ベクトル計算機による乱流の数値シミュレーション

大阪大学工学部　梶島　岳夫・三宅　裕

1. 口　　上

ＧＦＬＯＰＳ級の演算性能が、あたかもそれがパソコンの背後にあるかのように、手軽に引き出せるようなご時世になった。たしかに、非常に注意深い実験によってのみ得られるのと同じ程度の結果が、はるかに短時間にしかも格安で計算された例はいくらでも見ることができる。これをシステマティックに構築すれば、実験の方針を決定したり、理論の有効性を検証するのにも威力を発揮するにちがいない。このあたりの技術をもっともらしくブレンドしてインテリジェント某なる名を冠すれば、ちょっとした商売にもなることだろう。しかし、このテーマの関心は計算機援用技術ではなく、計算機力学そのものにある。

つまり、理論や実験の限界を克服し、新しい知識を得たい。計算結果を実験と比較し、その精度や信頼性を明らかにすることは当然の責務である。それだけでは、新しい計算法の有用性を示す場合などを除けば、例題演習でしかない。現象は知られていても実験が困難であった問題のメカニズムの解明、さらに全く新しい事実の発見！　そうした観点から興味ある対象としては、まず宇宙の彼方の話や逆に分子以下の世界のように、我々の実感できる時空間のスケールからはひどくかけ離れた問題がある。一方では、卑近で古風な問題ながら、従前の方法では手にあまるがゆえに敬遠されてきたような、たとえば非線形現象。という訳で、乱流の数値シミュレーションを行なう意義をデッチ上げ、いや明らかにした次第である。

2. 三次元非圧縮性粘性流体の非定常流れの数値解の一般論

速度（u_i, $i=1,2,3$）と圧力（p）を変数として、差分法によって表記の流れ場を解くことを考える。時間的に定常な流れを扱う場合にも、適当な予測値を初期値として時間発展させ、収束した状態を解とすることが多いので、ここで述べることはそのままあてはまる。ほかに渦度とベクトルポテンシャル（二次元ならば流れ関数）による方法があるが、三次元流れにはあまり使われない。

圧縮性流れでは質量の保存式（連続の式）が

$$\partial\rho/\partial t+\partial(\rho u_k)/\partial x_k=0 \qquad (1)$$

のように時間発展型となっているのに対し、非圧縮流れ（$\rho=$ const.）では、

$$\partial u_k/\partial x_k=0 \qquad (2)$$

と、時間発展項を含まず、この意味では完全に陽的な時間進行差分法はありえない。これと運動量の保存式（運動方程式）

$$\partial u_i/\partial t+\partial(u_i u_j)/\partial x_j=-1/\rho\cdot\partial p/\partial x_i$$
$$+\partial[\nu(\partial u_i/\partial x_j+\partial u_j/\partial x_i)]/\partial x_j \quad (3)$$

を同時に解こうとすると、とんでもない規模の連立方程式を扱わなければならなくなる。そこで式(3)を式(2)に代入して得られるポアソンの式

$$\partial^2 p/\partial x_i\,\partial x_i=\partial(u_i u_j)/\partial x_i\,\partial x_j \quad (4)$$

を解き、その圧力を式(3)に用いて速度場の時間発展を行なう方法があり得る。MAC法をはじめ、一般的に知られている解法[1]はほとんどその変形で、時間発展に伴う誤差の累積を避ける工夫がなされている。

さて、これらの基礎式を解くときに用いられる代表的な差分格子は図1(a), (b)に示すようなものである。通常格子での3点中心差分では、連続の式と厳密に整合するポアソンの差分式は、考える点と各方向に一つとびの計7点で構成され、空間的に鋸歯状の振動解を生じやすい。ただしスペクトル法ならばその問題はない。一方MAC格子では、振動は生じにくい反面、差分点がばらばらで精度に制約があり(名目上でも2次精度未満)、乱流では特に高次の相関を得にくいなどの難点がある。さまざまな得失を考慮すると、研究段階で高精度を求めるならば通常格子、実用上安直に計算するならばMAC法の系統となるだろう。最近では複雑な場にもフィットする格子を発生させる技術が発達しているが、変換座標の基礎式でのMAC法は、とくに固体表面での境界条件の取り扱いが厄介で、必ずしも万能ではないように思われる。複雑な場では有限要素法との比較となろう。

