１９９９年１１月５日

サイエンティフィック・システム研究会
科学技術分科会　第２回会合資料

乱流ﾗｰｼﾞ・ｴﾃﾞｨ・ｼﾐｭﾚｰｼｮﾝの工学応用

東京大学生産技術研究所
谷口 伸行
ntani@iis.u-tokyo.ac.jp

１．はじめに

乱流シミュレーションの研究、応用を進める上で計算機の演算性能と記憶容量が常に制約であり、一方では、その要求が新しいシステムへの移行やそれに適した解析法開発の強いモーティベーションにもなってきた。90 年代に実用化したレイノルズ平均乱流モデル（RANS：Reynolds Averaging Navier-Stokes）に基づく 3 次元定常解析は、計算機システムのダウンサイジング化を受けて急速に工学設計に普及した。さらに最近では、乱流に伴う非定常現象を直接的に扱いうるラージ・エディ・シミュレーション（LES）の工学分野への応用が始められている。そこで、本報告では、乱流 LES の基礎的な検証計算からエンジン気筒や燃焼器流れへの適用例にいたる研究動向と課題を示し、また、乱流 LES のスカラー並列計算への適合性評価やビジュアリゼーションの効用について大学環境での運用例を紹介する。

２．乱流LES の目的と課題

2.１乱流 LES の工学的意味

非定常性、３次元性の強い乱流場や、回転系や浮力場に生じる外力効果、圧縮性の影響などを一般的に数値シミュレーションで扱おうとすると、流れの基礎方程式―Navier-Stokes 方程式―に基づいた直接計算(DNS)にかかる期待は大きい。しかし、工学設計が必要としている流れに関する情報―主に統計平均的な特性や特定の周波数応答―に対して DNS の扱う自由度（空間、時間の解像度を考慮すると Re 数の 3 乗のオーダー）はあまりにも大きすぎ、将来コンピュータ性能の飛躍的な向上を見たとしても、コストパーフォーマンスを考える限り何らかの近似モデルが有用であることは間違いない。

ラージ・エディ・シミュレーションは、現在のところ、乱流 DNS の最も有力な近似モデルと考えられている。この観点から、LES モデリングへの要求は、

- **充分な解像度の格子ではDNS に収束すること、**
- **充分高いRe 数において要求される解像度が、DNS より低いオーダーであること、**

といえる。格子に対する収束が速いほど、Re 数に対する指数が低いほど優れたモデルと評

価できる。スマゴリンスキモデルが風上差分のみを用いた解析モデルよりも優れると考える根拠もここにある。

2.2 高 Re 数乱流へのブレイクスルー

乱流 LES を現在提案されている物理モデルに忠実に（すなわち、良い予測精度を保って）解析を行うと DNS の１/10 程度の計算負荷を要する。これは、DNS に対して十分小さいが、工学応用として高 Re 数への展開を考えるとまだ過大である。そのボトルネックとして、

