

大規模シミュレーションによる 平行平板間乱流の DNS データベースの構築

○阿部浩幸 (宇宙航空研究開発機構), 河村洋 (東京理科大学)

Establishment of DNS database in a turbulent channel flow by large-scale simulations

by

Hiroyuki Abe (Japan Aerospace Exploration Agency) and Hiroshi Kawamura (Tokyo University of Science)

ABSTRACT

In the present study, we establish statistical DNS database in a turbulent channel flow with passive scalar transport at high Reynolds numbers and make the data available at our web site (<http://murasun.me.noda.tus.ac.jp/turbulence/>). The established database is reported together with the implementation of large-scale simulations, representative DNS results and results on turbulence model testing using the DNS data.

1. 緒言

近年, 計算機性能の向上とともに大型計算機環境の整備が進み, 最大で数テラバイト程度の記憶容量を要する大規模数値シミュレーションが実行されるようになった. このうち, 乱流の分野では, 直接数値シミュレーション(DNS)のアプリケーションにおいて大規模計算が幾つか行われ始めている(例えば, 文献1)).

本研究の対象となる平行平板間乱流のDNSは, 形状が非常に単純で航空機の翼のような壁面に接する乱流(壁乱流)の基礎的性質を有することから, 1987年のKimら²⁾の低レイノルズ数(壁面摩擦速度 u_τ , チャネル半幅 δ に基づくレイノルズ数で $Re_\tau = u_\tau \delta / \nu = 180$)のDNS以降, 数多くの計算が行われている. 大規模計算という点では, 主として, 高レイノルズ数の計算が該当し, 我々のグループでも, 1997年から宇宙航空研究開発機構(旧航空宇宙技術研究所)の数値シミュレータを駆使してより高いレイノルズ数を目指したDNSを行ってきた. 1999年には, ベクトル型計算機であった数値シミュレータII(NWT)を使用し, 当時世界最高のレイノルズ数 $Re_\tau = 640$ の計算を約3300万点の格子点数を用いて達成した³⁾. 2003年には, スカラー型計算機である数値シミュレータIIIを使用し, この形態で初めて Re_τ で 10^3 のオーダーのレイノルズ数となる $Re_\tau = 1020$ の平行平板間乱流の大規模DNSを約14億点の格子点数を用いて達成した⁴⁾. 図1は, この系における大規模DNSのレイノルズ数の変遷を纏めたものである. 現在までに計算機のハード性能はムーアの法則を超える勢いで向上しているものの⁵⁾, DNSにおけるレイノルズ数の上昇は約10倍程度にとどまっている. これは, 乱れの最大・最小スケール比が, 壁乱流ではレイノルズ数にほぼ比例するため, 3次元計算では格子数がレイノルズ数の約3乗に比例することに起因している. 実際, 図1における直線は3乗に比例する直線であり, これまでの大規模DNSの変遷も概ねこのラインに沿って進んでいる. なお, 現在, この系における世界最大のDNSはHoyas & Jiménez⁶⁾の総格子点数(総フォーリエモ

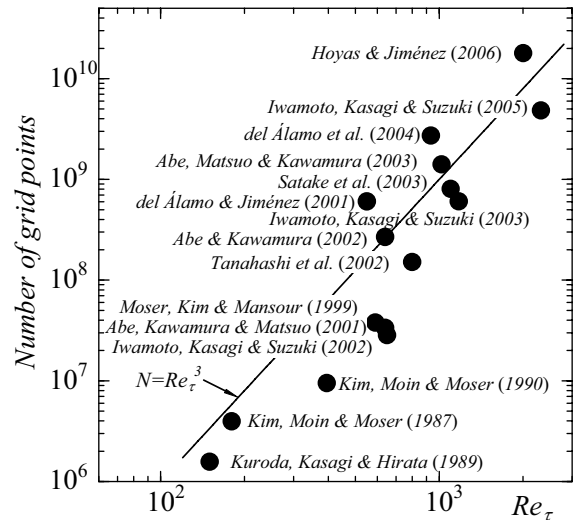


Fig. 1 Development of DNS in a turbulent channel flow.