3. ベクトル計算機に適した溝乱流の計算法

乱流場を平均量だけでなく、乱れそのものまで計算を試みようとすると、対象となる場はかなり限定される。たとえば、計算領域に流入する平均速度を与えることはできても、乱れの模様まで決めてやることは難しい。それができるのは、乱流研究が終わったときであろう。境界において速度を厳密に規定しうる例としては、固体壁や非乱流(層流やポテンシャル流れ)がある。また、無限に広い空間の一様(homogeneous)な流れでは、似たような乱れの模様があちこちにあると見なされるので、周期性を仮定できる。周期性を入れることは、乱れの波数に下限を与えることに対応するが、十分に広い計算領域を設定すればその影響は低減できる。かなり人為的ではあるが、研究対象としては好適である。

工学的にも重要で高精度なシミュレーションが可能な例としては、平行平板間の乱流(溝乱流と呼んでいる、図2)がある。平均速度分布は他愛もないものだが、平板に沿ってできる乱れの構造すら解明されていない状況であるから、計算への期待は大である。また新しい測定技術や理論の検証にも使われているので、比較の上でも都合がよい。

前置きが長くなったが、以下に計算法を示す。三次元のうち、壁に平行な2方向には周期性を仮

定するので、スペクトル法を適用できる。そこでMAC格子と通常格子の利点を折衷した図1(c)の格子（MK格子[2]と呼ぶことにする）を使う。計算条件は表1に示す通りである。壁面上での速度の境界条件は粘着（$u_i=0$）とする。壁の上の速度の点では運動方程式を扱わないので、MK格子では圧力の境界条件は不要となる。つまり、圧力の固体壁境界条件は陰的に規定されることになる。

本計算は、差分格子で捉えられないような細かい乱れをモデル化する、いわゆるLES（Large eddy simulation）である。比較的大規模な流れを $\overline{u}_i$, $\overline{p}$ で表わし、基礎方程式を差分化すると次のようになる。

$$\overline{u}_i^{(n+1)}+\triangle t\cdot\partial\overline{p}^{(n+1)}/\partial x_i = \overline{u}_i^{(n)}+\triangle t\,[\,3H_i^{(n)}-H_i^{(n-1)}\,]/2 \tag{5}$$

$$\partial\overline{u}_k^{(n+1)}/\partial x_k=0 \tag{6}$$

nは時間ステップ数で、$t=n\cdot\triangle t$ となる。時間進行では、圧力と連続の式を陰的に扱い、対流項・粘性項・外力および差分格子以下の乱れのモデルを含むH_iにはAdams-Bashforth法を適用した。式(5)(6)は、第nステップまでの流れ場が解かれているときに、さらに時間刻み$\triangle t$だけ先の流れ場を求めるための方程式を構成する。主流方向と横断方向にフーリエ変換すると、垂直方向の各格子点において速度の3成分（それぞれN_2-1個）と圧力（N_2個）のフーリエ成分が未知量となる。つまり、$N_1\times N_3$組の各波数について（$4N_2-3$）の元の連立方程式ができる。

$$\begin{aligned}
&U_j+\sqrt{-1}\,d_1(P_{j-1}+P_j)=RHS_{1j}\\
&V_j+d_{2j}(-P_{j-1}+P_j)=RHS_{2j}\\
&W_j+\sqrt{-1}\,d_3(P_{j-1}+P_j)=RHS_{3j} \qquad \text{以上}\quad j=2,3,\cdots N_2\\
&\sqrt{-1}\,c_1(U_j+U_{j+1})+c_{2j}(-V_j+V_{j+1})\\
&\qquad+\sqrt{-1}\,c_3(W_j+W_{j+1})=0 \qquad j=1,2,\cdots N_2
\end{aligned} \tag{7}$$