・壁面の近似モデル、
・高 Re 数での数値不安定に対する計算スキーム、
・流入境界、エントレイメント境界での乱れの評価、

が挙げられる。予測すべき物理現象の特定とその数学的検討にブレークスルーの道があると考える。

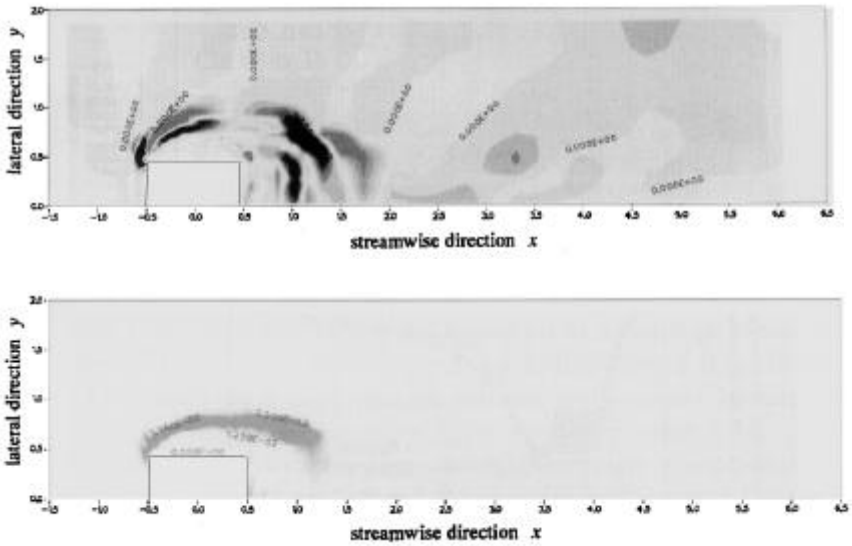

図 1 角柱周り流れ LES における風上差分の影響 [1)]
（上：QUICK 数値粘性誤差の分布、下：SGS 応力モデル（ｽﾏｺﾞﾘﾝｽｽｷｰ）項の分布）

角柱まわり流れのＬＥＳ[1),2)]では壁境界に「壁法則」を用いて高レイノルズ数にも妥当な結果を得ているが、角柱前縁の角点は数値不安定の原因となり、過大な格子解像度か人工的な安定化スキーム（＝数値散逸）を必要とする。後者は、しばしば、本来の LES モデルの散逸を超え、統計平均解にも影響を与える。これらの問題に対する一般的かつ合理的な答えはまだない。精度を要求しない領域では計算の堅牢性を重視するならば、低い解像度においてレイノルズ平均型モデルに漸近させるハイブリッドモデルなどが検討に価しよう。

2.3 複雑乱流場への展開

予測すべき対象が統計平均場のみであるならば、レイノルズ平均モデル(RANS Reynolds Averaging Navier-Stokes）が原理的に優る。実際に、工学設計のパラメータスタディには有効な適用例が多数報告されている。一方、LES には、

・時間・空間変動が直接的に解析できる、

・モデル定数の数が少なく、適用範囲が広い、

の特徴がある。これらを必要とする対象、たとえば、

・不均一、非定常な解を必要とする、

・適切な統計平均モデルが知られていない、

問題にこそ LES の適用が期待される。反応流、混相流、電磁性流などでは流れとの干渉についての基本的なメカニズムが不明確であるため、原理モデルにさかのぼった解析（いわゆる、DNS(Direct Numerical Simulation)=直接数値解析）が試みられている。LES では、これらの解析法を数学的に近似する直接的なモデリングが可能であるため、様々な対象に同じアプローチで展開できると考えられる。たとえば、予混合燃焼に見られる乱流変動による皺状火炎の予測シミュレーション [3]などが試みられている。また、ピストンエンジンのサイクル変動 [4]や、配管・構造物の流体振動など、本質的に非定常な問題に対しては時間平均型モデルの適用が制約されることから、乱流 LES の実用化が期待される。

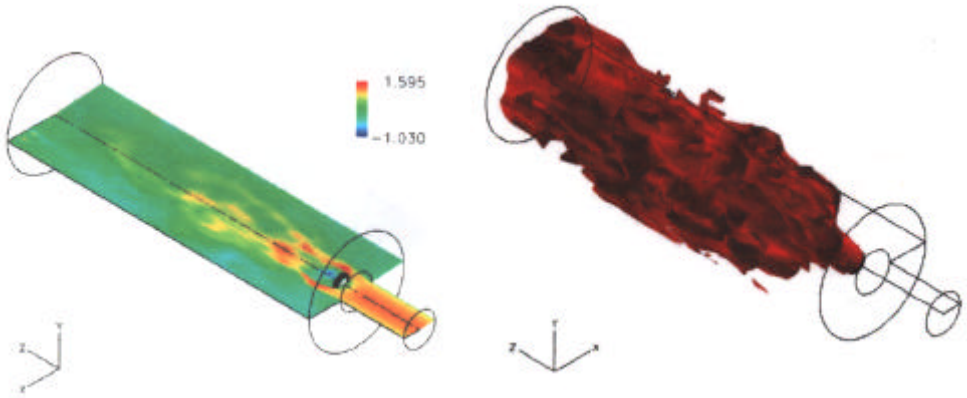

図 2 乱流 LES によるガスタービン燃焼器の火炎予測 [3]
（左：流速、右：火炎の瞬時場の予測結果）

３．乱流LES における計算機性能

3.1 乱流 LES のサンプルプログラム

数値シミュレーションに関する最近のコンピュータ環境をみると、ベクトル演算プロセッサーを用いたスーパーコンピュータから、RISC チップ CPU の演算性能向上、さらに、並列型の超スカラーコンピュータへと、技術開発がめまぐるしく行われてきた。その結果、ユーザーが利用できるコンピュータ資源は、数年前に比べて、その大きさも種類も格段に