ード数)として約179億点の計算となっている.

他方, Kimら²⁾のDNSから現在までに約20年間という年月が経過し, 当初は乱流現象の解析が主であったDNSの役割は, 1) 乱流モデルの開発^{7), 8)}, 2) 乱流制御技術の開発⁹⁾, 3) 乱流計測技術のキャリブレーション^{10), 11)}, などと多岐にわたるようになった. 同時に, 近年のIT化の流れを受けて乱流統計諸量のDNSデータが, 各大学の研究室または研究機関のWEBサイト上で公開され始めている. これにより, 世界中の研究者が最新の研究情報を共有することが可能な状態となっている. 特に, 平行平板間乱流のDNSデータベースは, 表1に見るように, 近年, 世界各国から発信されるようになり, 低レイノルズ数から高レイノルズ数まで幅広いレイノルズ数の範囲の情報が利用可能な状況になった. しかし, 熱輸送まで含めた高レイノルズ数のDNS

Table 1 Websites of the DNS database in a turbulent channel flow.

Name of websites	URL
DNS database website at the University of Tokyo	http://www.thtlab.t.u-tokyo.ac.jp/
DNS database website at Tokyo University of Science	http://murasun.me.noda.tus.ac.jp/
DNS database website at University of Illinois	http://www.tam.uiuc.edu/Faculty/Moser/channel
DNS database website at Universidad Politécnica de Madrid	http://torroja.dmt.upm.es/ftp/channels
DNS database website at ERCOFTAC	http://ercoftac.mech.surrey.ac.uk/
DNS database website at University of Southampton	http://www.dnsdata.afm.ses.soton.ac.uk/

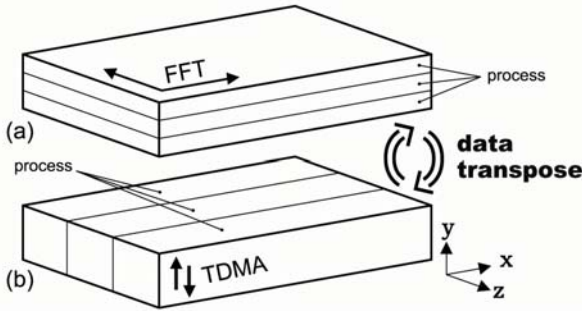


Fig.2 Schematics of domain decomposition for process parallelization: (a) FFT; (b) TDMA.

データベースは未だ公開されていない。この高レイノルズ数の DNS データは、航空宇宙分野の乱流モデルの開発に必要不可欠なものであり、これらのデータベースの構築と公開を行うことにより、航空宇宙分野の CFD 計算の信頼性の向上が期待される。そこで、本研究では、我々のグループで実行してきた Abe ら⁴⁾の $Re_\tau=180, 395, 640, 1020$ の平行平板間乱流熱伝達の DNS に対して、基本的な統計量の DNS データベースを構築し、WEB 上において公開を行った。本報では、この DNS データベースの概要を、大規模 DNS の実行方法、代表的な DNS の結果、DNS データを用いた乱流モデル開発の結果とともに報告する。

2. 大規模 DNS の実行

流れ場には十分発達した無限に長い平行平板間乱流を想定し、流れは平均圧力勾配により駆動されるものとした。支配方程式には、流れ場には、連続の式、Navier-Stokes 方程式、温度場には、Energy 方程式を用いた。空間的離散化には有限差分法を用いた。計算手法の詳細は、Abe ら^{3),4)}に記した。

本研究の計算プログラムは、使用言語に Fortran 77, 並列化言語には XPFortran¹²⁾を用いた約 20,000 行のプログラムで構成されている。ここで、XPFortran とは並列化言語 VPP Fortran の仕様を包含する並列化言語であり、ディレクティブ挿入型の並列言語である。主として、3次元 Navier-Stokes 方程式を離散化した 3重 DO ループの計算から構成

Table 2 Computational performance for the DNS at $Re_\tau=1020$.