上式で、U，V，W，Pはそれぞれ $\overline{u}_i^{(n+1)}$, $\overline{p}^{(n+1)}$ のフーリエ成分である。また、

$$d_1=\triangle t\cdot k_1/2,\qquad c_1=k_1/2,$$
$$d_2=2\triangle t/(h_{j-1}+h_j),\qquad c_{2j}=1/h_j,$$
$$d_3=\triangle t\cdot k_3/2,\qquad c_3=k_3/2,$$

で、h_jは垂直方向の格子間隔、k_1，k_3は主流及び横断方向の波数（スペクトル法ならば波数、差分法ならば等価波数）を意味する。若干の消去演算を経て、Pを解くための幅3の帯行列が得られる。これは式(4)と関連があるので、擬ポアソンの式と呼んでおく。

手順をまとめると、(イ) 差分法で式(5)の右辺（ここでは4次精度）、(ロ) フーリエ変換して式(7)の右辺、(ハ) 擬ポアソンの式の右辺、(ニ) それを解いてP、(ホ) さらにU，V，W、(ヘ) 逆フーリエ変換して速度を（データ処理に必要ならば圧力も）求める。こうして新たな時刻の流れ場が得られる。以上を延々と繰り返して、時々刻々変化する乱流場をシミュレートする。

結果の一部を図3に示す。図3は、平板に沿ってできる高速・低速の流れの縞模様を表わしたものである。寸法が測定値を一致するばかりでなく、実験からは得難い多くの情報が得られる。

4. プログラムの高速化の過程

本プログラムのベクトル機向きの改良作業のほとんどは京大VP-100において行なわれた。計算条件は表1の梅。表2はこの涙ぐましい物語を要約したものである。

プログラムが一応完成した時点（コードＬ１７）で、1タイムステップを進行させるのに阪大のACOS 1000では7.1秒を要した。京大にベクトル機が入ったので、ライブラリのサブルーチン名などを直してプログラムを移した。全く同じコードで0.53秒で、喧伝されているほどでもないという印象である。ベクトル化率（乱流計算の中核部についてのみで、結果の処理の部分は含まない）は88.7％だった。最も時間を要する式(5)の右辺の計算は、マニュアル類を参考にして、若干の手直しで完全にベクトル化した。次は擬ポアソンを解く部分。このコードではベクトル化されない消去法を用いていた。しかも多重ループの最内側で！

そこで予め計算した逆行列を記憶しておき、単純に右辺ベクトルとの積をとることを考えた。そのコード（Ｌ１８）は大部分ベクトル化されたが、その効果は不十分だった。しかも、あとから思えば不覚にも逆行列を使ったおかげで、容量は大幅に増してしまった。「逆行列よさようなら！ＬＵ分解が常識」[(3)]を始めに思い出すべきだった。この計算のように優対角ならば枢軸要素の交換をしなくても良いので、ＬＵ成分も帯に納まる。だから、記憶容量も$3/N_2$で済み、演算回数もずっと少なくなる。

さらにもう一つ。せっかく$N_1 \times N_3$の二次元の各波数を通し番号をつけて一次元化していたのだから、これを内側にしない手はない。つまり、これまでのようにスキームに忠実に各波数ごとに連立方程式を解くことから、これを各波数成分についてパラレルに解くという発想の転換が必要だった訳である。その結果がコードＬ１９。VP-200は同じコードをS1000の70倍の速度で処理する。

さて、表2からはいくつかの興味深い結果を見て取ることができる。まずS1000での速度を見ると、ベクトル機に適するコードとスカラー機のそれとは必ずしも一致しない。またVP-200のピーク性能はVP-100の2倍だが、このプログラムでは1.6倍でしかない。つまり、ベクトル化率とベクトル効果は違う。

