jh190044-NAH

岡本直也（愛知工業大学）

3次元非圧縮一様乱流の超並列計算に向けて

1. 研究背景

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（図１）。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、大スケールより、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と考えられる。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(Ishihara, Morishita, Yokokawa, Uno, Kaneda, Phys. Rev. Fluids, 1(8), 082403, 2016). 今後の超並列時代に向けて、ポスト京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で用いられう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。

https://en.wikipedia.org/wiki/Science_and_inventions_of_Leonardo_da_Vinci

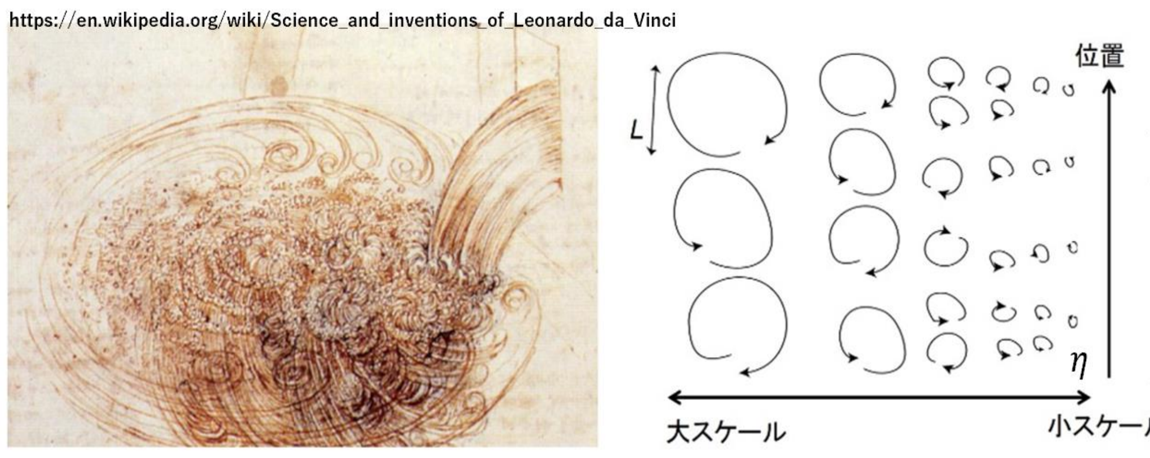

図１：レオナルドダビンチによる乱流のスケッチ（左）と乱流の渦のスケールと空間分布のイメージ（右）
高レイノルズ数(非線形性が高い)ほど、大スケールと小スケールの比が大きくなり、小スケールの間欠性や渦の強度が強くなる。

世界的にも超並列時代を意識して研究が進められており、非圧縮乱流に対する差分法では(A)陽的な差分と(B)陰的な差分、どちらの方向性も探求されている。(A)を好む理由として、微分の評価は局所的な通信だけで済み、スケーラビリティが良いこと、(B)を好む理由として差分の解像度が高く（i.e.有効波数がスペクトル法の波数に近く微分がより正確）、また同じ次数（精度）で比較した場合、(A)より(B)の方が少ないステンシルで済むことが上げられる。また微分が高解像度であることは、(A)より少ない格子点でより正確に計算を行うことができるため、超大規模データの視点からも恩恵が高い。非圧縮NS方程式の場合、質量保存の要請から圧力に対するポアソン方程式を各時間ステップで解く必要がある(ラプラス演算子は離散的なナブラ演算子を2回適用したものでなければならない)。ポアソン方程式を反復法により実空間のみで高精度に解くことは極めて計算負荷が高く、ポアソン方程式を精度よく解くためには、FFTと有効波数を用いてフーリエ空間を利用して解く方法が効率的であると考えられている (e.g., Laizet, Lamballais, J. Comput. Phys., 228(16), 5989-6015, 2009; Gholami, Malhotra, Sundar, Biros, SIAM J. Sci. Compu., 38(3), C280 – C306, 2016).