向上しており、当然ながらコンピュータ性能に対する評価も変えねばならない。実際にコンピュータ・プログラムを製作、実行するユーザーにとって、適切なコンピュータ環境を選んでいるか、使用したコンピュータが十分に性能を発揮しているかは、きわめて重要な問題である。一方で、流れ場数値シミュレーションは大規模な数値計算を必要とする代表的な事例であり、その主要部分である大規模配列の反復演算は、コンピュータの得意とする処理の一つであることもあって、実用的な流れ場シミュレーションプログラムにおいても最大演算性能に比較的近い効率での実行が可能である。よって、流れ場シミュレーションは汎用コンピュータの実数演算性能を評価するのに適した課題の一つと考えられる。

ここでは、流れ場数値シミュレーション研究において実際に利用しているコンピュータ・プログラムをチューニングする目的で各種のパーソナルコンピュータ、ワークステーション、スーパーコンピュータにおいて実行テストを実施した結果を紹介する。ただし、これらの実行テストは少数の特定プログラムのみを対象に行ったもので、また、実際のプログラム実行環境（マルチユーザー、マルチジョブ環境）のままで実施したため、計測値の一般性や再現性は必ずしも保証できない。また、本報告に記載されていない機種の詳細な仕様や、運用されているソフトウェアーによっても結果が変わる恐れがあることを、あらかじめ指摘しておく。本報告のデータを利用する際には、これらの点に十分に注意されたい。

まず、乱流の数値シミュレーション法であるラージ・エディ・シミュレーション（ＬＥＳ）のために開発した２種のプログラムをサンプルとして用いた[5)]。以下に、本計算での数値解析の概要を示す。解析法の詳細は文献[6)、7)]を、解析内容については文献[8)]を参照されたい。

非圧縮性乱流場ＬＥＳの基礎方程式は以下の通りである。

運動方程式；

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{\partial u_i u_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\nu_t \frac{\partial u_i}{\partial x_j}\right) \qquad (1)$$

$$\nu_t = \left(Cs\Delta\right)^2 \sqrt{\frac{\partial u_i}{\partial x_j}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right)}$$

圧力方程式；

$$\frac{\partial^2 p}{\partial x_i \partial x_i} = -\frac{\partial D}{\partial t} + \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j}\left(\nu_t \frac{\partial u_i}{\partial x_j}\right) - \frac{\partial^2 u_i u_j}{\partial x_i \partial x_j} \qquad (2)$$

$$D = \frac{\partial u_i}{\partial x_j}$$

このうち、運動方程式(1)は各座標方向３成分それぞれについて与えられる。式(1)、(2)

は非圧縮性流れ場の一般的な基礎式であり、乱流粘性ν_tを算出する部分が LES（本計算では、Smagorinski SGS モデルを適用）特有の計算となる。LES では式(1)および式(2)から流れ場、すなわち、速度 u_i と圧力 p の時間変化を得る。ここで、式(1)に２次精度 Adams-Bashforth 法、式(2)に１次精度 Euler 法を用いて時間微分について時間刻みδtで離散化すると、

$$u_i^n - u_i^{n-1} = \delta t \{1.5 f_i (u^{n-1}, p^{n-1}) - 0.5 f_i (u^{n-2}, p^{n-2})\} \quad (3)$$

$$D^{n+1} - D^n = \delta t \{\nabla^2 p^n + g_i (u^n)\} \quad (4)$$

を得る。ここで、上付き添え字 $n-2, n-1, n$ は離散化した時間ステップをあらわす。式(3)は速度成分 u_i^n の３成分について、式(4)は連続の式の条件

$$D^{n+1} = 0 \quad (5)$$

を代入したのち圧力 p^n についての代数方程式とみなして、これらを順次計算することで時間ステップ n の数値解を得る。以上の数値解法は MAC 法と呼ばれ、非圧縮性流れ場シミュレーションに広く用いられている方法である。

(3)、(4)式の右辺 f_i、g_i は空間微分のみを含む。本計算では、偏微分方程式の数値解析手法として一般的な有限差分法（finite deference method；FDM）と有限要素法（finite element method；FEM）を用いた２種類の計算プログラムを使用した。それぞれの計算手法を表１にまとめて示した。

表１ サンプルプログラムの解析法

プログラム名	LES_FDM	LES_FEM
離散化法	有限差分法	有限要素法
計算ｱﾙｺﾞﾘｽﾞﾑ	MAC 法	MAC 法
時間離散化ｽｷｰﾑ	２次精度 Adams-Bashforth	２次精度 Adams-Bashforth
計算格子分割・ 空間離散化ｽｷｰﾑ	直交直線座標格子 2 次精度中心差分	６面体双１次要素 Galarkin 法
圧力ﾎﾟｱｿﾝ式の行列解法	ICCGS 法	CG 法
LES モデル	Smagorinski モデル	Smagorinski モデル