また、コードＬ１９では、VP-200よりSX-1の方が結果は良くない。この原因は、実は計算機性能ではなく、ＦＦＴのライブラリの質にあった。表3は一次元複素フーリエ変換の計算時間を比較したものである。処理速度やデータ長依存性にもそれぞれの特徴が出ている。（測定はやや古い。後にＡＳＬ／ＳＸはやや改善されていることを付記しておく。）

乱流の数値シミュレーションでは、得られる知識の量や定量的な信頼性は、差分格子の解像度

（格子数）に大きく依存する。今ではプログラムをコンパクト化してＩ／Ｏなしで計算できる上限まで大規模化しつつある。最新のコードでは32^3点（梅）で2.5ＭＢ、約２６万点（松）では200ＭＢとなっている。ループが十分に長くなったので、ｘｚ面内で一次元化せず、二次元のままで計算することにした。その準備のために二次元フーリエ変換のライブラリを試験した結果を表４に示す。ＶＰでは二次元版はないので、一次元を繰り返して引用しなければならない。今度は、使いやすさも処理速度も、ＳＸの勝ち。

高速計算が可能になったということは、同じ計算時間でより大規模な計算ができるわけだから、ベクトル機を活かすためにも容量制限の緩和を切望する。

5. 覚え書き

経験的に知り得たことの中から、流れの計算に限らず、先に一般論を書き記しておくことが有益であろう。

ａ．まずは計算機の選択。ピーク性能ばかりに目を奪われてはいけない。以外にコンパイラや供給されているライブラリの質がものをいう。さらにセンターのサービス内容。阪大ＳＸでは“特大”Ｗクラスの108ＭＢ，30分は他と比べて小さすぎないか。

ｂ．次に計算スキームの決定。この段階でマニュアル類を読みあさるのは遠回りになる。まず手持ちのプログラムを実行し、アナライザなどでベクトル機の効果を実感することである。

ｃ．ベクトル化されていない場合、されていてもその効果が期待したほどでもなかった場合には解説書[(4)]などを見てその原因を追求する。長大なプログラムの隅々に気を配ることは精神衛生上良くない。プログラムの長さのわずかな部分で計算時間の大部分を費やしていることが多いので、その部分を集中的にチェックする。

ｄ．計算方法の基本的な考え方の変更を迫られることもある。数値解析の教科書の常識はベクトル機では必ずしも通用しない。演算回数よりもむしろ、ベクトル処理されるかどうかに評価の重点がおかれるからである。このときにはベクトル機向きの計算法をまとめた書物[(5)]が参考になる。

ｅ．コーディング上のテクニックはプログラムが見づらくならない程度に止めたい。とくにアンローリングなどのような、その効果が機種によってまちまちな手法は最小限にしたい。

少し具体的な話にもどそう。連続体力学の数値計算では、差分法・有限要素法・境界要素法といったところが広く用いられている。決定版はないのだが、ベクトル機で計算する上での要点をまとめておこう。

ａ．差分法　差分式の各項の計算はベクトル化しやすい。あとはマニュアルにしたがってその効果を高めるのみ。多次元でもリストベクトルなどによって一本化し、ループを長くすればかなりの効果がある。問題は時間進行差分で、これには陽解法の方がベクトル効果を得やすいと思う。

ただし定常問題では収束を加速するために時間刻みを大きく設定できる陰解法も捨て難い。しかし乱流のように、陰的処理の困難な非線形項の影響が大きく、しかも時々刻々の変化が重要な場合には、時間刻みを広げるメリットは少ないので、陽解法に利がある。さて、非圧縮流れでの圧力やベクトルポテンシャルはポアソンの式に従うし、圧縮流れでも、差分格子の生成のためにポアソンの式を解くことがある。この部分でかなりの時間を費やすが、多重格子法などの優秀なPoisson solverを選ぶことが重要である。

