては、SX-9/32 並列を使用した場合、1 タイムステップの時間積分に要する時間が、1/3、メモリ量が 1/2 程度となっており、大規模構造を対象とした高レイノルズ数乱流場の DNS 解析に

において、高次精度差分法(特に 12 次精度中心差分法)の優位性が確認できた。従って次年度以降は、高次精度差分法のベクトル・スカラ両並列計算上での高速化に取り組む予定である。

### 3.3 DNS データベースの構築と乱流構造解析 (詳細は中間報告書参照)

現在までに、3.1 で紹介したベクトル並列計算機における DNS コードを用いて、核融合炉ブランケットデザイン条件において、バルクレイノルズ数：1 万 4000、ハルトマン数：0, 20, 28, プラントル数：25 の DNS データベース構築が終了している。

### 3.4 DNS データベースを用いた MHD 乱流モデルの評価と修正

中間報告までに得られた 3. 3 の DNS データベースを用いて MHD 乱流モデルの評価と改善を実施した。対象とした乱流モデルは、速度場に Myong & Kasagi<sup>6)</sup>の低レイノルズ数型 k-e モデルを使用し、MHD 効果については、Kenjers & Hanjalic<sup>7)</sup> モデルを適用した。計算対象は、DNS と同様に十分に発達した 2 次元チャンネル乱流場であり、壁垂直方向に磁場が印加されている。図 7 に計算体系と印加磁場及び加熱条件を示す。

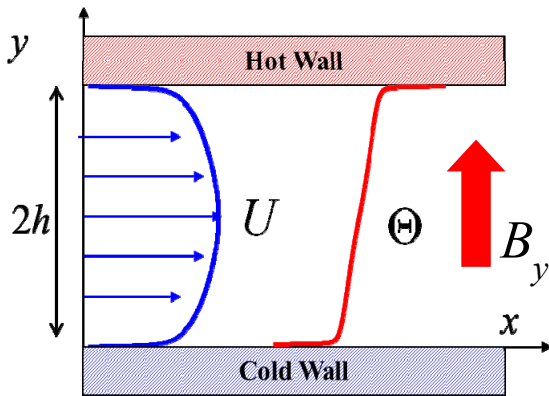


図 7 MHD 乱流モデル評価における計算体系

(1) MHD 乱流モデルにおける基礎方程式  
2 次元の十分に発達したチャンネル乱流場における MHD 乱流モデルの基礎方程式は以下のとおりである。

・運動方程式

$$0 = F_x + \frac{\partial}{\partial y} \left[ (v_T + \nu) \frac{\partial U}{\partial y} \right] + \frac{\sigma B_y^2}{\rho} (U_b - U) \quad \text{Lorenz force}$$

・エネルギー方程式

$$0 = \frac{\partial}{\partial y} \left[ \left( \frac{\nu}{\text{Pr}} + \frac{\nu_T}{\text{Pr}_T} \right) \frac{\partial \Theta}{\partial y} \right]$$

・乱流エネルギーの方程式

$$0 = 2\nu_T \left( \frac{\partial U}{\partial y} \right)^2_{P_k} + \frac{\partial}{\partial y} \left[ \left( \nu + \frac{\nu_T}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial y} \right] - \varepsilon + \underbrace{S_k^M}_{\text{MHD term}}$$

・乱流散逸率の方程式

$$0 = \frac{\partial}{\partial y} \left[ \left( \nu + \frac{\nu_T}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial y} \right] + C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} P_k - C_{\varepsilon 2} f_2 \frac{\varepsilon^2}{k} + \underbrace{S_\varepsilon^M}_{\text{MHD term}}$$

・乱流渦粘性(Myong & Kasagi, 1990)

$$\mu_T = C_\mu f_\mu \rho k^2 / \varepsilon$$

$$C_\mu = 0.09, C_{\varepsilon 1} = 1.4, C_{\varepsilon 2} = 1.8, \sigma_k = 1.4, \sigma_\varepsilon = 1.3,$$

$$f_\mu = \left\{ 1 - \exp\left(-\frac{y^+}{70}\right) \right\} \left\{ 1 + \frac{3.45}{R_t^{1/2}} \right\}, f_1 = 1.0,$$

$$f_2 = \left\{ 1 - \frac{2}{9} \exp\left(-\frac{R_t}{6}\right) \right\}^2 \left\{ 1 - \exp\left(-\frac{y^+}{5}\right) \right\},$$

