

VPP5000 による乱流の直接数値シミュレーション

東京理科大学 理工学部
機械工学科
河村 洋
kawa@rs.noda.sut.ac.jp

1. はじめに

乱流はその複雑さのために従来から未だ十分に解明され得ない現象の一つとされて来た。乱流の複雑さの最も大きな原因は、乱流渦の多重性と相互作用にある。たとえば、火山の噴火にともなう巨大な噴煙を見ると、大きな凹凸の中に小さな凹凸があり、その中にさらに小さな凹凸があるという風に、多重に入り組んだ構造になっている。これが乱流渦の多重性の典型的な例である。庭の焚火やタバコの煙程度では、このような多重構造は現れない。流れの規模が大きくなればなるほどこの多重性が顕著になるというのが乱流の特徴である。乱流といえども、それを記述する基礎式は知られている。それらは、物質の保存に関する「連続の式」と運動量の保存に関する「ナビエ・ストークスの方程式」である。にもかかわらずコンピュータ上で乱流を解くことが困難なのは、上述の乱流渦構造の多重性にある。すなわち、噴煙全体の運動も個々の小さな乱流渦の運動と強く関連している。というのは、乱流運動のエネルギーは、平均流からまず大きな渦に伝えられ、次に次第に小さな渦へと伝えられて最終的には熱エネルギーとして散逸される。そのため、どうしても小さな乱流渦までを計算しなくては乱流運動のエネルギーの流れを完結させることができないのである。これが乱流のシミュレーションが莫大な計算量になる理由である。もっとも、小さな渦といっても無限に小さな渦まで存在するわけではなく、渦の大きさには下限があり、これがいわゆるコルモゴロフスケール()である。そのためこのスケールまで数値計算のメッシュを細かく切り、十分高精度な数値スキームを使用すれば、乱流といえども数値的にシミュレートすることができる。厳密に言えば、数値的に乱流を再現するには、計算領域による影響をなくすために、平均流により励起される大きな渦を十分に捉えるほど大きな計算領域を設定しなければならない。これが乱流の直接数値シミュレーションすなわち DNS (Direct Numerical Simulation) である。

乱流の DNS は、レイノルズ数が低かつ流れ場の形状の単純な場合に限って可能になってきたものの、レイノルズ数が高かつ形状も複雑な実用的な流れは取り扱うことはできない。そこで、大きな渦のみを扱い乱流エネルギーの散逸プロセスはモデル化して近似的に扱うのが、 $k-\epsilon$ モデルに代表される乱流モデルの手法である。この中間に、メッシュをできる限り細かく切るが、それ以下のスケールの渦におけるエネルギー散逸はモデル化しようというアプローチがある。これを LES (Large Eddy Simulation) と呼んでいる。

最初の乱流の DNS は、すでに 1972 年に Orszag⁽¹⁾によって一様乱流(空間的に一様で固体境界のない仮想的な乱流)について行われた。メッシュ数(フーリエモード数)は $32 \times 32 \times 32$ で、これは現在ならパソコンでも実施できる規模である。固体壁に接するより複雑な乱流については、

平行平板間乱流に対して、Kim ら(1987)⁽²⁾が最初に DNS の結果を発表した。彼らの計算のレイノルズ数は、平均流速と等価直径に基づくレイノルズ数で 5,600 であった。レイノルズ数とはいわば、流れの平均流速に関する無次元数で、平均流速が大きくなるほどレイノルズ数も大きくなり、前述の乱流渦の多重構造も複雑になる。平行平板間の流れが乱流に遷移するのはレイノルズ数が約 3,000 ~ 4,000 である。したがって、最初の DNS が行われたレイノルズ数 5,600 という乱流は、層流から遷移したばかりのいわば若い乱流ではあるが、対数速度領域も存在し、壁乱流としての特性を十分そなえた流れが、コンピューター上に再現された。