b．有限要素法　疎行列を扱うところが特徴だが、これについてもベクトル機向きの新スキームが多く開発されている。

c．境界要素法　基礎方程式が線形であることが基本となるので、興味は半減する。流体力学では、ポテンシャル流れか、ストークスあるいはオゼーン近似など、レイノルズ数域が極端な場合になる。非線形項を湧き出し項とみなせば非線形問題へも拡張できる[(6)]が、あまり大きくは踏み出せない。さて、境界要素法では、要素間の影響係数の計算と、それが構成する密行列の反転が大部分をしめる。密行列については、良質のサブルーチンを引用するほかはない。実は影響係数の計算時間がばかにならない。境界要素の形状がよほど単純でない限り、要素をさらにサブ要素に分割して数値積分するのが順当だろう。もし、(イ) 被積分関数を副プログラムで与え、(ロ) 各要素ごとに数値積分を行なっているとしたら、そのプログラムは最もダサイと断言できる。(イ) の欠陥はベクトル化されないからにほかならない。多少長々しくてもループ内に書き下ろすべし。(ロ) の欠点はループが短くなることにある。数値積分のための分割数は要素総数に比べればずっと少ないのが普通だろう。当然長い方を内側に入れるべきである。第4章でも似た例があったが、ここでも各要素ごとの数値積分をパラレルに行なうという発想が必要である。ループ内の場合分けは避けることと、要素に通し番号をつけてループを一本化することは言うまでもない。

すこしテーマから外れてサービスしてしまったが、ここに書いたようなことは、プログラミングしてみれば誰でも気がつくようなことばかりである。また、この記事のほかに参照できる記録としては航技研の報告[(7)]や京大センターのもの[(8)]がある。

高速化も究極に近づくと、ほとんど職人芸の域に入る。その結果として非常に読みづらいプログラムが出来上ったりすると、知識の共有あるいは継承という点ではむしろ逆効果になる。また一回限りの計算ならば、開発に要した時間と費用が、高速計算の経済的効果を上回るなどの茶番になりかねない。特殊な計算機にあわせてのチューニング作業は、目的に応じてほどほどに行なうべきであろう。われわれのプログラムも特別な技法を駆使すればまだまだ改良の余地はあるが、その気は全くない。ベクトル機を使いこなすことが研究の目的ではないのだから。

文　献

1 Peyret, R. & Taylor, T. D., "Computational Methods for Fluid Flow", Springer (1983)　あるいは　棚橋　「非圧縮粘性流体の過渡流れ」　機械の研究 37－3 (1985) p. 383, 37－4 (1985) p. 501.

2 Moin, P. & Kim, J., J. Fluid Mech. 118 (1982) p. 341.

3 伊理・藤野　「数値計算の常識」　共立出版　(1985)

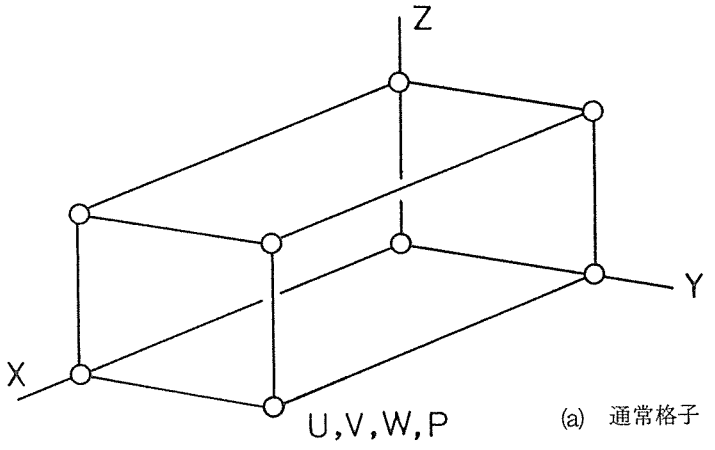
4 島崎　「ベクトル計算機入門」　京大センター広報　16－6 (1983) p. 320, 17－1 (1984) p. 9, 17－5 (1984) p. 278.　あるいは　片山・河原・大中　「FORTRAN 77/SX における高速化技法」　阪大センターニュース　16－1 (1986) p. 83.

