

# 乱流 DNS における種々の時間積分スキームの評価

松崎 継生<sup>1</sup> 岡本 直也<sup>2</sup> 横川 三津夫<sup>1</sup> 金田 行雄<sup>3</sup>

**概要:** フーリエ・スペクトル法による一様等方性乱流の直接数値シミュレーション (DNS) では、その計算時間の大部分が、3次元離散フーリエ変換 (3D-FFT) で占められている、並列化による高性能計算が期待されるが、並列化 3D-FFT の全対全通信は、近年のスーパーコンピュータのネットワークポロジには適しておらず、計算時間の多くが通信時間となってしまう、乱流の普遍的統計法則を解明するために必要な高レイノルズ数での大規模乱流 DNS が事実上困難となっている。本研究では、DNS で良く用いられる時間積分スキーム (4次ルンゲ・クッタ法) の代わりとなりうる種々の時間積分スキームを用いることで、3D-FFT の適用回数自体を減らし、乱流 DNS の計算時間を短縮することを目的とする。本論文では、これらのスキームによって得られる乱流場の統計量を評価することで、スキームの妥当性について検討した結果を報告する。

TSUGUO MATSUZAKI<sup>1</sup> NAOYA OKAMOTO<sup>2</sup> MITSUO YOKOKAWA<sup>1</sup> YUKIO KANEDA<sup>3</sup>

## 1. はじめに

1960年代から始まった一様等方性乱流の直接数値シミュレーション (DNS) は、近年のプロセッサの性能向上の恩恵により計算格子点の数を  $12,288^3$  まで増加させたシミュレーションが可能となっており、そこから得られる高精度な乱流データの解析は、乱流現象の普遍統計法則の解明、あるいは乱流モデル開発における乱流情報の縮約化のための有用な手段となっている [1], [2]。しかし、現段階で事実上実行可能な DNS で用いられるレイノルズ数は、自然界に現れる乱流のレイノルズ数 ( $O(10^7 \sim)$ ) にはまだ到底及ばず、さらなる計算格子点の数の増加が望まれている。現在乱流 DNS で広く用いられている高精度計算手法のフーリエ・スペクトル法は、その計算時間の大部分が3次元離散フーリエ変換 (3D-FFT) で占められており、この部分を並列化することによって大幅に高速化をすることが可能となる。しかし、並列 3D-FFT はノード間の全体全通信を必要とする一方、近年の膨大な数のノードを搭載する大規模計算機システムでのネットワークポロジ (トラス型・ツリー型など) は全体全通信との相性が悪く、フーリエ・

スペクトル法を用いた乱流 DNS の実行性能は大きく低下することが分かっており、大規模なスーパーコンピュータの性能向上による性能向上は頭打ちとなりつつある [1]。

フーリエ・スペクトル法を用いた乱流 DNS の高速化方法として、

(1) 並列 3D-FFT の高効率化

(2) 乱流 DNS 内の並列 3D-FFT の適用回数の削減

の2通りが考えられる。(1)については青木らの研究報告 [3] において、データを複数次元について分割することで高い並列性を確保する試みがなされている。また(2)については、一部を除いてフーリエ・スペクトル法の代わりに差分法を用いることで、3D-FFT の適用回数を減らし、計算速度向上を図る試みもなされている [4], [5]。この論文では、乱流 DNS で良く用いられる時間積分スキームである4段4次ルンゲ・クッタ法 (RK4) の代わりに種々のスキームを用いることで、DNS の計算時間短縮をすることを目的とし、このスキームの変更による精度の変化が計算結果にどのような影響を与え、また、得られた乱流場が有用なデータとなりえるかについて、その妥当性を検討する。今回は従来のスキーム (RK4) と同型のルンゲ・クッタ型スキームである2次、3次ルンゲ・クッタ法 (RK2, RK3) を用いて、格子点数  $N^3 = 256^3$  の乱流 DNS を行い、それぞれ得られた乱流場のエネルギースペクトルなどの統計量を比較し、その計算精度について検討する。

フーリエ・スペクトル法を用いた乱流 DNS では、計算格

<sup>1</sup> 神戸大学大学院、システム情報学研究所  
Kobe University, Graduate School of System Informatics  
<sup>2</sup> 名古屋大学  
Nagoya University  
<sup>3</sup> 愛知工業大学  
Aichi Institute of Technology

