

令和 6 年 6 月 14 日現在

機関番号：33903

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2021～2023

課題番号：21K11927

研究課題名（和文）非圧縮3次元乱流のスペクトルの解像度をもった並列計算手法の開発

研究課題名（英文）Development of parallel solvers with spectral-like resolution for three-dimensional incompressible turbulence

研究代表者

岡本 直也（Okamoto, Naoya）

愛知工業大学・工学部・准教授

研究者番号：80547414

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 700,000円

研究成果の概要（和文）：大気・海洋などの地球規模流動現象や、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。乱流現象の予測や解明には、めざましい発展を遂げている計算機を利用した計算科学的手法、特に基礎方程式をモデル化せずに厳密に解く直接数値計算（DNS）が強力な手段となってきた。本研究では、昨今の超並列計算機に親和するような局所通信を多用する計算手法に基づく計算手法の開発を行ったほか、エクストリームイベントを有するような乱れの強い乱流に対して、丸め誤差が乱流のDNSに与える影響を系統的に調べることができた。乱れのより強い乱流の方が、丸め誤差の影響が出やすいことがわかった。

研究成果の学術的意義や社会的意義

フーリエ・スペクトル法は高精度であるものの、大域的通信を多用するため、高精度でありながら計算コストの低い乱流並列数値計算手法の開発が望まれている。本研究では、可能な限り局所的な通信を多用する乱流並列数値計算手法の開発に関する知見が得られており、それゆえ昨今の超並列計算機を利用する研究に貢献する知見が得られている。また、大規模な計算が身近になり、ますます乱れの強い乱流の直接数値計算が行われつつある。そのような大規模計算においては、丸め誤差が計算の結果に与える影響の知見が重要であるが、本研究ではその知見に関する成果が富岳での計算を利用し得られつつある。

研究成果の概要（英文）：Global-scale flow phenomena such as the atmosphere and oceans, as well as various flow phenomena of societal interest, are in a state of turbulent flow. Computational science methods, which have made remarkable progress, have become powerful tools for predicting and elucidating turbulent phenomena. In this study, we have developed a computational method based on a computational technique that makes extensive use of local communication, which is well suited to today's massively parallel computers, and we have systematically investigated the effect of rounding error on the turbulent DNS for highly turbulent flows that have extreme events. It was found that more turbulent flows are more likely to be affected by rounding errors.

研究分野：計算流体物理学

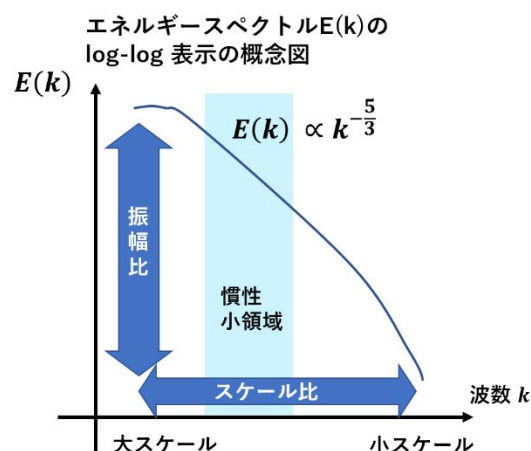
キーワード：乱流 シミュレーション 並列計算 高解像度

1. 研究開始当初の背景

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。従って、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。乱流研究の挑戦的目標の1つは、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。従来のフーリエ・スペクトル法による高精度な乱流の直接数値計算(DNS; Direct Numerical Simulation)はその目標に資するものであるが、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(ナビエ・ストークス方程式)の非線形項の計算においてエイリアス誤差を完全に除去する際に高速フーリエ変換を多く用いるため、大域的な通信に多大な計算時間が費やされる。したがって、通信量の面で超並列計算機では非効率的である。今後、高レイノルズ数乱流基礎データを構築していくためには、信頼性を失うことなく可能な限り計算コストの低い数値計算スキームの開発が重要であると考えられる。計算コストに関連するものは、(A)空間・時間離散化のスキームに何をを用いるか、(B)また空間刻みや時間刻みをどのように設定するか、あるいは(C)数値計算で扱う数字の桁数をどの程度にするかなどが主なものである。