5 日本物理学会　「スーパーコンピュータ」　(1985) 培養館
あるいは　村田・小国・唐木　「スーパーコンピュータ」　(1985) 丸善

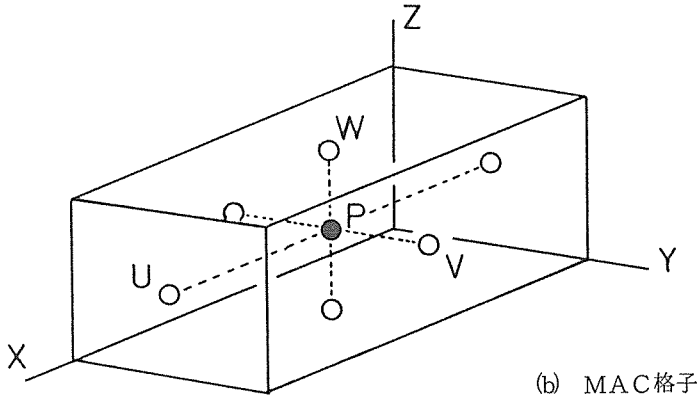
6 梶島・村田・三宅、　日本機械学会論文集B編　51－467 (1985) p. 2345.

7 中村・吉田・峯尾、　航空宇宙技術研究所報告　TR－909 (1986)
吉田・中村・内田・棚倉、　航空宇宙技術研究所報告　TR－915 (1986)

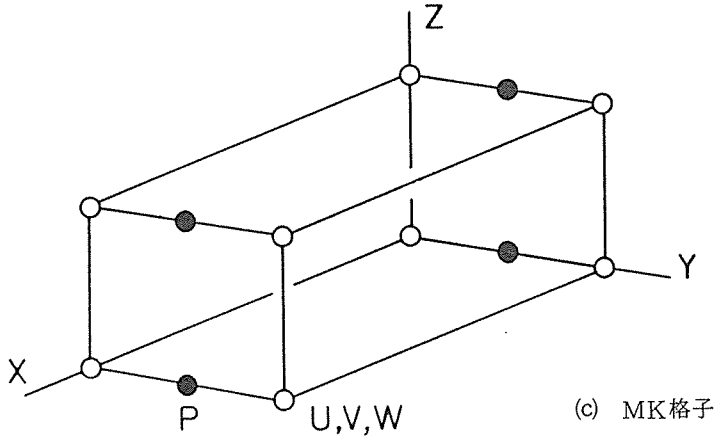
8 京都大学大型計算機センター「ベクトル計算機応用シンポジウム」論文集　(1985, 1986, 1987)