子点数  $N^3$  に依存する打ち切り波数  $k_{max}$  までの有限波数のみを用いることで、乱流の無限自由度の縮約を行っており、この妥当性を測る指標として  $k_{max}\eta$  ( $\eta$ : kolmogorov 長) が用いられており、本研究では、エネルギー散逸をある程度正しく取り入れられる最低限度の  $k_{max}\eta \sim 1$  としてシミュレーションを行い、時間積分スキームの変更が低次の統計量に与える影響に注目する。なお、 $\eta$  はエネルギー散逸の大部分を担う小さい渦の特徴的スケールを表しており、エネルギーの大部分を担う大きいスケール  $L$  (積分長) との比が大きいく程、乱流の普遍性が期待されるスケール (慣性小領域) の範囲が広くなり (高レイノルズ数乱流)、乱流の理解のための有用なデータが得られると期待される。

以下、2章では本研究で用いた Box 乱流シミュレーションのための諸々の手法 (空間離散化手法、時間積分スキームなど) の説明、3章ではスキームの比較に用いた諸々の統計量の説明と実行結果を示し、4章では得られた結果の考察、5章では本論文のまとめ・今後の展望を示す。

## 2. シミュレーション手法

本研究の計算対象は、支配方程式が連続の式 (1)、非圧縮性流体の Navier-Stokes 方程式 (2) で表される非圧縮性流体である。

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\nabla p + \frac{1}{Re} \nabla^2 \mathbf{u} + \mathbf{f} \quad (2)$$

ただし、 $\mathbf{u} = (u, v, w)$  は速度ベクトル、 $p$  は圧力、 $Re$  はレイノルズ数、 $\mathbf{f}$  は単位質量当たりの外力である。また、(1) は非圧縮性条件である。計算領域  $\Omega$  は直交座標系で  $\Omega = [-\pi, \pi] \times [-\pi, \pi] \times [-\pi, \pi]$  と設定し、境界条件を周期境界条件とした。この乱流は DNS で用いられる乱流中でも最も単純な乱流の一つであるが、乱流のダイナミクスの本質的な性質を維持しており、乱流の本質的な性質を探ることを目的とする乱流 DNS に適した系である。以上の条件での乱流をここでは Box 乱流と呼ぶことにする [7]。

### 2.1 計算手法

本実験で用いる計算手法は、非圧縮性流体の DNS で広く用いられるフーリエ・スペクトル法である。この手法は、一般に差分法よりも計算量が多く複雑な形状に適用しにくいという性質があるが、高精度・高解像度であり、打ち切り波数までは空間微分演算を正確に計算できるという利点がある。フーリエ・スペクトル法を用いて Box 乱流の DNS を行う場合、偏微分方程式 (1), (2) の速度場ベクトル  $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ 、と圧力  $p(\mathbf{x}, t)$  について、有限の波数  $k_{max}$  までのフーリエ級数展開 (3), (4) によって空間離散化を行い、

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \sum_{\mathbf{k}} \hat{\mathbf{u}}_{\mathbf{k}}(t) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \quad (3)$$

$$p(\mathbf{x}, t) = \sum_{\mathbf{k}} \hat{p}_{\mathbf{k}}(t) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \quad (4)$$

式 (1), (2) はそれぞれ式 (5), (6) に展開される。

$$i\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{u}}_{\mathbf{k}} = 0 \quad (5)$$

$$\left( \frac{d}{dt} + \nu |\mathbf{k}|^2 \right) \hat{\mathbf{u}}_{\mathbf{k}} = -i\mathbf{k} \hat{p}_{\mathbf{k}} - \hat{h}_{\mathbf{k}} \quad (6)$$

ここで、 $h = \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}$  (本実験では、phase shift 法 (後述) を用いているため、この式の右辺を非圧縮性条件 (式 (1)) を用いて変形し、 $h = \nabla(\mathbf{u} \cdot \mathbf{u})$  としている)。この2式を常微分方程式 (7) に変形し、時間積分スキームによって時間発展していく。

$$\left( \frac{d}{dt} + \nu |\mathbf{k}|^2 \right) \hat{\mathbf{u}}_{\mathbf{k}} = -\hat{h}_{\mathbf{k}} + \mathbf{k} \frac{(\mathbf{k} \cdot \hat{h}_{\mathbf{k}})}{|\mathbf{k}|^2} \quad (7)$$

この手法を用いたとき、非線形項を評価するときに高波数成分 (エイリアジングエラー) が発生し、これが低波数成分に干渉することで正しい解が得られなくなってしまうため、この高波数成分を除去する必要がある。対処法としては、次数  $3N/2$  のフーリエ変換を用いてエイリアジングエラーを含まないフーリエ係数を得る方法 (3/2 則による方法) と、空間格子幅  $\Delta$  の半分だけシフトさせた点上での値のフーリエ級数展開を用いてエイリアジングエラーを除去する方法 (phase shift 法) がある [6], [7]。