現在までに行われている乱流の DNS のレイノルズ数が低いのは、レイノルズ数が高くなるにしたがって、乱流渦の多重構造が複雑になるために、より小さな渦まで存在するようになり、それを解像するためにより多数の計算メッシュ数を必要とするからである。本研究の対象となる、平行平板間乱流についてこれまで行われた最高のレイノルズ数は、我々のグループ⁽³⁾が 1998 年に達成した 24,300 である。この値は、最初に行われた DNS のレイノルズ数の約 3 倍でこの十年間の進歩としては、比較的遅々とした歩みである。これは、レイノルズ数が大きくなるにつれて必要なメッシュ数が急激に増大することによる。流れのレイノルズ数に対して必要なメッシュ数を推定したのが Fig. 1 である。この図からわかるように、たとえば、レイノルズ数が 100,000 という実験では標準的なレイノルズ数の流れを考えると、必要なメッシュ数は 2×10^9 程度のメッシュ数が必要で、これは約 1TB (テラバイト) のメモリー容量に相当し、現在これを満たすコンピューターは存在しない。

そこで、本研究では、VPP5000 を用い現状のコンピューターの性能を限りなく使用して、更に大規模な計算を行うことを目的とする。本報告書では、この計算の計算状況を、NWT 時の計算と比較して報告する。

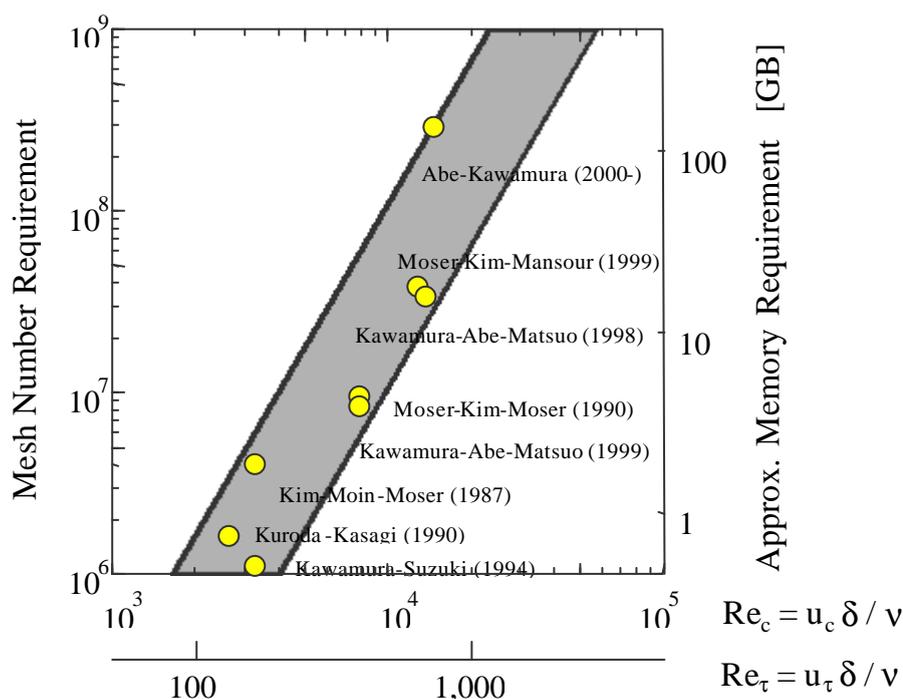


Fig. 1 Development of DNS for turbulent channel flow

2. 計算対象

計算対象を Fig. 2 に示す。領域は、流れ方向に 12.8δ 、壁垂直方向に 2δ 、スパン方向に 6.4δ を設定した。流れは、平均圧力勾配により駆動され、流れ方向及びスパン方向には、周期境界条件を課した。また、統計量を収集する際には、十分発達した流れ場を適用した。なお、本計算において用いられたレイノルズ数は、壁面摩擦速度 u_τ 及びチャンネル半幅 δ によって無次元化されたレイノルズ数 Re_τ で 180、395、640 の 3 種類である。