Re_τ	1020
Number of grid points ($N_x \times N_y \times N_z$)	1,409,286,144 (2048 × 448 × 1536)
Number of CPUs	448
Number of processes	56
Number of threads	8
Used memory	819GB
I/O data size	138.2GB
Performance for one process	FFT: 300~400MFLOPS
	TDMA : 90~120MFLOPS
	Others : 800~1000MFLOPS

されている。本計算にて特記する解法は、陰的に扱う必要がある部分に対しては 3重対角行列の直接解法(Tri-Diagonal Matrix Algorithm; TDMA)を用い、ポアソン方程式の解法には、計算アルゴリズム上計算量を低減して高速化を図るために、高速フーリエ変換(Fast Fourier Transformation; FFT)を用いている。

並列化手法には、プロセス並列に XPFortran, スレッド並列に自動並列、一部に OpenMP¹³⁾のハイブリッド型の手法を用いた。プロセス並列の分割の概略図を図 2 に示す。FFT の計算を含めた通常の並列計算は、壁面に並行な面(y軸に垂直な方向)で分割し(図 2(a)), 一方、3重対角行列(TDMA)の並列計算は、スパン方向(z軸に垂直な面)に対して分割を行った(図 2(b))。なお、分割軸の変更には、3次元データを一括で転置転送させて行った。一方、プロセス並列のオペレーションを施していないループに対しては、自動並列化を施した。さらに、コンパイラで自動並列化されない部分、最内側ループが並列化されて効率が悪い部分等については OpenMP を用いた。

表 2 に Abe ら⁴⁾の DNS において最も規模の大きな DNS の実行形態と各ルーチンの実行性能(FLOPS 値)を示す。 $Re_\tau=1020$ の DNS は、全格子点数は約 14 億点、使用メモリは 819GB であり、現在の他の CFD 計算の規模と比較してみても大規模計算に属している。性能に関しては、各ルーチンのプロセス単位の性能が TDMA 以外の各ルーチンで 400MFLOPS を超えており、他の CFD のプログラムと比較しても遜色のない性能を示している¹⁴⁾。一方、TDMA のル

Table 3 Cases of our DNS database established in the present study.

Velocity field	Thermal field	
1) $Re_\tau=180$	1) $Re_\tau=180, Pr=0.71$	1) $Re_\tau=180, Pr=0.025$
2) $Re_\tau=395$	2) $Re_\tau=395, Pr=0.71$	2) $Re_\tau=395, Pr=0.025$
3) $Re_\tau=640$	3) $Re_\tau=640, Pr=0.71$	3) $Re_\tau=640, Pr=0.025$
4) $Re_\tau=1020$	4) $Re_\tau=1020, Pr=0.71$	4) $Re_\tau=1020, Pr=0.025$

Table 4 Contents of our DNS database.