$$R_t = \frac{k^2}{\nu \varepsilon}, y^+ = \frac{y u_\tau}{\nu}$$

・乱流プラントル数

$$\text{Pr}_T = 0.75 + \frac{1.63}{\log(1 + \text{Pr}/0.0015)}$$

・MHD 散逸モデル(Kenjers & Hanjalic, 2000)

$$S_k^M = \frac{\sigma}{\rho} B_2^2 k \exp\left(-C_1^M \frac{\sigma}{\rho} B_2^2 \frac{k}{\varepsilon}\right),$$

$$S_\varepsilon^M = \frac{\sigma}{\rho} B_2^2 \varepsilon \exp\left(-C_1^M \frac{\sigma}{\rho} B_2^2 \frac{k}{\varepsilon}\right)$$

(2) MHD 乱流モデルの評価

図 7 に MHD 乱流モデルにより予測された乱流

エネルギーの分布を示す(計算条件は, 乱流レイノルズ数 1000, ハルトマン数 48 である). DNS データベースの値と比較すると, 壁遠方(高レイノルズ数効果)部分で乱流エネルギーを過小評価している. 従って核融合ブランケットのデザイン条件下(高レイノルズ数・高ハルトマン数条件下)に適用するには, 既存の MHD 乱流モデルの修正が不可欠であることがわかった.

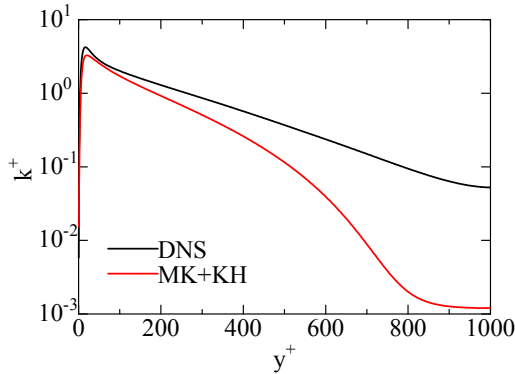


図 7 MHD 乱流モデルによる乱流エネルギー分布

### (3)MHD 乱流モデルの修正

そこで DNS データベースを用いて, MHD 乱流モデルの修正を検討した. 高レイノルズ数・高ハルトマン数条件においては, 磁場の影響によって, 乱流レイノルズ数より実際の乱流スケールが縮退する. 従って内層乱流構造の強度とスケールをレイノルズ応力の勾配に基づいたレイノルズ数(実効レイノルズ数)としてスケーリングすることを提案した. 具体的には乱流拡散係数 $\sigma_k$ に以下の修正を行った.

$$\sigma_k = 1.4 \times \min(0.45 \exp(-20(y^+ - 50)/\text{Re}_{\text{eff}}) + 0.55, 1.0)$$

ここに  $\text{Re}_{\text{eff}}$  は MHD 効果により減衰をしたレイノルズ数によってスケーリングされた実効レイノルズ数である.

図 8 及び 9 に上記の乱流拡散係数の修正を行った場合における乱流エネルギー及び乱流渦拡散係数の予測値を示す(計算条件は図 7 と同様).

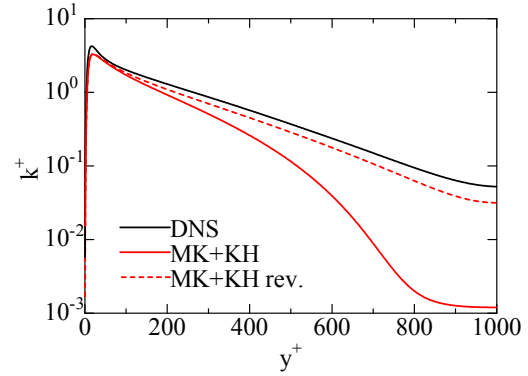


図 8 修正 MHD 乱流モデルによる乱流エネルギー分布

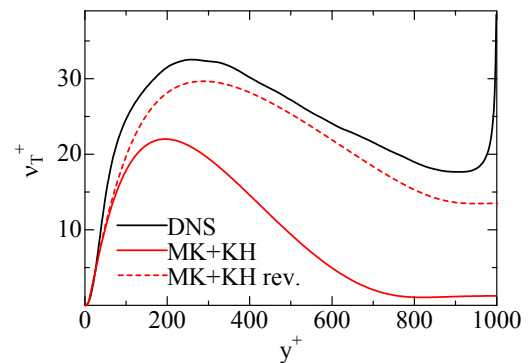


図 9 修正 MHD 乱流モデルによる渦拡散係数分布

赤点線で示した修正 MHD 乱流モデルによる予測値は壁遠方で大きく改善し, DNS データベースとよく一致することが確認できる.