ところで、上記に示した非圧縮性流れの非定常解析において、計算時間の過半は式(4)、(5)から得られる圧力ポアソン方程式の求解に費やされる。特に、乱流 LES のように格子点数の多い問題では反復解法が用いられるが、そこに現れる典型的な演算式を用いたベンチマークテストが姫野[9]、白山[10]よりそれぞれ提案されている。前者は古典的なヤコビ法、後者は SOR 法の代入演算を模擬している。これらは、数 10 行程度プログラムによるポータ

ビリティの良いテストであるため、パソコンも含む多くのシステムでの実行結果が報告されているので、今回のテストでも合わせて取り上げた。なお、白山のオリジナルコードはＣ言語で書かれているが、ここでは著者らの乱流 LES 実行環境に合わせて Fortran に書きなおしたものを用いている.

3.2 実行テスト結果

まず、ＦＤＭおよびＦＥＭを適用したＬＥＳ乱流解析プログラムによるチャンネル乱流シミュレーションをサンプルとした実行テストについて示す。初期条件には前もって同じプログラムで計算した乱流場の数値解を代入し、少数回の時間ステップだけ計算を進行した（実際の解析では約 10000 ステップを実行する）。実行したサンプル計算を表２に、使用した計算機およびその仕様を表３に示す。ここで用いた計算機は東京大学に設置されているもので、大型計算機センター、生産技術研究所共同利用計算機室、あるいは、著者の所属する研究室にて運用されている。実行テストは、実際のプログラム実行環境を想定して、通常のマルチユーザー／マルチジョブ環境で実施した。そのため、計測値の一般性や再現性は必ずしも保証できないが､いくつかのテストから計算時間の測定誤差は数%程度と推定している。また、ここに記載していない機種の詳細な仕様や、運用されているソフトウェアーによっても結果が変わる恐れがあることを指摘しておく。なお、Fortran コンパーラーのオプションについては、メーカーの標準推奨値を用いている。コンパイラーの自動最適化による効果は小さくないこともあるので、使用機種の解説書に従うことをお勧めする。表４に各計算機による計算時間を示した。今回用いた機種のいくつかは複数の CPU で構成されており並列計算が可能であるが、実行テストはすべて単体 CPU で実施した。

各手法のプログラム上の特徴として、FDM では各計算点の長い配列に対する計算が最内側 DO ループとなるが、FEM では要素毎の節点（本プログラムでは８点）に対する計算が最内側 DO ループとなることが多い｡ベクトル演算プロセッサーをもつ機種ではこの点が重要なチューニング対象となるが、スカラー機種においてはあまり大きな影響はないと考えられる。（本テストプログラムはベクトル演算プロセッサー向けのチューニングを行っている。この修正はベクトル演算プロセッサーを持たない計算機では不用であるが、本実行テストでは主に計算機ハードウェアーの性能を判定する目的のため全ての計算機で修正プログラムを使用している。修正を行わないプログラムでは Origin 2000(R10000 198MHz）で約 60%に計算時間が短縮された。）

同様に､ベンチマークプログラム（A:姫野､B:白山､C:加藤）の結果について表 4 に FLOPS 値で示した。いくらかばらつきはあるものの上記 LES コードの結果との相関は妥当なものと思われ、計算性能評価として実際的にも有効といえる。

表２ 実行テストの計算条件

計算ケース	プログラム	計算点（節点）数	時間ｽﾃｯﾌﾟ数	無次元時間刻
FDM-0	LES_FDM	32x64x32=65,536	10	0.01
FDM-1	〃	〃	30	〃
FDM-2	〃	〃	100	〃
FEM-0	LES_FEM	49,060	1	0.01
FEM-1	〃	〃	4	〃
FEM-2	〃	〃	10	〃
姫野 Bench	ヤコビ反復	128x64x64	―	―
白山 Bench	SOR	101x55x51	―	―

