

jh190044-NAH

## 3 次元非圧縮一様乱流の超並列計算に向けて

岡本 直也 (愛知工業大学)

### 概要

乱流研究の挑戦的目標の1つは、自由度が莫大な十分小さいスケールにおいて、さまざまな乱流に共通する普遍的な性質を解明し、その知見を個別の乱流現象に役立てることにある。フーリエ・スペクトル法による高精度な一様乱流の直接数値計算はその目標に資するものであるが、超並列時代に向けて通信の少ない計算スキームの検討が重要であると考えられる。本研究では、空間離散化に6次精度コンパクト差分法、時間離散化として種々の時間スキームの組み合わせを試し、よく解像されたスペクトル法による計算結果と比較することで各スキームの信頼性を評価した。評価の指標として、正確な再現性が最も難しいと考えられる Extreme Event に注目し解析を行った。詳細は本文を参照されたい。

### 1. 共同研究に関する情報

#### (1) 共同研究を実施した拠点名

名古屋大学, 神戸大学

#### (2) 共同研究分野

- 超大規模数値計算系応用分野
- 超大規模データ処理系応用分野
- 超大容量ネットワーク技術分野
- 超大規模情報システム関連研究分野

#### (3) 参加研究者の役割分担

- ・岡本直也 (愛知工業大学)  
研究総括・プログラム開発・プロダクトラン
- ・横川三津夫 (神戸大学)  
並列プログラムの高性能化
- ・金田行雄  
数理物理的知見からのアドバイス
- ・武中裕次郎 (神戸大学)  
並列プログラムの高性能化・プロダクトラン

### 2. 研究の目的と意義

大気・海洋などの地球規模流動現象や、ものづくりをはじめとした社会的関心の高いさまざまな流動現象は、乱れた流れの状態(乱

流状態)になっている。したがって、環境問題や工学的諸問題の解決には乱流現象の解明が必要不可欠である。乱流は、強非線形性に起因して大小さまざまな渦が幅広い強度をもって混在し(マルチスケール性)、小さなスケールほど、空間的にまばらに分布し(強間欠性)莫大な自由度を有している。乱流の大スケールは、通常、壁や外力の影響など、系固有の性質が反映したスケールである。乱流研究の挑戦的目標の1つは、自由度が莫大な十分小さいスケールにおいて、さまざまな乱流に共通する普遍的な性質を解明し、その知見を個別の乱流現象に役立てることにある。フーリエ・スペクトル法による高精度な一様乱流の直接数値計算(DNS;基礎方程式をモデル化することなく計算する手法)はその目標に資するもので、画期的な結果が創出されてきた。スペクトル法は、与えられた格子点数において最高精度で微分を評価できるものの、流体の基礎方程式(Navier-Stokes(NS)方程式)の非線形項の計算においてFFTを多く用いるため、大域的な通信に多大な時間が費やされる。したがって、通信量の点で超並列計算機では非効率的である。実際これまで「京」コンピュータ上で行われた

乱流の DNS は、スペクトル法としては実行性能が高いものの 2~3%程度にとどまっている (Pencil 型 FFT, AlltoAll 通信が用いられている) (Ishihara, Morishita, Yokokawa, Uno, Kaneda, Phys. Rev. Fluids, 1(8), 082403, 2016). 今後、日本が世界トップレベルの科学的に卓越した乱流基礎データを構築するためには、富岳に代表される次世代の超並列計算機を可能な限り効率的に利用することが不可欠であり、乱流 DNS で用いられる種々のアルゴリズムの検討・開発を、(i) 正確さと (ii) 計算コストの点から行うことが早急な課題である。計算コストを削減する方向性として、空間の離散化の効率化、時間スキームの効率化ならびにこれらの混合などが考えられる。

本研究では、コンパクト差分法を利用した流体ソルバーを開発し、スキームの正確さと計算コストの評価を行う。強非線形な乱流 (高レイノルズ数乱流) の特徴の 1 つとして、Extreme Events (EE) が知られている。これは乱流中の物理量はその平均的な値より数オーダー高くなる領域があることを表すものであるが、これはシミュレーションにとって正確に捉えることが最も難しい量であると考えられるため、スキームの正確さを調べる指標として主に用いた。ここでは EE をエンストロフィーの空間的な最大値として調べたものを報告する。

### 3. 当拠点公募型研究として実施した意義

特に今年度においては、「京」コンピュータ停止後も、「京」コンピュータ型スパコン FX100 を利用することができた点や、高性能計算や計算科学を専門とする研究者と連携した環境であることに意義がある。