支配方程式は、連続の式、Navier-Stokes 方程式よりなる。壁面摩擦速度 u_τ 及びチャンネル半幅より無次元化すると、連続の式は、

$$\frac{\partial u_i^+}{\partial x_i^*} = 0$$

Navier-Stokes 方程式は、

$$\frac{\partial u_i^+}{\partial t^*} + u_j^+ \frac{\partial u_i^+}{\partial x_j^*} = -\frac{\partial p^+}{\partial x_i^*} + \frac{1}{Re_\tau} \frac{\partial^2 u_i^+}{\partial x_j^* \partial x_j^*} + \frac{\partial \bar{p}^+}{\partial x_1^*} \delta_{i1}$$

と表される。また、境界条件は

$$u_i^+ = 0, \text{ at } y=0 \text{ and } 2d$$

となる。

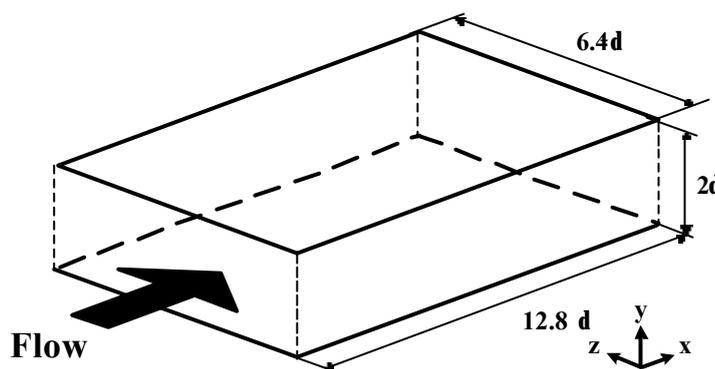


Fig.2 計算対象

3. 計算手法及び計算条件

計算条件を Table 1 に示す。レイノルズ数は、壁面摩擦速度 u_τ とチャンネル半幅 δ によって無次元化されたレイノルズ数 Re_τ で 180、395、640 の 3 種類のレイノルズ数において計算を行った。

Table 1 計算条件

Grid		Staggered Grid
Coupling algorithm		Fractional Step Method
Time advancement	Viscous terms(y-dir.)	2 nd -order Crank-Nicolson Method
	Others	2 nd -order Adams-Bashforth method
Discretization scheme	Nonlinear terms	2 nd -order central scheme (Consistent) 4 th -order central scheme
	Viscous terms	2 nd -order central scheme 4 th -order central scheme
Poisson equation		Pseudo-spectral method
Boundary condition		Periodic (x,z dir.), Non-slip (y-dir.)
Reynolds number		$Re_\tau = 180, 395, 640$

$Re_{\tau} = 180$ の計算は、東京理科大学の VPP5000 で単 CPU による計算を行った、一方、 $Re_{\tau} = 395$ 、640 の計算は、名古屋大学大型計算機センターの VPP5000 において並列計算を行った。使用したコンピュータの性能を Table 2 に示す。なお、比較のために、NWT のコンピュータ性能も合わせて記す。

Table 2 使用コンピューター

	VPP5000/3	VPP5000/56	NWT
所在	東京理科大学	名古屋大学 大型計算機センター	航空宇宙技術研究所
GFLOPS / CPU	9.6	9.6	1.7
GB / CPU	7.5	7.5	0.256
全 CPU 数	3	56	166
使用 CPU 数	1(2)	16 (32)	1 ~ 8、16、64
利用形態	学内 一般ユーザー	共同利用 一般ユーザー	共同研究
利用期間	1999.10 ~	2000.7 ~	1994 ~ 2000.3