Velocity field	Thermal field
1) Mean velocity	1) Nusselt number
2) RMS of velocity fluctuations	2) Mean temperature
3) RMS of pressure fluctuations	3) RMS of temperature fluctuations
4) RMS of vorticity fluctuations	4) Turbulent heat-fluxes
5) Reynolds shear stress	5) Turbulent Prandtl number
6) Budgets of Reynolds normal and shear stresses	6) Time-scale ratio
7) Budgets of turbulent kinetic energy	7) Budgets of temperature variance
8) Two-point correlations of velocity fluctuations	8) Budgets of Turbulent heat-fluxes
9) Energy spectra of velocity fluctuations	9) Two-point correlations of temperature fluctuations
	10) Energy spectra of temperature fluctuations

```

4. Conditions↓
4.1. Specified conditions↓
    Re_tau = 1020↓
4.2. Obtained mean quantities↓
    Re_bulk = 41441↓
5. Turbulence statistics↓
j      y+      u_mean      uu+      ww+↓
1      0.153945e+00  0.153892e+00  0.410213e-02  0.172765e-02↓
2      0.465827e+00  0.465562e+00  0.372747e-01  0.143198e-01↓
3      0.786334e+00  0.785677e+00  0.105683e+00  0.376867e-01↓
4      0.111676e+01  0.111537e+01  0.212148e+00  0.703570e-01↓
5      0.145842e+01  0.145568e+01  0.359849e+00  0.111056e+00↓
6      0.181264e+01  0.180749e+01  0.552004e+00  0.158653e+00↓
7      0.218076e+01  0.217151e+01  0.791484e+00  0.212121e+00↓
8      0.256414e+01  0.254822e+01  0.108035e+01  0.270525e+00↓
9      0.296413e+01  0.293780e+01  0.141935e+01  0.333007e+00↓
10     0.338212e+01  0.334013e+01  0.180750e+01  0.398786e+00↓
    
```

Fig.3 Schematic of the DNS database at $Re_\tau=1020$.

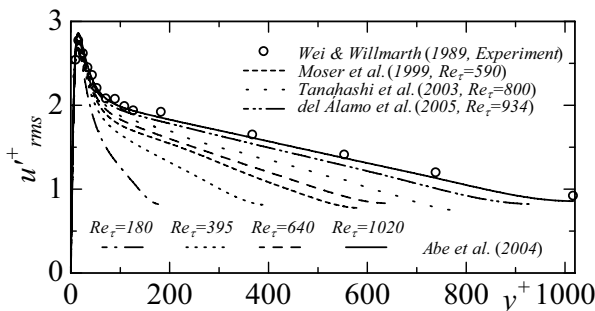


Fig.4 Root-mean square values of the streamwise velocity fluctuations.

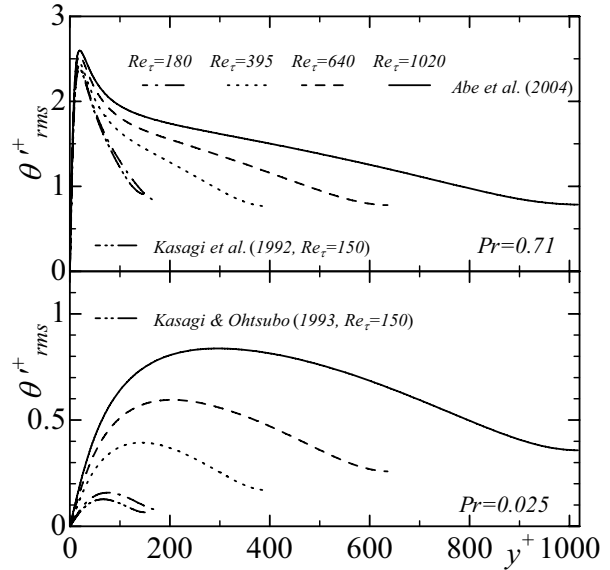


Fig.5 Root-mean square values of the temperature fluctuations.

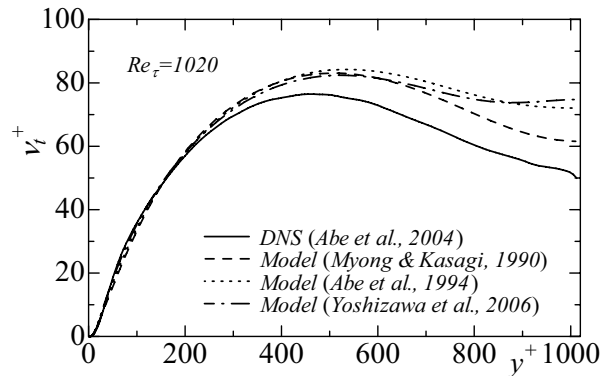


Fig.6 Turbulence modeling testing for turbulent eddy viscosity at $Re_\tau=1020$.