2. 研究の目的

本研究では、(I) 数値計算スキームの計算コストの低減を目指す1つの方向性として、スペクトル法ほど大域通信を必要としないながらも空間微分を高精度に実空間で計算できる差分法に注目し、スペクトル的解像度をもつ高精度な差分法に基づいた3次元非圧縮乱流の高効率な並列ソルバーを開発する。また、今後のターゲットとする高レイノルズ数乱流は、その乱流中に含まれるスケール比や速度の振幅の比が大きいため(右図)、計算に用いられる桁数(倍精度・単精度など)が、数値計算結果に与える影響の理解も重要であると考えられる。したがって(II) 桁数が乱流 DNS に与える影響を検証する。特に従来に知見が乏しい、高レイノルズ数乱流の特徴の1つであるエクストリームイベントを有する乱流をターゲットとし、その視点から研究を行う。エクストリームイベントとは、物理量の空間的な変動に、空間平均値より数オーダーも大きい変動がみられる場所があることをさす。



3. 研究の方法

(I)においては、空間的離散化には6次精度コンパクト差分、時間方向には4次のRunge-Kutta(RK4)法を用い、流れの速度場の非圧縮性をみとすために必要な圧力のポアソン方程式の解法には、Laizetら[1]と同様に高速フーリエ変換を利用した。並列化にはMPI-OpenMPのハイブリッド並列を利用し、速度場や圧力場のデータ構造は2軸のペンシル型であり文献[2]と同様である。この並列数値計算コードをCD6-RK4と略す。特に本研究では、高性能計算のために、プログラムの高速化を逐次処理・並列処理の両視点から検討する。並列計算機としては富岳と同様なアーキテクチャの計算機である名古屋大学の情報基盤センター不老を用いる。

(II)においては、空間離散化にはスペクトル法、時間方向にはRK4を用いる乱流直接数値計算コードの倍精度DNS・単精度DNSの計算結果を比較することで行う。高レイノルズ数乱流の特徴の1つであるエクストリームイベントを有する乱流をターゲットとし、低次の統計から高次の統計まで系統的に比較を行う。

4. 研究成果

(I)これまでに作成したCD6-RK4[3]を、「不老」にて分析・チューニング作業を行った。CD6-RK4の計算コストは、差分法を計算する部分とポアソン方程式を解く部分の2つに大別される。CPU時間の内訳を分析したところ、差分法の部分については、並列処理よりも逐次処理における計算時間の方が大きいことが明らかになった。特に逐次処理におけるあるdo loopの処理が遅く、その中でもL2キャッシュアクセス待ち時間が多大であることが明らかになった。改善としてdo loop内の配列の数を減らすことなどを行った結果、当該do loop箇所だけに注目すると約4.8倍高速になった。このようなチューニングを差分法の計算を行う部分全てに行い再度CPU時間を計測したところ、並列処理の方が逐次処理より計算時間が多くなることがわかった。分析の

結果、並列処理においては、通信部分の占める割合が大きいことがわかったため、この通信時間を減らすことが次の課題であると判断した。

コンパクト差分法は3重対角行列の解法が必要となるが、その並列手法の1つである、Mattorら[4]のものを現在利用している。この手法は、もともと準大域的な通信を含むものであるが、最近、ある近似を用いてこの手法を局所通信化することが行われ、圧縮性乱流に対して検証が進んでいる[5]。この近似は丸め誤差程度の誤差しか許容しない手法であるため、近似の精度は極めて高く信頼性は高いと考えられる。本研究では、この手法を非圧縮乱流のCD6-RK4に適用することを試みた。開発したコードを局所CD6-RK4と略すことにすると、局所CD6-RK4によって得られたテイラーグリーン流れの数値解は、局所化を行わない通常のCD6-RK4の数値解と丸め誤差程度の差でよく一致することが明らかになった。このことから開発したコードの信頼性がある程度検証され、次のステップとして局所CD6-RK4を用いて乱流の計算を行い、スペクトル法のDNSと比較を行う予定である。

(II) 図1(上)は、乱流場のエンストロフィー(速度の微分量から構成される2次の量)の空間的最大値の時間依存性を示している。赤が倍精度DNSによる結果で、青が単精度DNSによる結果である。前半の時間範囲($t/T < 1.6$)では赤と青がよく重なっているのに対し、後半の時刻範囲($1.6 < t/T < 2.6$)ではずれがみられ、最大で2, 3倍程度のずれがあることがわかる。この前半の時刻の振る舞いについては過去の研究[6]と定性的に一致している。一方、後半の時刻の範囲において、単精度DNSが倍精度DNSの結果を過小評価する傾向があることはYeungらの研究[6]では報告されておらず、本研究による富岳上の長時間大規模DNSで初めて明らかにされた。