本研究では (1, 1, 1) 方向への phase shift 法と、それ以外のエイリアジングエラーの影響を受ける波数領域  $k (> \sqrt{2}N/3)$  を切断することで、完全にエイリアジングエラーを除去している。このため DNS で取り扱える最大波数  $k_{max}$  は  $\sqrt{2}N/3$  となる。以下に phase shift 法の手順を示す。

- (1) 速度場ベクトルのフーリエ係数に対し、波数領域  $k (> \sqrt{2}N/3)$  でのフーリエ係数を 0 とした大きさ  $N$  のフーリエ係数  $\hat{u}_{\mathbf{k}}, \hat{v}_{\mathbf{k}}, \hat{w}_{\mathbf{k}}$  とそれらの半位相シフトさせた  $\hat{u}_{\mathbf{k}}^{(shift)}, \hat{v}_{\mathbf{k}}^{(shift)}, \hat{w}_{\mathbf{k}}^{(shift)}$  を用意する。
  - (2) これらのフーリエ係数について、大きさ  $N$  の 3 次元逆離散フーリエ変換を行い (計 6 回)、物理空間における値  $u, v, w, u^{(shift)}, v^{(shift)}, w^{(shift)}$  を得る。
  - (3) 物理空間における積  $uu, uv, uw, vv, vw, ww, u^{(shift)}u^{(shift)}, u^{(shift)}v^{(shift)}, u^{(shift)}w^{(shift)}, v^{(shift)}v^{(shift)}, v^{(shift)}w^{(shift)}, w^{(shift)}w^{(shift)}$  を計算する。
  - (4) これらの積に対して、次数  $N$  の 3 次元離散フーリエ変換を行い (計 12 回)、そこからエイリアジングエラーを含まない波数領域のフーリエ係数のみを取り出す。
- この手順中の 3 次元離散フーリエ変換の代わりに 3D-FFT を用いて計算量を大幅に削減できる。以上から、phase shift 法を用いたフーリエ・スペクトル法を用いた場合、非線形項の評価 1 回につき 18 回の 3D-FFT が必要となる。

## 2.2 外力の注入

一般に乱流中では、外力・境界条件に流体の巨視的なスケール ( $L$ ) に与えられた運動エネルギーが、渦同士の非線形相互作用によってより小さいスケールに伝搬されていき、最終的に粘性が支配するスケール ( $\eta$ ) で散逸し熱エネルギーに変換される [8]。この考えによると、十分に小さなスケールに現れる乱流のダイナミクスの統計的普遍性を見るためには、乱流場が停止しないように巨視的なスケール (低波数領域) に外力を注入し続けることで、小さなスケールでの統計的準定常状態を達成する必要がある。外力の注入方法については、低波数領域にのみ粘性係数を負とする方法などがあるが、本実験では非圧縮性ランダムフォーシングを用い、全エネルギーが時間変化するような乱流の DNS を行う [9]。

非圧縮性ランダムフォーシングでは、スペクトル空間での速度場  $\hat{\mathbf{u}}$  の低波数領域 ( $1.5 < k < 2.5$ ) に対してのみ、以下の式を満たすような乱数を用いて生成する外力  $\mathbf{f}$  を適用させる。

$$\langle \mathbf{f}(\mathbf{k}, t) \rangle = \mathbf{0} \quad (8)$$

$$\langle f_i(\mathbf{k}, t + \tau) f_j(-\mathbf{k}', t) \rangle = F^u P_{ij}(\mathbf{k}) \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} e^{-|\tau|/T_f} \quad (9)$$

ただし、 $\langle \cdot \rangle$  は空間平均を表し、 $F^u$  は任意の定数、 $\delta$  はディラックのデルタ関数、 $T_f$  は外力の correlation time であり、渦回転時間 (large-eddy turnover time) のオーダーである。また、 $P_{ij}(\mathbf{k}) := \delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{|\mathbf{k}|^2}$  である。

## 2.3 時間積分スキーム

4段4次ルンゲ・クッタ法を代表とする陽的ルンゲ・クッタ型スキームは、常微分方程式の初期値問題  $\frac{du}{dt} = f(u, t)$ ,  $u(t_0) = u_0$  の数値解法の1つである。このスキームは、単位時間ステップ毎に前ステップの結果  $u^n$  のみをもちいて時間発展させる1段スキームであり、単位時間ステップ当たりの式の評価回数で計算精度が変化するスキームである。4段4次ルンゲ・クッタ法では、単位時間ステップ当たりに式 (10) のように、4回の数値解の時間発展を行う。

$$\begin{aligned} u^* &= u^n + \frac{\Delta t}{2} f(u^n, n\Delta t) \\ u^{**} &= u^n + \frac{\Delta t}{2} f(u^*, (n+1/2)\Delta t) \\ u^{***} &= u^n + \Delta t f(u^{**}, (n+1/2)\Delta t) \\ u^{n+1} &= u^n + \frac{\Delta t}{6} (f(u^n, n\Delta t) + 2f(u^*, (n+1/2)\Delta t) \\ &\quad + 2f(u^{**}, (n+1/2)\Delta t) + f(u^{***}, (n+1)\Delta t)) \end{aligned} \quad (10)$$