### (4) 乱流プラントル数の修正

同様に温度分布予測においても, DNS データベースを用いた検討を行った結果, 特に高プラントル数条件下では, その修正が必要であることがわかった. 修正方法については, 速度場の場合と同様に実効レイノルズ数をパラメータとして次式の修正を加えた.

$$\begin{aligned} \text{Pr}_T &= A + (1.75 - A) \exp\{B(y^+ - 1)\} \\ A &= 1.05 - \frac{0.13}{124} (\text{Re}_{\text{eff}} - 233), \\ B &= 0.2 - \frac{0.3}{124} (\text{Re}_{\text{eff}} - 233) \end{aligned}$$

図 10 に修正乱流拡散係数及び修正乱流プラントル数を用いた場合の平均温度分布を示す。

修正を加えない場合(赤線)は、DNS の結果(黒線)を過小評価しているのに対し、本修正を施した結果(青線)は、DNS の結果に対し、5%以内で一致することが確認された。

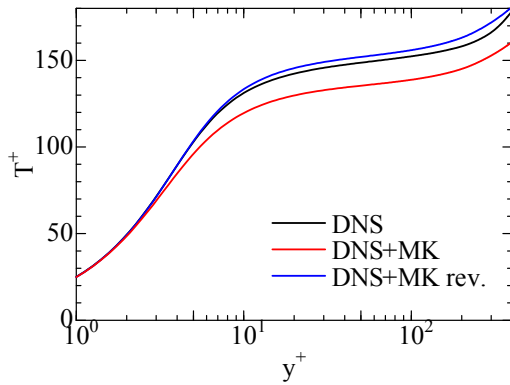


図 10 修正 MHD 乱流モデル及び乱流プラントル数による平均温度分布

以上より、大規模直接数値計算によってはじめて得られた、核融合ブランケットデザイン条件下(高レイノルズ数, 高ハルトマン数, 高プラントル数)の DNS データベースを利用することにより、既存の MHD 乱流モデルの問題点を明らかにし、その修正方法を提案した。修正モデルは DNS データベースと良好に一致し(5%以内の誤差で一致)、核融合ブランケット設計条件下での活用が期待できる。一方、本修正の妥当性評価においては、さらなる DNS データベースの拡充が不可欠である。

## (2) 当初計画の達成状況について

本研究では、近年目覚ましい進展を遂げつつある計算科学的手法に着目し、磁性効果・乱流効果・熱輸送効果を高精度に予測可能な直接数値計算手法の開発及びその精度の検証を実行するとともに、実際の核融合炉デザイン条件(：高ハルトマン数(磁性効果), 高レイノルズ数(乱流効果), 高プラントル数(熱拡散効果), に適用し、高精度 DNS データベースの構築を目標とした。その結果、

1) ベクトル並列計算機(地球シミュレータ, 1024 並列)において、ベクトル化率 99.8%, 実行効率

20%, 実行演算速度 21TFLOPS の高速かつ高精度直接数値計算手法を開発した。(中間報告書参照)

- 2) 開発コードを用いて、実際の核融合炉ブランケットデザイン条件下での DNS データベースの構築をするとともにその精度を検証した。(中間報告書参照)
- 3) 得られた DNS データベースに基づき乱流モデル開発に不可欠な乱流構造解析を実施した(中間報告書参照)
- 4) 乱流構造解析の結果に基づき、既存 MHD 乱流モデルの評価を行い、DNS データベースを活用した乱流モデルの修正方法を提案した。これにより、乱流エネルギー、平均温度分布において、DNS データベースに対し 5%以内の誤差で予測可能とすることができた。

さらに本 DNS 手法のスカラー並列計算機への拡張及び計算アルゴリズムの変更を検討した結果、

- 5) 通信方法の検討により、実行演算速度においてベクトル並列計算機並の値(17.6TFLOPS)が得られるようになった。
- 6) 一方、通信量及びメモリ量を削減し、実行効率を向上させる方法としては、高次精度差分法の適用が有力であることがわかった。

以上により、本年度計画した研究目標は十分に達成され、計算科学及び基礎物理現象解明、さらにはブランケット熱設計の各観点において重要な知見が得られと考えている。

## 4. 今後の展望

今後の展望としては、核融合炉ブランケットデザイン条件におけるレイノルズ数及びハルトマン数の上限(乱流レイノルズ数 2000, ハルトマン数 96)程度の DNS データベースの構築に挑戦したい。本年度修正を行った MHD 乱流モデルによる本条件における予測値を図 11 に示す。この結果が妥当であるかは、上記の DNS データベース構築により、判断可能となる。これにより修正 MHD 乱流モデルの妥当性が総合的に評価したい。