チェーンでは、90~120MFLOPS まで極端に計算性能が低下している。これは、TDMA の計算時に同時に行ったデータの転送のコストが TDMA の計算コストを上回ったためと考えられる。

3. DNS データベースの構築

本研究においては、表 3 に示すように、Abe ら⁴⁾の $Re_\tau=180\sim 1020$ の平行平板間乱流熱伝達の DNS の基本的な統計量に対し、12 ケース (速度場 4 ケース、温度場 8 ケース) データベース化を行った。データは、ケース毎に 1 つのファイルに纏めた。ファイルの内容は、表 4 に示すように、平均量からレイノルズ応力や乱流熱流束の収支まで、特に乱流モデルの開発に有効なデータという点で構成した。

図 3 は、データファイルに収容されているデータの一部を示したものである。データはテキスト形式で記述し、形式には実数型を用いた。なお、1 データファイルあたりのファイルサイズは数百キロバイト程度であり、インターネットを介して十分データを発信できる範囲である。

データは、公開可能となり、編集が終了した統計量から順次公開を行っている。本研究は、宇宙航空研究開発機構と東京理科大学ホリスティック計算科学研究センターとの共同研究により行われており、次の URL に行った。

URL: <http://murasun.me.noda.tus.ac.jp/>

これらのデータの大部分は、昨年から公開を開始しているが、2006 年度のデータベースへのアクセス数は国内外から約 2500 件に達している。

図 4, 5 に、データベースの代表データとして、流れ方向の速度変動の RMS 値と温度変動の RMS 値の DNS データを、他の DNS データ¹⁵⁾⁻¹⁹⁾、実験値²⁰⁾と比較して示す。本

研究で構築したデータベースのレイノルズ数は、比較的広範囲であると同時に、 $Re_\tau=1020$ のデータは、既存の実験データと比較できるほど高いレイノルズ数まで達していることが分かる。また、速度場においては、高レイノルズ数の DNS データが幾つか報告されているものの、温度場においては、本研究のデータが高レイノルズ数において唯一の DNS データとなっていることが見てとれる。

図 6 は、 $Re_\tau=1020$ の DNS データベースより求めた渦粘性係数を、既存乱流モデル²¹⁾⁻²³⁾の計算結果と比較した結果である。乱流モデルには、2 方程式 $k-\epsilon$ モデルを用いた。既存乱流モデルの計算結果は、外層の挙動に DNS との差異が見受けられるものの、内層においてはよく一致しており、高レイノルズ数壁乱流の現象に対する現行のモデル計算の予測精度が比較的高いことが分かる。

乱流モデルの開発については、実験データは微分量に対する精度が制限されるため、現在では、上述のような DNS データを用いた開発が主流となっている。特に、乱流モデルのモデル係数やモデル関数は、図 6 のように DNS データと系統的に比較・検討することにより、高精度化が期待される。一方、さらに高いレイノルズ数の乱流現象を高精度に予測する乱流モデルを構築するためには、より高いレイノルズ数の DNS データが必要である。即ち、大規模計算が必要不可欠である。

4. 結論

本研究では、Abeら⁴⁾の $Re_c=180\sim 1020$ の平行平板間乱流熱伝達の DNS⁴⁾の基本的な統計量のデータベース化を行うと同時に、WEB上に公開した。本報では、このDNSデータベースの概要を示し、特に、乱流モデルの開発という点でその有効性を示した。同時に、今回データベース化の対象とした高レイノルズ数のDNSのような大規模計算の必要性を示した。