4段4次ルンゲ・クッタ法は、単位時間ステップごとに4回の常微分方程式の右辺の評価を必要とするにも関わらず、その安定性により時間格子幅を大きくとることができ、精

表 1 計算機システム構成

CPU	Intel Xeon E7-8857 v2
コア数	12
動作周波数	3.0 GHz
ノード数	32
メモリ	16TiB
OS	Red Hat Enterprise Linux 6.6
コンパイラ	Intel Prallel Studio XE Cluster Edition

度もある程度得られるという利点から、現在でも常微分方程式の数値解法として広く用いられており、特に Box 乱流のシミュレーションでは、最もよく用いられている。

本研究で比較させる時間積分スキームは、従来の4段4次ルンゲ・クッタ法 (RK4) と2次、3次ルンゲ・クッタ法 (それぞれ、RK2, RK3) の3スキームであり、単位時間ステップ毎の右辺の評価回数はそれぞれ2, 3, 4回となる。本研究では、単位時間ステップ内の式の評価毎に、得られた最新の乱流場を用いた非線形項の評価し直しを行っている。phase shift 法を用いたフーリエ・スペクトル法の場合、この非線形項の評価一回につき3D-FFTが18回必要となるため、RK2, 3, 4は単位時間ステップあたりにそれぞれ36, 54, 72回の3D-FFTが必要となる。

## 3. 数値実験

### 3.1 計算機環境及び実行条件

本実験で使用したプログラムはFortran90で作成されたものであり、CPU内でのスレッド並列化にはOpenMPを、ノード間のプロセス並列化にはMPIを用いた。なお、MPIについてはMPI通信ライブラリのSGLMPTを使用した。プログラム作成の際は、大規模なDNSを可能とするために、使用メモリ容量の節約を行うことを方針とした。また、表 (1) に示されるような計算機システムを用いて、シミュレーションを行った。

単位時間ステップ当たりの非線形項の評価を除く計算量 (浮動小数点演算回数) は、RK2, RK3, RK4のそれぞれで、 $39N^3$ ,  $63N^3$ ,  $99N^3$  と見積もられる。また、非線形項の計算量はほとんどが3D-FFTであり、1回の3D-FFTの計算量は  $O(N^3 \log N)$  であるので、単位時間ステップ当たりのほとんどの計算時間は3D-FFTが占める。なお、どの時間積分スキームについても、時間発展に必要なメモリ容量はおよそ  $(54N^3 \times 8)$ Byte 程度である。

計算パラメータは、RK2, RK3, RK4のどの実行に関しても、計算格子点数  $N^3 = 256^3$ 、時間格子間隔  $\Delta t = 0.001$ 、動粘性係数  $\nu = 0.0007$  とした。初期場は、レイノルズ数  $Re = 936$ 、マイクロスケールレイノルズ数  $R_\lambda = 167$  の発達した乱流場を用いた [2]。