4. 計算結果

本計算対象は、 x 、 z 方向は一様な流れの分布とみなせるので、計算の大部分は壁面に対して平行に計算領域を分割して行った。なお、圧力ポアソン方程式は、 x 、 z 方向に Fast Fourier Transform (以下、FFT)、 y 方向は Tri-Diagonal Matrix Algorithm (以下、TDMA) を用いて計算しているため、各計算ステップでデータの転送が必要となる。また、VPP5000 はベクトル計算機なので、並列化のみならずベクトル化も有効な計算を行うためには不可欠である。このベクトル化に関しては特に配慮し、圧力ポアソン方程式を計算する際には、FFT の計算の場合には、 x 、 z 方向にベクトル化、 y 方向に並列分割して計算を行った。他方、TDMA の計算の場合には、 x 方向にベクトル化、 z 方向へ並列分割を施して計算を行った (Fig. 3 参照)。

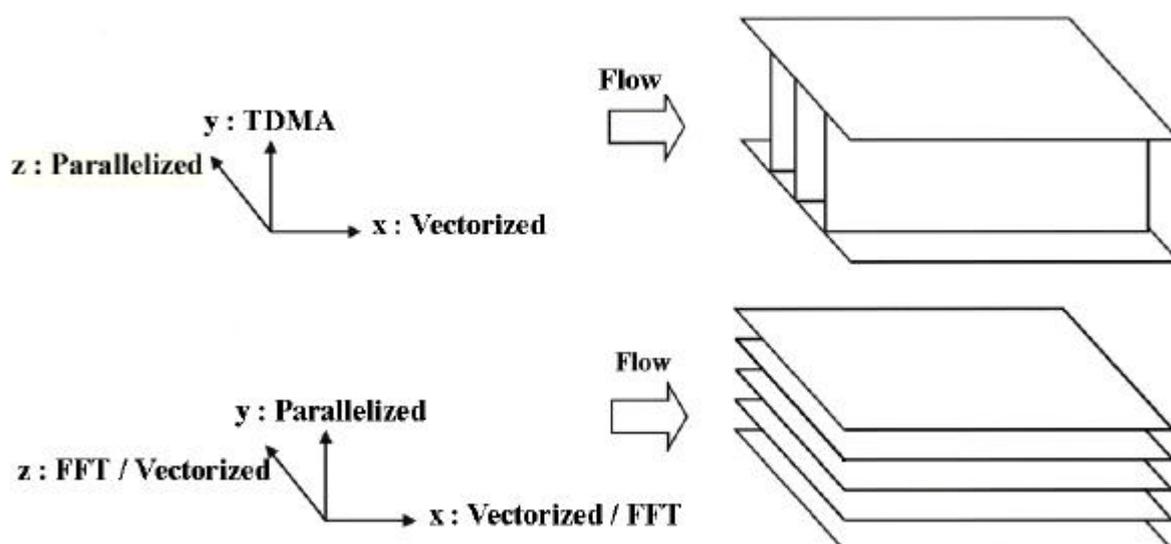


Fig. 3 Domain decomposition and vectorized parallel computation

NWT において、本計算プログラムの並列効率を $Re_{\tau} = 180$ の比較的小さな計算(総格子点数: 約 800 万点)に対して計測した。なお、本計算は NWT 単 Processing Element(以下、PE)ではメモリー不足により計算が実行できなかったため、16PE の計算を比較の基準とした。この場合、並列効率は下記の式で定義される。

$$E(n) = \frac{16 \cdot (\text{time with } 16PE)}{n \cdot (\text{time with } nPE)}$$

Fig. 4 に並列効率を、Fig. 5 に 100 ステップ当たりの計算時間を示す。Fig. 4 より、PE 数が増加するにつれて並列効率が減少することが分かる。これは、本計算は基本的に y 方向に並列分割しているため、64PE 計算時には 1PE が担う計算量は 2 レイヤー分となり、計算量が少ないことが原因であると考えられる。それにもかかわらず、Fig. 5 に見られるように、計算時間自体は、64PE まで PE 数が増加するにつれて十分よく減少している。従って、並列計算は、メモリー量の面だけでなく計算時間の面でも有効であると言える。なお、並列効率は、計算規模が増加するにつれて改善されると考えられる。