さらに上記妥当性の確認を前提とし、MHD 乱流モデルによるブランケット伝熱劣化の評価にも取り組んでみたい。

一方、計算科学的観点からは本年度その有用性が確認された、高次精度差分法による大規模直接数値計算手法の開発を行ってみたいと考えている。

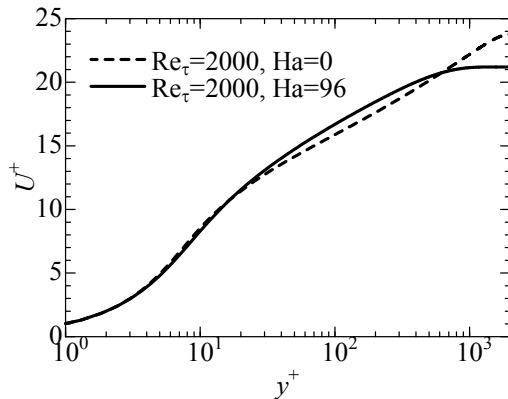


図 11 修正 MHD 乱流モデルによる高レイノルズ数・高ハルトマン数条件での平均速度分布の予測値(DNS データベースが存在しない条件)

## 5. 研究成果リスト

### (1) 学術論文

Y.Yamamoto and T. Kunugi, Direct numerical simulation of MHD heat transfer in high Reynolds number turbulent channel flows for Prandtl number of 25, Fusion Engineering and Design(投稿中)

猿渡祥悟, 山本義暢, 高解像度DNSデータベースを用いた高レイノルズ数チャンネル乱流場の四象限・確率密度関数解析, 日本機械学会論文集(B編), 78巻795号(2012), pp.1951-1966.

猿渡祥悟, 山本義暢, 高レイノルズ数チャンネル乱流場における高プラントル数乱流熱輸送に関する四象限・確率密度関数解析, 日本機械学会論文集(B編), 投稿中

猿渡祥悟, 山本義暢, 高レイノルズ数チャンネル乱流場の内層温度分布におけるプラントル数効果, 日本機械学会論文集(B編), 投稿中

長坂和輝, 山本義暢, 高次精度差分法による高レイノルズ数乱流場の大規模直接数値シミュレーション, 日本機械学会論文集(B編), 投稿中

### (4) 国内会議発表

猿渡祥悟、山本義暢, 高レイノルズ数乱流場における大規模構造の影響、日本機械学会山梨講演会、10月27日、山梨大学

武内駿、山本義暢、甲府盆地を対象としたメソスケール気象数値シミュレーション、日本機械学会山梨講演会、10月27日、山梨大学

長坂和輝、山本義暢、磁気乱流場における高精度大規模直接数値シミュレーション手法の開発(並列化手法の検討)、日本機械学会山梨講演会、10月27日、山梨大学

### 参考文献

- 1) S. Smolentsev, J. Plasma Fusion Res. Vol.85, No.8 (2009), pp.556-557.
- 2) Y.Yamamoto and T. Kunugi, Fusion Engineering and Design, vol.86, pp.2886-2890.2011
- 3) Y.Yamamoto and T.Kunugi, Prog. Nuclear Sci.Technol., vol.2, pp.550-555.2011
- 4)三浦健一, スーパーコンピュータ「京」でのMPI実装と評価, サイエンティフィック・システム研究会科学技術分科会 2012 年度会合,  
<http://www.sskn.gr.jp/MAINSITE/download/newsletter/2012/20121024-sci-2/lecture-04/index.html>
- 5) 森西他,日本機械学会論文集(B編),66巻 647号,pp.1750-1757, 2000.
- 6) H. Myong, N. Kasagi, A new approach to in the improvement of k-ε turbulence model for wall-bounded shear flow, JSME, Int. Fluid Eng. 109 (1990) 156.
- 7) S. Kenjeres, K. Hanjalic, On the implementation of effects of Lorentz force in turbulence closure models, Int. J. Heat Fluid Flow 21 (2000) 329.

謝辞：本開発コードのベンチマークにおいては平成24年度地球シミュレーター一般公募プロジェクト(先進・創出分野)及びHPCIシステム利用研究課題の一部として、地球シミュレーター及び京を利用して実施した。記して謝意を表する。