2. 現状と今後

最近我々は、陰的な差分であるコンパクト差分(CD)を用いて非圧縮流体コードのMPI-OpenMPのハイブリッド並列化を行い、名大FX100において予備計算を行った（ポアソン方程式はFFTで解き、それ以外は実空間でCDで計算する）。表１は、CD手法やスペクトル法で時間ループを100回反復した時のCPU時間の比を表している。記号（○ – △）の意味は、○が空間スキーム、△が時間スキームを表しており○は、SP(=スペクトル法)またはCD(= 6次精度コンパクト差分)、△はRK4 (= 4次のRunge-Kutta 法)またはAB3 (= 3次のAdams-Bashforth法) を表す。格子点数 N^3としてN=512,1024,2048 の3種調べた。N=2048の時は、プロセス並列を16x16、それ以外の格子点数では4x4とした。プロセスあたりのスレッド並列数は最大の32とした。表１の傾向として、SP-RK4と比較しCD-RK4のCPU時間は格子点数の増加とともに少なくなっていることがわかる。一方、CD-RK4と比較し、CD-AB3は格子点数にほぼ依らず3.5倍程度高速である。SP-RK4とCD-AB3の比の格子点依存性から、空間・時間両方のスキームの変更によりN=2048においては7.5倍高速になっていることがわかる。

表１

	512	1024	2048
(SP-RK4)/(CD-RK4)	1.4	1.5	2.2
(CD-RK4)/(CD-AB3)	3.6	3.6	3.4
(SP-RK4)/(CD-AB3)	5.1	5.6	7.5

表１：異なるスキームのCPU時間の比とその格子点数依存性

図２

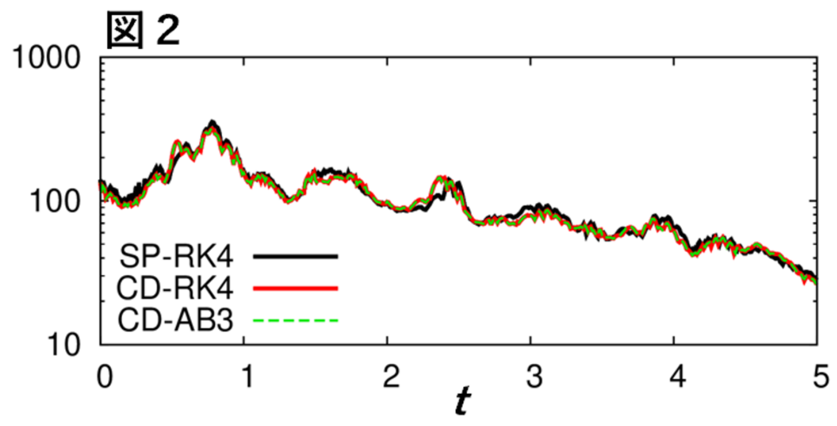

図２： エンストロフィーの空間的な最大値の時間依存性(N=256)

図２は、ある発達した乱流場を初期条件として外力なしの減衰乱流をN=256で実際にシミュレーションし、流れ場中のExtreme Event（ある物理量（ここではエンストロフィー[=渦度の大きさの二乗]）の空間的な最大値）の時間変化を、各スキームに対し比較している。CFL値はよく用いられる0.4程度として時間刻みdtを決定し、dtはスキームによらず同一である。図２から、CD-RK4, CD-AB3ともSP-RK4と同程度の正確さを持っていることがわかる。この表１と図２の比較から、従来、規範的な乱流のDNSでよく用いられていたSP-RK4よりも、空間・時間スキームの組み合わせを変えることで、非常に効率的に計算を行うことができる可能性を示している。ただ図２では、格子点数(N=256)が小さいためレイノルズ数が低く（テイラー長に基づくレイノルズ数R_λ=80程度）乱流の本質である、レイノルズ数が高く間欠性の高い乱流場でスキームの検証ができていない。

今後は、外力を与え小スケールが時間的に減衰しない高レイノルズ数乱流でスキームの信頼性の評価と計算コストを評価する。これまでの研究において200<R_λ<400で渦構造に遷移がみられ、クラスター構造を形成することや、物理量が空間的にシャープに変化する乱流・非乱流界面が存在することが知られている(Ishihara, Kaneda, Hunt, Flow, Turbul. Combust., 91(4), 895-929, 2013). このような構造は流れによって移流されるため時間的にもシャープに変化しうると考えられる。そのため、高レイノルズ数乱流におけるスキームの検証は、空間差分スキームにとっても時間スキームにとっても重要であると考えられる。