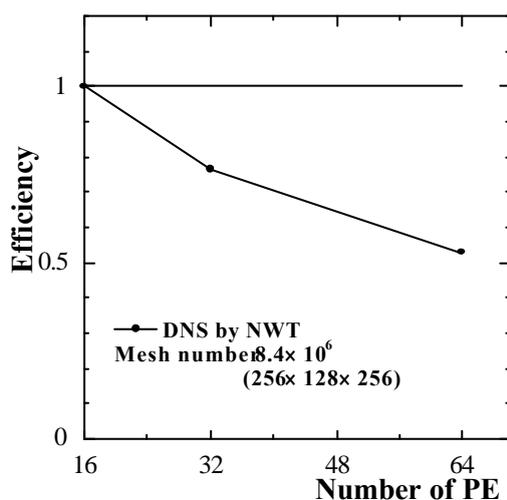


Fig. 4 Parallel efficiency

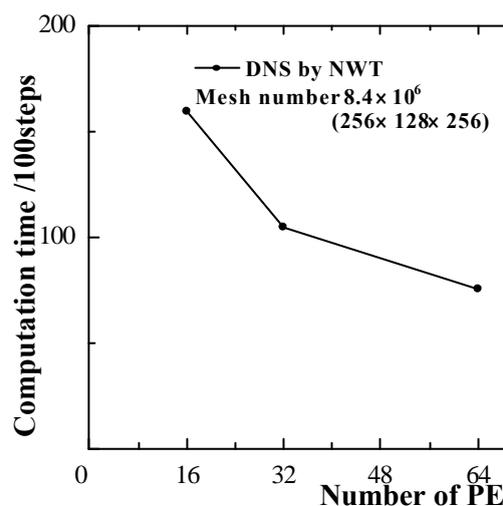


Fig. 5 Computation time

NWT 並列計算時と VPP5000 単体計算時の性能を比較する。計算条件を Table 3 に、計算結果を Table 4 に示す。結果として、VPP5000 単体の計算速度は、NWT 単 PE の計算速度に対して約 15 倍速い結果が得られた。これは、CPU の高速化と並列度の低減の双方の効果によるもので、妥当な結果と考えている。

Table 3 比較条件

テストケース	平行平板間乱流 (クエット、スカラー含む)	
メッシュ数	128 × 96 × 128	
メモリーサイズ	700MB on VPP5000	
使用コンピューター	NWT	1.7GFLOPS/PE
	VPP5000	9.6GFLOPS/PE

Table 4 比較結果

使用コンピューター	使用PE数 (PE)	計算速度 (step/sec)	計算速度 (1PE換算)
NWT	8	1.7	0.21 step/sec/PE
VPP5000	1	3.0	3.0 step/sec/PE

本研究で、最も大規模な $Re_\tau = 640$ の計算は、名古屋大学大型計算機センター用に変更したプログラムを用い、計算領域も拡大して、VPP5000 で実施中である。Table 5 に NWT と VPP5000 の $Re_\tau = 640$ の計算条件を比較して示す。これに先立ち、NWT 計算時の計算条件において、NWT と VPP5000 の並列計算時における性能比較を行った。結果を Fig. 6 に示す。Fig. 6 より、VPP5000 の並列計算時ではシングル PE の性能から期待される計算速度には、必ずしも達していないことが分かる。また、本計算では、ELAPS Time と CPU Time の差が大きい結果を得た。これは、FFT 及び TDMA 計算時に発生する大量なデータ転送が原因と考えている。

Table 5 Computation of $Re_\tau = 640$

Computer	NWT	VPP5000
Processors	64PE	16PE
Domain size	$6.4\delta \times 2\delta \times 2\delta$	$12.8\delta \times 2\delta \times 6.4\delta$
Mesh Number	$512 \times 256 \times 256$	$1024 \times 256 \times 1024$
Memory size	12GB	120GB
Computation time	1.35 step/s	6.0 step/s
Total CPU time	500 hours	-
Status	Finished	Started