### 3.2 手法間の全エネルギーの時間変化

異なる時間積分スキームを用いた比較を行うにあたっ

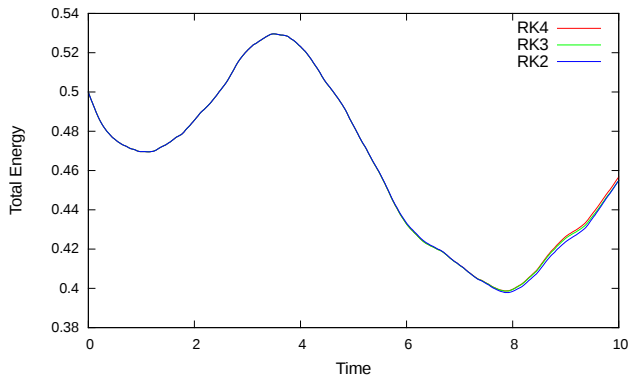


図 1 RK2, RK3, RK4 についての全エネルギーの時間変化

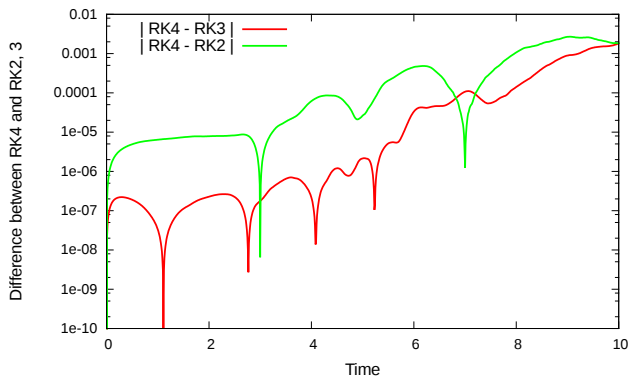


図 2 RK4 と RK2, 3 の全エネルギーの差の絶対値の時間変化

て、スキーム間の統計量の違いを厳密に見るために、可能な限り同じ条件(外力・境界条件など)下でのシミュレーションが必須となる。そのような条件を満たすために、外力(非圧縮性ランダムフォーシング)の生成に用いる乱数については、あらかじめ1つの乱数列を生成しておき、これをどのスキームに対しても使用するようにした。しかし、本実験で用いたスキーム RK2, RK3, RK4 を用いて、時間  $t = 0.0, \dots, 10.0$  での全エネルギーの時間変化を見てみると(図 1)、同様の外力を挿入したにも関わらず、時間経過でそれぞれの値の差が成長していることが確認できる。また、図 2 は、RK4 での全エネルギーと RK2, 3 それぞれでの全エネルギーの差の絶対値の時間変化を示しており、どちらの値についても、 $t = 5.0$  を越えたあたりからその値がおおきく成長していることが確認できる。この原因として、時間積分スキームの精度の違いによって生成される、小さいスケールでのわずかな全エネルギーの誤差が、時間経過で大きいスケールに伝搬され、ある程度の時間で全エネルギーの誤差が顕著になることが考えられる。このことから、次節から示す諸々の統計量については、時間  $t = 5.0$  を超えてからのスキーム間の誤差が増幅する傾向があると予想できるが、 $t = 10.0$  での相対誤差が 0.2% 程度であることから、全エネルギーを求める場合にはいずれのスキームも適用可能と考えられる。

表 2 各スキームによる実行時間比較

スキーム	3D-FFT count/1 step	計算時間 $T$ (sec)	$T$ の比
RK2	36	8300	2.04
RK3	54	12305	3.02
RK4	72	16312	4.00

### 3.3 比較する統計量

本実験で比較させた統計量は、エネルギースペクトルと差スペクトルである。それぞれの統計量についての定義は以下の通りである。

エネルギースペクトル  $E(k, t)$  は以下の式 (11) で定義される。

$$E(k, t) = \frac{1}{2} \sum'_{q \sim k} |\hat{\mathbf{u}}(\mathbf{q}, t)|^2 \quad (11)$$

ただし、 $\sum'_{q \sim k}$  は、 $k - 1/2 < |\mathbf{q}| < k + 1/2$  を満たす波数ベクトル  $\mathbf{q}$  に関する和を表す。

差スペクトル  $\Delta(k, t)$  は以下の式 (12) で定義される [10]。

$$\Delta(k, t) = \frac{1}{2} \sum'_{q \sim k} |\delta \hat{\mathbf{u}}(\mathbf{q}, t)|^2 \quad (12)$$

ただし、 $\delta \hat{\mathbf{u}}(\mathbf{q}, t) = \hat{\mathbf{u}}^{(\alpha)}(\mathbf{q}, t) - \hat{\mathbf{u}}^{(\beta)}(\mathbf{q}, t)$ ,  $\alpha = RK2, RK3$ ,  $\beta = RK4$ , また、 $\hat{\mathbf{u}}^{(m)}$  は時間積分スキーム  $m$  で得られる乱流場を表す。

### 3.4 実行結果

まず、3.1 節で述べた実行条件・環境を用いて行った RK2, RK3, RK4 の計算時間についてを表 (2) にまとめた。最右列に示された各実行の計算時間の比を見てみると、2 列目に示された単位時間ステップあたりの 3D-FFT 回数の比と一致しており、上述した通り、3D-FFT がこのシミュレーションの計算時間の大部分を占めていることがわかることが確認でき、計算時間短縮のために 3D-FFT を削減することは大いに意味があることがわかる。

以下に、それぞれのスキームで得られた統計量についての比較結果を示していく。

#### 3.4.1 エネルギースペクトル

時間  $t = 2.0, 5.0, 10.0$  のそれぞれについて、RK4 と RK2, 3 のそれぞれとのエネルギースペクトルの差の絶対値を縦軸、波数  $k$  を横軸としたグラフを、図 3, 4, 5 に示す。

#### 3.4.2 差スペクトル

時間  $t = 2.0, 5.0, 10.0$  のそれぞれについて、RK2, 3 のそれぞれの差スペクトルを縦軸、波数  $k$  を横軸としたグラフを、図 6, 7, 8 に示す。なお、差スペクトルの値のスケールを示すために、RK4 のエネルギースペクトルも図示した。