謝辞

本研究の一部は、平成19年度科学研究費補助金 若手研究(B) (課題番号18760135)、私学・学術フロンティア推進事業「ホリスティックアプローチによる計算科学の新展開」による補助を受けている。計算は、航空宇宙研究開発機構の数値シミュレータIIIを用いて行った。データベースのWEBの運営については、関洋治氏(元東理大博士課程院生、現原子力研究開発機構)の寄与が大きい。記して謝意を表す。

参考文献

- 1) Yokokawa, M., Itakura, K., Uno, A., Ishihara, T., & Kaneda, Y., <http://www.sc-2002.org/paperpdfs/pap.pap273.pdf> (2002).
- 2) Kim, J., Moin, P. & Moser, R., *J. Fluid Mech.* Vol. 177, (1987), pp. 133-166.
- 3) Abe, H., Kawamura, H. & Matsuo, Y., *Trans. ASME J. Fluids Eng.*, Vol. 123, (2001), pp. 382-393.
- 4) Abe, H., Kawamura, H. & Matsuo, Y., *Int. J. Heat and Fluid Flow*, Vol. 25, (2004), pp. 404-419.
- 5) Top 500 supercomputer website, <http://www.top500.org/>.
- 6) Hoyas, S. & Jiménez, J., *Phys. Fluids*, Vol. 18, (2006), 011702.
- 7) Rodi, W. & Mansour, N. N., *J. Fluid Mech.*, Vol. 250, (1993), pp. 509-529.
- 8) Nagano, Y. & Shimada, M., *Phys. Fluids*, Vol. 8, (1996), pp. 3379-3402.
- 9) Choi, H., Moin, P. & Kim, J., *J. Fluid Mech.*, Vol. 262, (1994), pp. 75-110.
- 10) Nishino, K. & Kasagi, N., *Proc. of the 7th Turbulent Shear Flows*, Vol. 2, (1989), pp. 22.1.1-22.1.6.
- 11) Antonia, R.A., Zhu, Y. & Kim, J., *Exp. Fluids*, Vol. 15, (1993), pp. 65-69.
- 12) 富士通 PRIMEPOWER ソフトウェア製品紹介 (XPFortran): http://primeserver.fujitsu.com/primepower/products/soft/opt/xpf_2x/.
- 13) OpenMP: <http://www.openmp.org/>.
- 14) Matsuo, Y.: *Proc. ISHPC 2003, LNCS 2858*, Springer-Verlag, (2003), pp.39-53.
- 15) Moser, R. D., Kim, J. & Mansour, N. N., *Phys. Fluids*, Vol. 11, (1999), pp. 943-945.
- 16) Tanahashi, M., Kang, S.-J., Miyamoto, S., Shiokawa, S. & Miyauchi, T., *Int. J. Heat and Fluid Flow*, Vol. 25, (2004), pp. 331-340.
- 17) del Álamo, J. C., Jiménez, J., Zandonade, P. and Moser, R.D., *J. Fluid Mech.*, Vol. 500, (2004), pp. 135-144.
- 18) Kasagi, N., Tomita, Y. & Kuroda, A.: *Trans. ASME J. Heat Transfer*, Vol. 144, (1992), pp. 598-606.
- 19) Kasagi, N. & Ohtsubo, Y., *Turbulent Shear Flows 8* (Durst et al., eds.), Springer-Verlag, (1993), pp.97-119.
- 20) Wei, T. & Willmarth, W. W., *J. Fluid Mech.*, Vol. 204, (1989), pp. 57-95.
- 21) Myong, H. K., & Kasagi, N., *JSME International Journal*, Ser. II, Vol. 33, (1990), pp. 63-72.
- 22) Abe, K., Kondoh, T. & Nagano, Y., *Int. J. Heat and Mass Transfer*, Vol. 37, (1994), pp. 139-151.

23) Yoshizawa, A., Nisizima, S., Shimomura, Y., Kobayashi, H., Matsuo, Y., Abe, H. & Fujiwara, H, *Phys. Fluids*, Vol. 18, (2006), 035109.