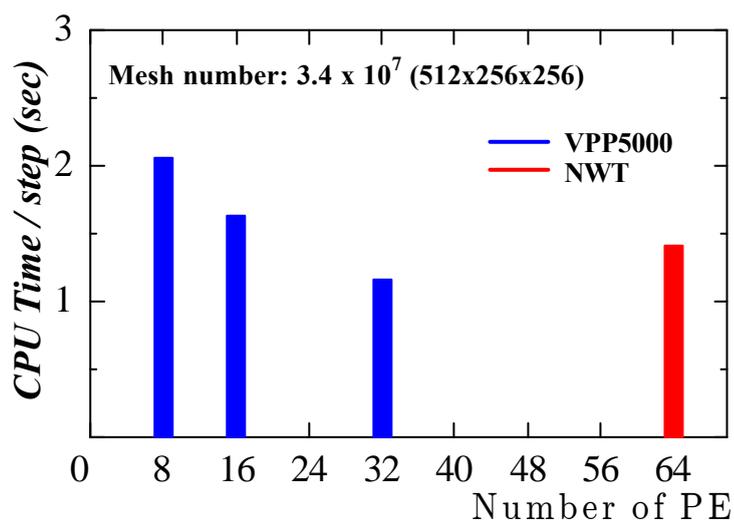


Fig. 6 Comparison of the performance between NWT and VPP5000 through a preliminary test run

このようにして計算した平行平板間乱流の DNS の結果から、壁面近傍の低速・高速ストリークを可視化した結果を Fig. 7、8 に示す。ここでストリークとは、粘性低層付近に低速・高速の流体が集まってできる縞状の構造のことである。元来、乱流は全くランダムな流れの形態を持つと考えられがちだが、何十年も前から乱流には準秩序的な構造が存在することが実験より見出されている。今回の DNS の結果からも、壁面近傍に低速・高速ストリーク等の準秩序的な構造がはっきりと捉えられている。さらに、レイノルズ数が高くなるにつれて乱れが間欠的となるために、構造が複雑になること等の新しい知見も得た。このように、DNS の結果は、実験では測定することが困難なデータを任意の位置、時間で求めることができ、現在では乱流現象の把握や乱流モデルの開発に必要不可欠なツールとなっている。