## 4. 考察

3.2 節の予測通り、エネルギースペクトル、および差ス

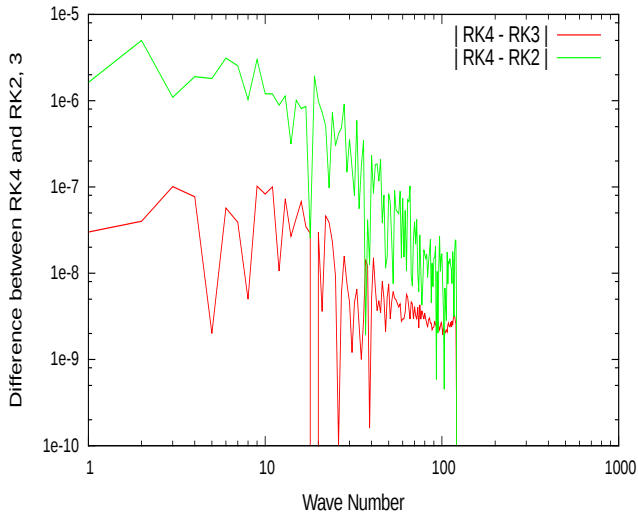


図 3  $t = 2.0$  の RK4 と RK2, 3 のエネルギースペクトルの差の絶対値

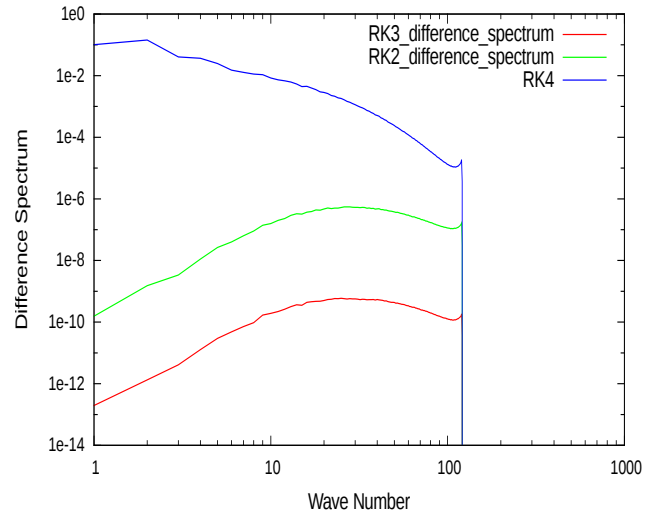


図 6  $t = 2.0$  の RK2, 3 の差スペクトル

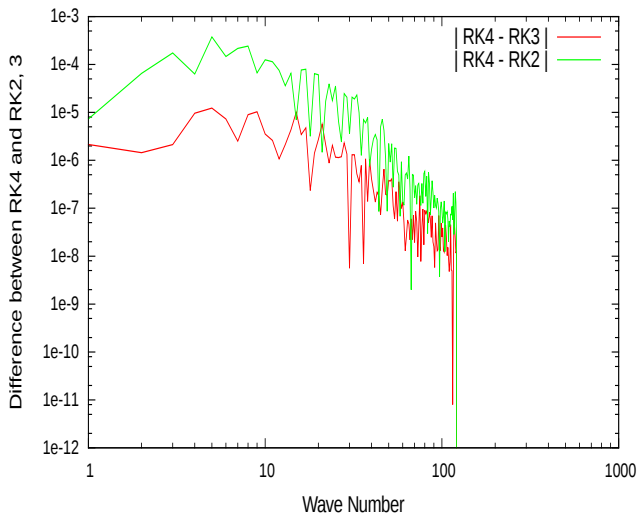


図 4  $t = 5.0$  の RK4 と RK2, 3 のエネルギースペクトルの差の絶対値

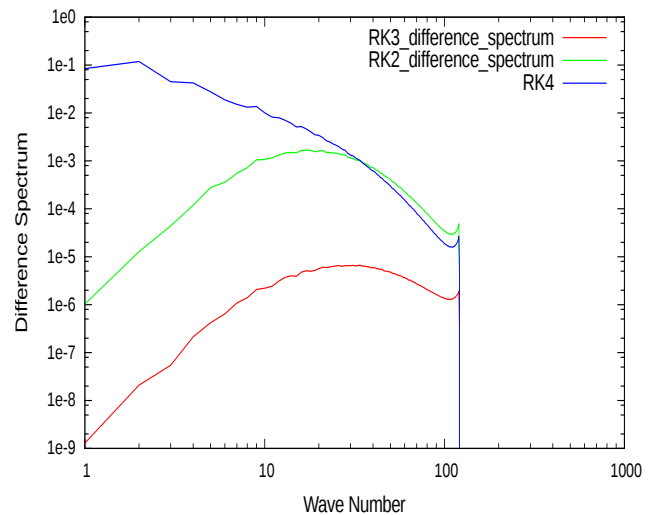


図 7  $t = 5.0$  の RK2, 3 の差スペクトル

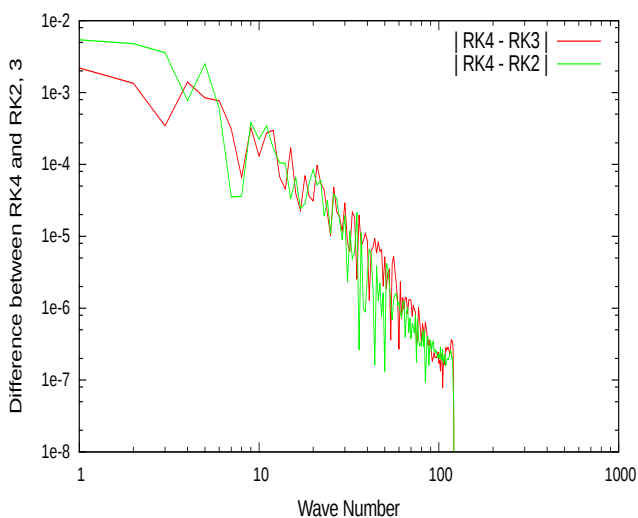


図 5  $t = 10.0$  の RK4 と RK2, 3 のエネルギースペクトルの差の絶対値

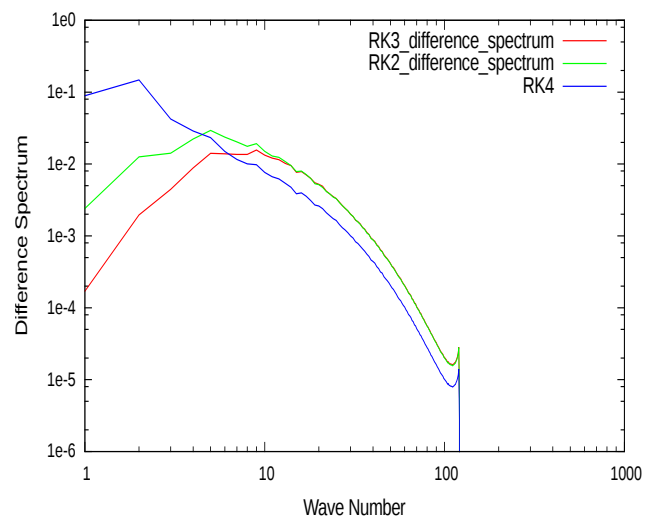


図 8  $t = 10.0$  の RK2, 3 の差スペクトル

ベクトルとも、 $t = 5.0$  あたりで結果が変わってくる事が確認できた。

まずエネルギースペクトルのスキーム間の差については、 $t = 2.0$  では RK3 の方が RK2 よりも差が  $O(10^2)$  程小さく、精度の差が顕著に出ていることが分かるが、 $t = 5.0$  を超えた場合 ( $t = 5.0, 10.0$ )、どちらのスキームについても差が大きく増加しており、その誤差が支配的になっているため、スキーム間の精度の差が見えなくなっていることが分かる。また、差スペクトルについても同様に、時間経過でスキーム間の差が小さくなっていることが分かる。