表３ 使用した計算機とその仕様

No.	ｺﾝﾋﾟｭｰﾀ機種名	CPU	主ﾒﾓﾘ	OS	ｺﾝﾊﾟｲﾗｰ
0	DEC Alphastation 600-5/333	DEC 21164 (333MHz)	384MB	OFS 1v3.2c	DEC Fortran
1	Visual Technology Alpha 600	DEC 21164A (600MHz)	256MB	Digital UNIX 4.0D	DEC Fortran
2	Compaq XP1000	DEC 21264 (500MHz)	512MB	Digital UNIX 4.0D	DEC Fortran
3	SGI O2	MIPS R5000SC (200MHz)	192MB	IRIX 6.5	Fortran77 4.02
4	Fujitsu S-7000U M350	Ultra SPARC II(336MHz) (x8)	2GMB	Solaris 2.1	Fujitsu Fortran90v1
5	IBM RS6000/590	IBM Power2 (66MHz)	128MB	AIX 3.2.5	Fortran
6	SGI Origin 2000	MIPS R10000 （198MHz）(x8)	1GB	IRIX 6.2	MIPS Power Fortran 7.0
7	SGI Origin 2000	MIPS R12000 （300MHz）(x16)	16GB	IRIX 6.4	MIPS Power Fortran 7.0
8	DELL XPS450	Pentium II (450MHz)	512MB	UNICOS 9.0	CF90 V2.0
9	Visual Technology Alpha 600	DEC 221164A (600MHz)	256MB	Windows NT 4.0	DEC Fortran 1.1
10	Fujitsu VX	(2PE)	2GB	UXP/V	VP-Fortran
11	Hitachi S3800/480		2GB	VOS3/FS	HAP Fortran90

表４ 実行テスト結果

No.	Computer System	姫野 (MFlop)	白山 (MFlop)	FDM (sec) Level-0	1	2	FEM (sec) Level-0	1	2
0	DEC Alpha			114	385	1164	111	412	992
1	VT Alpha	102	73		235				
2	XP1000	209	236		190				
3	SGI O2	30	19						
4	S-7000U		39		477			1127	
5	IBM 590				1452			533	
6	Origin(198MHz)	124	71	80	210	742	88	288	772
	(no-Vec)				125				
7	Origin(300MHz)	236	145		125				
	(2CPU)	389							
	(4CPU)	718							
	(8CPU)	1634							
8	DELL(NT)	91							
9	Alpha(NT)		57						
10	Fujitsu VX	760	376		100				
	(no-vec)			405	1115				
11	HitachiS3800			26	38	105			
	(no-vec)						238	789	

* 計測は time ｺﾏﾝﾄﾞなどで表示される全 CPU 時間(sec)による

* no-Vec は、ベクトル化修正をしないプログラムを使用

４．おわりに

本報告で紹介したように、乱流 LES は基礎的研究から工学応用に展開されつつある。それに伴い､従来の乱流モデルの検証に加えて､工学的な観点から計算安定性や計算負荷の問題にも関心が向けれている。将来的には、既に普及しつつある定常解析ツールと同様に、非構造格子あるいは複合格子を用いた実用問題の解析へ向かうことは間違いないであろう。

また、乱流 LES における計算機利用の一指標として、乱流 LES の典型的なプログラムを用いた実行性能を示した。ここでは、主にスカラー計算機の単体 CPU 性能を評価したが、現在ほぼ全てのシステムにおいて複数ＣＰＵで構成される並列計算機能がサポートされており並列計算機能を考慮した同様の実行テストを計画している。並列計算を効率よく実行するにはプログラム修正が必要となるが、並列計算を指示するためのプログラム言語が統一されていないことが大きな障害となっている。たとえば、Fortran90 や C++においても並列化プログラムが明確に定義されていないことは、コンピュータユーザーにとって不満の残る点である。なお、本実行テストに使用したプログラムの入手については著者（ntani@iis.u-tokyo.ac.jp）へ連絡されたい。

参考文献

1)Kobayashi 他,"Large Eddy Simulation for Turbulent Wake of Bluff Body", JSAE Spring Convention (1998) 9832747,

2)小垣、東京大学博士論文（機械工学）(1999)

3)Taniguchi 他,"Large Eddy Simulation of a Premixed Combustion Flow in a Gas Turbine Combustor", IJPGC'99

4)Zhang他、"Prediction of Engine Port-Cylinder Flow By Using Large Eddy Simulation", JSAE Spring Convention (1999)

5)谷口 "流れ場シミュレーションプログラムにおける計算機性能の比較"、生産研究 48-8 (1997)、345-348

6)谷口 他,第 9 回 NST ｼﾝﾎﾟｼﾞｳﾑ論文集(1994), 49-52

7)M.Tsubokura 他,ASME FED215(ASME-JSME Joint Conf. Fluid Eng.,1995), 81-87

8)谷口 他, 生産研究 49-1(1997), 11-18

9)姫野、http://w3cic.riken.go.jp/HPC/HimenoBMT/index.html

10)白山晋、私信