図1(下)は、乱流場のエンストロフィーの p 次モーメントの p 乗根の時間依存性を示している。次数が小さいとき($p < 3, 4$)、調べた時間範囲にわたって倍精度DNSと単精度DNSの違いはほとんど無視できることがわかる。一方、次数が大きいくとき($4, 5 < p$)では、後半の時間範囲でずれがみられることがわかる。この結果は、丸め誤差の影響は、注目している統計量によって異なることを意味している。

この高次の統計は、高レイノルズ数乱流の特徴の1つであるエクストリームイベントの物理量とよく関連した量であるため、エクストリームイベントの解析を行う際は倍精度あるいはそれ以上の桁数によるDNSが望ましいことを示唆している。その他の統計量の比較や可視化図ならびにレイノルズ数依存性などについては文献[7]を参照されたい。

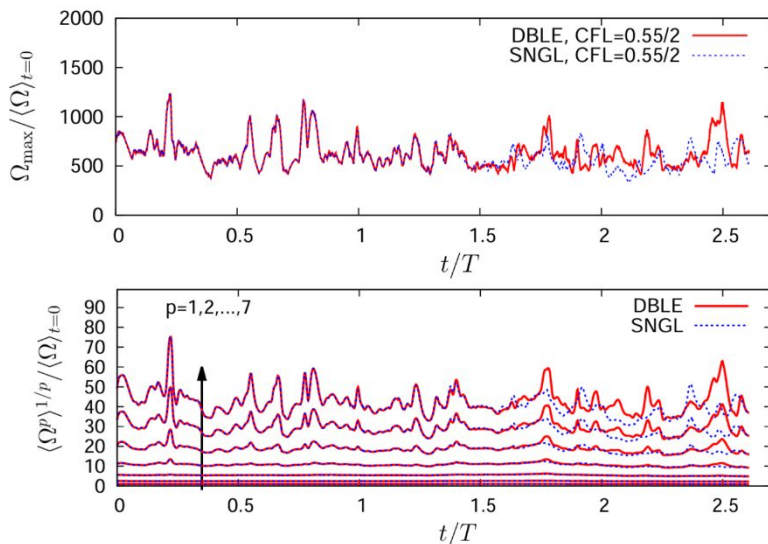


図1:(上)局所エンストロフィーの空間的最大値(ただし初期時刻0での空間平均値で規格化されている)の時間依存性を示す。横軸は大スケールの特性時間Tで規格化されている。(下)局所エンストロフィーの p 次モーメントの p 乗根の時間依存性を表す。規格化は上の図と同じである。テイラーマイクロスケールレイノルズ数は268程度である。

参考文献

- [1] Laizet, Lamballais, J. Comput. Phys., 228(16), 5989-6015 (2009).
- [2] Ishihara, Morishita, Yokokawa, Uno, Kaneda, Phys. Rev. Fluids, 1(8), 082403 (2016).
- [3] 学際大規模情報基盤共同利用報告書「3次元非圧縮一様乱流の超並列計算に向けて」
<https://jhpcn-kyoten.itc.u-tokyo.ac.jp/download/final/jh190044-NAH.pdf>
- [4] Mattor, Williams, Hewett, Parallel Computing, 21(11), 1769-1782 (1995).
- [5] 杉浦, 横川, 櫻井, 石原, IPSJ SIG Technical Report, 2020(18), 1-8 (2020).
- [6] Yeung, Sreenivasan, Pope, Phys. Rev. Fluids, 3(6), 064603 (2018).
- [7] Okamoto, Ishihara, Yokokawa, Kaneda, Effects of finite arithmetic precision on large-scale direct numerical simulation of box turbulence by spectral method, (to be submitted)

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計1件（うち査読付論文 1件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 1件）

1. 著者名 岡本直也、松崎継生、横川三津夫、金田行雄	4. 巻 8
2. 論文標題 時間・空間スキームが非圧縮性等方乱流の直接数値計算に与える影響	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 HPCI利用研究成果集	6. 最初と最後の頁 1-11
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -

〔学会発表〕 計2件（うち招待講演 0件 / うち国際学会 1件）

1. 発表者名 岡本直也、石原 卓、横川 三津夫、金田 行雄
2. 発表標題 3次元非圧縮一様等方性乱流大規模DNSにおける丸め誤差の影響
3. 学会等名 日本流体力学会 年会2023
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Takashi Ishihara, Naoya Okamoto, Mitsuo Yokokawa, Yukio Kaneda
2. 発表標題 Effects of arithmetic precision in large-scale direct numerical simulation of incompressible turbulence in a periodic box
3. 学会等名 Bulletin of the American Physical Society, 76th Annual Meeting of the Division of Fluid Dynamics (国際学会)
4. 発表年 2023年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
---------------------------	-----------------------	----

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8 . 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------