(a) 通常格子



(b) MAC格子



(c) MK格子

図1 差分格子

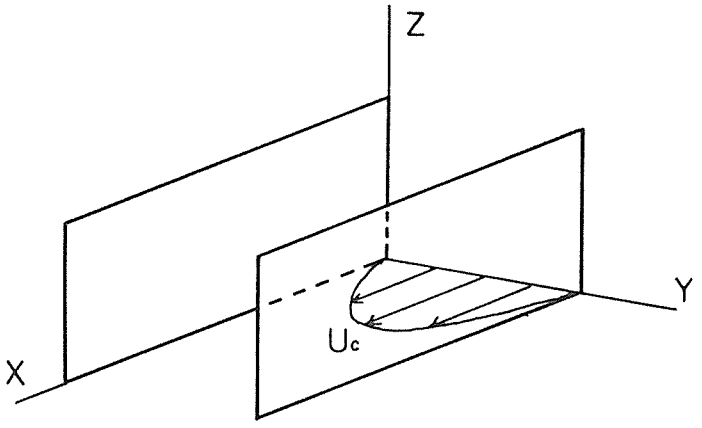


図2　流路と座標

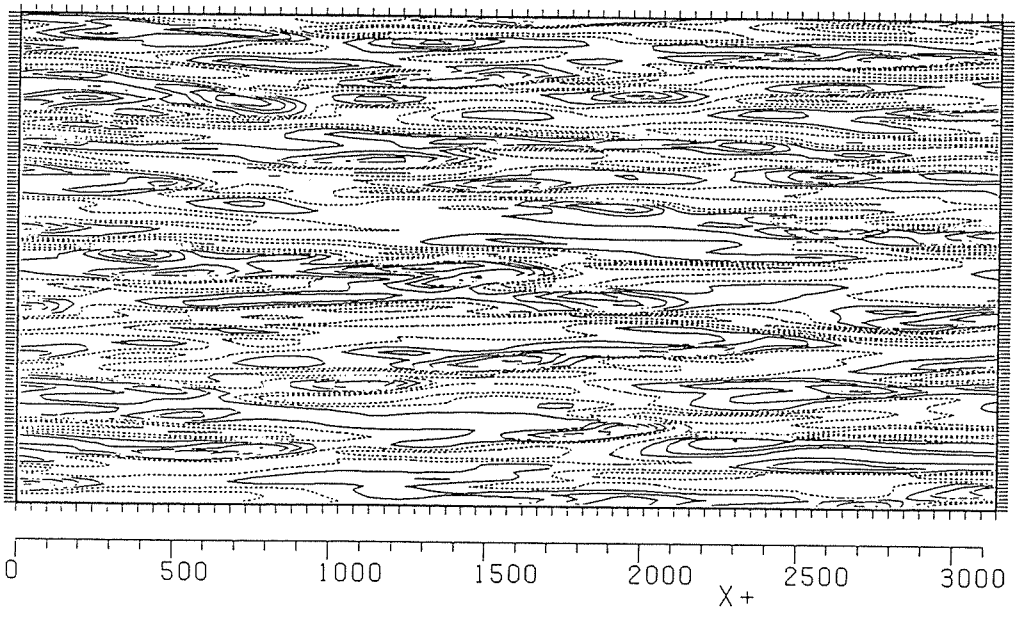


図3　壁近傍にできるストリーク構造
（乱れ速度の等速度線図）

表1　計算条件

	分割数			差分格子の解像度			時間刻み
	N_1	N_2	N_3	h_1	h_2	h_3	Δt
梅	32	32	32	75	1.2～25	19	0.002
竹	64	48	128	49	0.5～16	12	0.0005
松	128	80	256	30	0.9～13	6	0.0003

注）　空間解像度は格子間隔hに対して hu_T/ν（u_Tは壁面摩擦速度）で与えられる。垂直方向には不等間隔。
流路幅をH、中央での平均速度を U_Cとするとレイノルズ数は R_C（$=HU_C/\nu$）～10000，　R_T（$=Hu_T/\nu$）$=500$。

表2　ＬＥＳ（32^3 格子）の１ステップあたりの計算時間（秒）

コード	NEC ACOS1000	NEC HFP	FACOM VP-100	FACOM VP-200	NEC SX-1	ベクトル化率（%）	容量（MB）
Ｌ１７	7.1	2.23	0.53			88.7	5.0
Ｌ１８			0.40			99.2	8.4
Ｌ１９	9.9	1.63	0.22	0.14	0.17	99.9	4.6

表3　一次元複素フーリエ変換（16回呼び出し）の計算時間(ミリ秒)

	計算機	VP-200	SX-1	SX-1
	ライブラリ	SSL2/VP	ASL/SX	ASL
データ長	サブルーチン	VCFT1	VFCOSF	RFCFBF
2^{10}（= 1024）		4	6.7	8.5
2^{12}（= 4096）		17	29	38
2^{14}（=16384）		69	201	154
2^{16}（=65536）		620	1327	1078

表4　二次元複素フーリエ変換（10回呼び出し）の計算時間(ミリ秒)

	計算機	VP-200	SX-1
	ライブラリ	SSL2/VP	ASL/SX
データ長	サブルーチン	VCFT1	VFCTSF
(256 × 128)		265	132