### 4. 前年度までに得られた研究成果の概要

今年度からの実施である。

### 5. 今年度の研究成果の詳細

これまでに開発済みであった非圧縮 3 次元乱流の MPI-OpenMP コードに外力項を加え、小スケールを減衰させない発達した乱流をシミュレートできるようにした。より具体的なスキームの種類としては、空間離散化には 6 次精度コンパクト差分 (CD6)、時間方向には 4 次、3 次、2 次精度 Runge-Kutta 法 (RK4, RK3, RK2)、または 3 次、2 次精度 Adams-Bashforth 法 (AB3, AB2) を用いた。外力には、負の粘性に基づく方法を実装した。非圧縮性を満たすために、フラクショナルステップ法を用いた。その際に、圧力に関するポアソン方程式を解く必要があるが、実空間のみの解法で解くことは計算コストが非常に高く、ここでは例えば Laizet & Lamballais (J. Comput. Phys. 228(16), 5989-6015., 2009) と同様に FFT を利用した。

負の粘性による外力を有するコード SP-RK4 (Ishihara et al. (2016). Phys. Rev. Fluids, 1(8), 082403.) によって得られた結果と比較し、今回作成した外力有りの CD6-RK4, RK3, RK2, AB3, AB2 コードの結果の妥当性を確認した。

高解像度の格子 ( $N=2048^3$ ,  $k_{max}\eta\sim 6$ ) で SP 法で計算された場を正解とし、その場から計算されるエンストロフィーの空間的な最大値 EE を  $A(\tau)$  とし、中解像度の格子 ( $N=1024^3$ ,  $k_{max}\eta\sim 3$ ) で各スキームによって計算された場により求められ EE の値を  $B(\tau)$  とし、次の量で定義される累積的な誤差を計算した。 $\eta$  は Kolmogorov スケールであり、最小渦の代表的な長さを表す。 $k_{max}\eta\sim 3, 6$  は、それぞれ  $\eta/\Delta x\sim 1, 2$  に対応する。 $\Delta x$  は格子刻みである。

$$e(t) = \frac{1}{t} \int_0^t \frac{|A(\tau) - B(\tau)|}{A(\tau)} d\tau$$

表は、各スキーム  $e(t)$  の値を時刻  $t = 2.5, 5$  に対してまとめたものである。

まず SP-RK4 による結果が、どちらの時刻においても他のスキームと比べて誤差が最も小さいことがわかる。

CD と RK4, RK3, RK2, AB3, AB2 の組み合わせについては  $t = 5$  における CD-AB2 の誤差が比較的大きいが、それ以外はほとんど違いがないことがわかる。これは、SP 法から差分法である CD6 に空間離散化を変更したことによる誤差の影響の方が、時間スキームによる違いが誤差に与える影響より大きいことを示していると考えられる。

**表：各スキームによって得られた EE の累積的な誤差  $e(t)$ .** CFL の定義は Yeung ら (Yeung, Sreenivasan, Pope, Phys. Rev. Fluids, 3(6), 064603. 2018) と同じものを用いた。

	$t = 2.5$	$t = 5$
SP-RK4 (CFL=0.5)	<b>0.025</b>	<b>0.04</b>
CD-RK4 (CFL=0.25)	0.037	0.10
CD-RK3 (CFL=0.5)	0.037	0.09
CD-RK2 (CFL=0.25)	0.038	0.11
CD-RK2 (CFL=0.5)	0.042	0.11
CD-AB3 (CFL=0.25)	0.037	0.09
CD-AB2 (CFL=0.25)	0.039	0.15

## 6. 今年度の進捗状況と今後の展望

今年度は外力項を含めたコード開発と、表に対応するプロダクトランを行った。申請時には、ここで記載したものより大規模な格子点数を用いてより高レイノルズ数乱流をターゲットとする予定であったが、このプロジェクトが採択された年度から代表者が他大学に異動することになり、想像以上に学内用務が多く、予定していた時間があまりとれなかったため、計算規模を縮小し研究を行った。

本報告書で解析したデータは  $R_\lambda \sim 200$  程度であるが、Extreme Events の振る舞いは Yeung ら (Yeung, Sreenivasan, Pope, Phys. Rev. Fluids, 3(6), 064603. 2018) の高レイノルズ数乱流の振る舞いと定性的によく似ており、本研究で得られた知見は有用であると考えられる。今後の課題としては、エンストロフィーだけでなくその他の物理量（例えば、 $n$  次構造関数やエネルギー散逸率の Extreme Event など）の再現性を調べることならびに、計算コストと統計的再現性の関係を明らかにすることである。

## 7. 研究業績一覧（発表予定も含む）

- (1) 学術論文（査読あり）
- (2) 国際会議プロシーディングス（査読あり）
- (3) 国際会議発表（査読なし）
  - [1] N. Okamoto, T. Matsuzaki, M. Yokokawa, Y. Kaneda, Effect of high-order finite difference discretization of the nonlinear term on turbulence statistics, 17th European Turbulence Conference, 3 Sep 2019 - 6 Sep 2019, Turin, Italy
  - [2] N. Okamoto, Effect of high-order finite difference discretization on the statistics of 3D incompressible homogeneous turbulence, 4th International Workshop on Marine-Earth Science Simulations: Data assimilation and multiscale techniques for numerical simulation of turbulent flows, JAMSTEC, Yokohama, Japan, 2019/11/11 (keynote)
- (4) 国内会議発表（査読なし）
- (5) その他（特許, プレスリリース, 著書等）