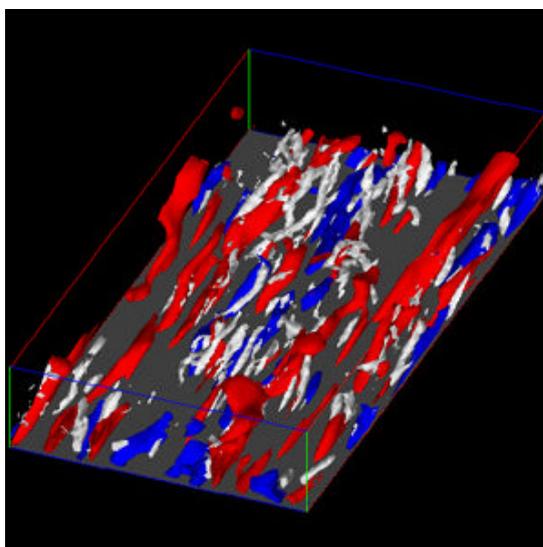


Fig. 7 High- and low-speed streaks and low pressure regions for $Re_\tau = 180$

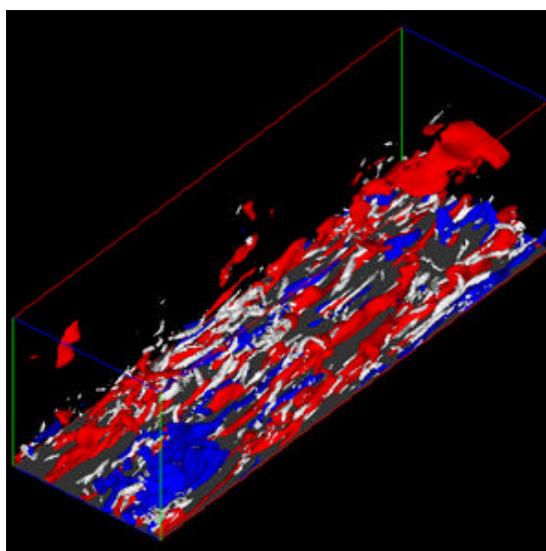


Fig. 8 High- and low-speed streaks and low pressure regions for $Re_\tau = 640$

5. 結論

(1) NWT と VPP5000 の比較

) 記憶容量 (メモリー)

- ・ VPP5000 では、1PE 当たりのメモリー量が大きくなり、単 CPU または低い並列度での計算が可能となった。

) 計算速度

- ・ シングル PE 使用時は、VPP5000 は NWT の計算速度に対して、十分良好な結果を得た。
- ・ 並列 PE 使用時では、VPP5000 はシングル PE の性能から期待される計算速度に必ずしも十分には達しなかった。
- ・ ELAPS Time と CPU Time の差が大きい結果を得た。これは、本研究で使用している計算プログラムには、並列計算の際、多数の大量なデータ転送があるため、大規模な計算を行った場合に影響が顕著に現れるためである。今後、並列化等プログラムの検討をする余地がある。

(2) 乱流の DNS

) 現状

- ・ 乱流の DNS が始まってから既に 20 年以上経ち、歴史及び経験が蓄積されつつある。
- ・ 計算の規模は、常にスーパーコンピュータの発展と共に歩んできており、実際的な規模の乱流の DNS が、可能な範囲に入ってきた。

) 我国における状況

- ・ 計算規模の面等、現在世界をリードする状況である。
- ・ ベクトルコンピュータという優れたハードを多数所有し、このコンピュータに適したプログラム等のソフトの面も充実してきている。

) 今後の展望

- ・ より現実に近い複雑な流れの解析の実用化と一般化が望まれる。
- ・ 既存のベクトルプログラムの資産を発展、継承することが重要である。

6. 謝辞

1. 本計算の一部は、航空宇宙技術研究所の数値風洞 NWT(Numerical Wind Tunnel)を用いて計算を行った。なお、計算の実行にあたっては、航空技術研究所の松尾裕一室長に多大なご支援を頂いた。記して謝辞を表す。
2. 現在、中規模の計算は東京理科大学の VPP5000 で単 PE 計算を行なっている。一方、大規模な計算は名古屋大学大型計算機センターの VPP5000 で並列計算を行っている。本計算にあたり、計算機センター各位には多大なご助言、ご配慮を頂いた。記して謝辞を表す。

[参考文献]

- (1) Orszag, S. A. and Patterson, G. S., " Numerical simulation of three-dimensional homogeneous isotropic turbulence, " *Phys. Rev. Lett.*, 28, pp.76-79., 1972.
- (2) Kim, J., Moin, P. and Moser, R., " Turbulence statistics in fully developed channel flow at low Reynolds number, " *J. Fluid Mech.*, vol. 177, pp. 133-166, 1987.
- (3) Kawamura, H., " Direct numerical simulation of turbulence by parallel computation, " *Proc. 10th Int. Conf. Parallel CFD*, 19-21, 1998.
- (4) Kawamura, H., Abe, H. and Matsuo, Y., " DNS of turbulent heat transfer in channel flow with respect to Reynolds and Prandtl number effects, " *J. Heat and Fluid Flow*, vol. 20, pp. 196-207, 1999.
- (5) Kawamura, H., Abe, H. and Matsuo, Y., " Direct numerical simulation of turbulent channel flow by parallel computation, " *Parallel computational Dynamics*, Elsevier, pp. 3-9, 1999.