2つのスペクトルを見てみると、時間経過で低波数領域(エネルギーの大部分を担うスケール)での値が徐々に増幅され、最終的には高波数領域(粘性が支配的なスケール)よりも大きくなっていることが確認できる。これは3.2節でも触れたように、同様の外力・境界条件上での実行であったとしても、それらは低波数領域のスペクトルの差を小さくするだけであり、精度の違いが顕著に現れる高波数領域でのスペクトルの小さな差が、時間経過でより大きなスケールへと伝搬するからであり、本実験の場合、その誤差が低波数領域に大きく現れ始める時間が  $t = 5.0$  あたりであると考えられる。そのため、低精度の時間積分スキームをそのまま用いる場合、長時間のシミュレーションでは結果の精度も大きく下がってしまうことが考えられる。本実験では、時間積分スキームを RK2, RK3 に変更したのみで、その他の高精度のための処理を行っていないため、乱流の誤差に対する敏感さを原因とする、上記の乱流特有の誤差伝搬が強く現れてしまっていることが分かる。このため、RK2, RK3 を用いて乱流 DNS を行う場合、その他の高精度化処理を併用する必要があると考えられる。これを改善するために、高精度化処理として考えられる方法の最も単純なものは、時間格子間隔  $\Delta t$  を小さくすることであるが、前章で示したように、3D-FFT 回数を削減することが計算時間短縮に直結しているため、間隔を過剰に小さくすることで RK4 よりも 3D-FFT 回数が上回らないように注意する必要がある。例として、RK4 を用いて  $\Delta t = 0.001$  とした実行の代わりに RK2 を用いる場合、高精度化のために  $\Delta t = 0.001$  を  $\Delta t = 0.0005$  としてしまうと、3D-FFT 回数は全体で RK4 と等しくなってしまう、時間積分スキーム変更の長所が損なわれてしまう。また、時間積分スキームとして、アダムス・バッシュフォース法を代表とする多段法を用いることも考えられる。多段法は、過去の時間ステップでの数値解を複数個用いて時間発展させるスキームであり、単位時間ステップで必要な非線形項の評価は1回で済むため、3D-FFT 回数は18回で済む。ただし、ルンゲ・クッタ法ほどの安定性は望まず、時間格子間隔をある程度小さくしておく必要があるため、全体での3D-FFT 回数が RK4 を上回らないように設定する必要がある。また、過去の時間ステップのデータを保存しておく必要があ

るため、大規模なシミュレーションを行う場合は、必要メモリ容量についても検討をする必要があり、さらに、このスキームは高精度化のためには、段数を増やし、変数の数を増やす必要があり、それらを考慮した準備をする必要がある。

## 5. まとめ

フーリエ・スペクトル法を用いた一様等方性乱流の直接数値シミュレーションの更なる大規模化のために、現在広く用いられる大規模計算機システムのネットワークポロジを原因とする3D-FFTによる大幅な遅延を解消するために、乱流シミュレーションで広く用いられている時間積分スキームの4段4次ルンゲ・クッタ法の代わりに、その他の時間積分スキームを用いてシミュレーションを行うことで、3D-FFT適用回数を削減し、全体の計算時間向上を図った。結果として、3D-FFTに支配される全体の計算時間は大幅に抑えられたものの、得られた統計量は従来のスキームを用いた場合よりも精度が非常に低いものとなっている。

今後は、時間格子間隔の調整やその他のスキーム(多段法)を用いた場合の統計量を調査し、また、高波数領域でのスペクトルが正確に計算されているかを確認するために、計算格子点数を増やした時の結果との比較をする。将来的には  $k_{max}\eta$  を大きくしたシミュレーションも実行し、高次の統計量での比較も行い、大規模な乱流シミュレーションに適用させることを目指す。

## 参考文献

- [1] T. Ishihara, K. Morishita, M. Yokokawa, A. Uno, and Y. Kaneda: *Energy spectrum in high-resolution direct numerical simulations of turbulence*, Phys. Rev. Fluids, 1 (8), 082403 (2016).
- [2] T. Ishihara, Y. Kaneda, M. Yokokawa, K. Itakura, and A. Uno: *Small-scale statistics in high-resolution direct numerical simulation of turbulence: Reynolds number dependence of one-point velocity gradient statistics*, J. Fluid Mech. vol 592, pp335-366 (2007).
- [3] 青木聖陽, 今村俊幸, 横川三津夫, 廣田悠輔: メニーコアプロセッサにおける多軸分割を用いた3次元FFTの性能評価, Vol.2018-HPC-163, No.29, pp.1-7 (2018)
- [4] Sanjiva L. Lele: *Compact finite difference schemes with spectral-like resolution*, Journal of Computational Physics, vol 103, issue 1, pp16-42 (1992).
- [5] S. Laizet, E. Lamballais: *High-order compact schemes for incompressible flows: A simple and efficient method with quasi-spectral accuracy*, Journal of Computational Physics, vol 228, issue 16, pp5989-6015 (2009)
- [6] C. Canuto, M. Y. Hussaini, A. Quarteroni, and T. A. Zang: *Spectral Methods in Fluid Dynamics*, Springer-Verlag (1988)
- [7] 金田行雄, 笹井理生: 乱流の計算科学: 乱流解明のツールとしての大規模数値シミュレーション, 共立出版 (2012).
- [8] L. F. Richardson: *Weather Prediction by Numerical Process*, Cambridge Univ. Press (1922).

- [9] K. Yoshida, T. Arimitsu: *Inertial-subrange structures of isotropic incompressible magnetohydrodynamic turbulence in the Lagrangian renormalized approximation*, physics of fluids 19, 045106 (2007).
- [10] 芳松克則, 石原卓, 金田行雄, 中井聡, 西田秀利, 里深信行: 3次元一様等方性乱流の直接数値シミュレーションにおけるスペクトル法と高次精度差分法との比較, 日本機械学会論文集 (B 編) 69 巻 679 号 (2003).