

# MDGRAPE-3 を用いた渦法による乱流の直接数値シミュレーション

横田理央<sup>1</sup>, 成見哲<sup>1</sup>, 泰岡顕治<sup>1</sup>, 戎崎俊一<sup>2</sup>, 小尾晋之介<sup>1</sup>

慶応義塾大学 理工学部機械工学科<sup>1</sup>, 理化学研究所 戎崎計算宇宙物理研究室<sup>2</sup>

rioyokota@a5.keio.jp

概要：流体のメッシュフリー解析法である渦法の計算を分子動力学専用計算機 MDGRAPE-3 を用いて加速し、従来の渦法では計算コスト上困難であった一様等方性乱流の直接数値シミュレーション(DNS)を行った。計算の高速化には MDGRAPE-3 と併せて高速多重極展開法(FMM)を用い、さらに MPI による並列化を行った。これにより、同等の計算条件におけるスペクトル法と同程度の計算精度と計算速度をメッシュフリーな解析で実現できることが明らかになった。

## 1 はじめに

昨今、数値流体解析の対象が流体 固体連成問題などを伴うますます複雑な流れ場へと広がる中、渦法にはメッシュフリーの乱流解法として期待が寄せられている。しかし、渦法の計算例の多くは、メッシュフリーであるという利点を活かすために複雑な流れ場を対象としており、基礎的な流れ場における定量的な誤差評価の不足が逆にその信頼性を低下させている。

Yokota et al.<sup>[1]</sup>は最も基礎的な乱流場である一様等方性乱流の渦法解析を行い、スペクトル法と良好に一致する結果を得た。しかし、この際渦法の計算コストがスペクトル法よりも1オーダー大きいことが明らかになった。

本研究では、専用計算機 MDGRAPE-3 を用いて渦法計算を加速し、信頼性と計算コストの両面で優れたメッシュフリー解析法の構築を目指す。

## 2 粒子多体系の高速計算

渦法は計算ステップ毎に正確に流れ場を再現している必要があるため遠方場の影響を無視できない。そこで、高速多重極展開法(FMM)を用いることで遠方場を近似し、粒子数  $N$  の計算コストを  $O(N^2)$  から  $O(N)$  に低減する方法が用いられてきた。

一方、Sheel et al.<sup>[2]</sup>は専用計算機 MDGRAPE-2 を用いて渦法計算を行うことで通常の PC に比べて計算時間を2オーダー低減できることを示した。しかし、この場合、遠方場の粒子を全て計算するため計算コストは  $O(N^2)$  のままである。

本研究では分子動力学専用計算機の最新モデルである MDGRAPE-3<sup>[3]</sup>(2チップ)と FMM を併用した。ただし、FMM の中で MDGRAPE-3 上で計算できるのは近傍粒子の計算の部分のみである。

さらに、MPI による並列化を行い、各々の計算ノードに12チップの MDGRAPE-3 ボードが接続された状態で16ノードの並列計算を行った。

図1に渦法計算を1タイムステップ行った場合の粒子数の増加に対する計算時間の増加を示す。まず、とを比べると2チップの MDGRAPE-3 を用いることで Xeon の約100倍の計算速度が得られることが分かる。次に、と\*を比べると12チップの MDGRAPE-3 を16台用いることでさらに96倍の加速が得られていることが分かる。

続いて、とx、と、\*とをそれぞれ比べると  $O(N^2)$  の直接計算と  $O(N)$  の FMM が交差する点が  $N=10^3$ ,  $3 \times 10^4$ ,  $10^6$  と増加している様子が見てとれる。また、x、を比べると直接計算が100倍加速されているのに対して、それぞれ4倍程度の加速しか得られていないことが分かる。これは FMM の一部のみが MDGRAPE-3 で加速されているからであり、現在、擬粒子法<sup>[4]</sup>を用いることで FMM 全体を MDGRAPE-3 上で加速する方法を検討している。

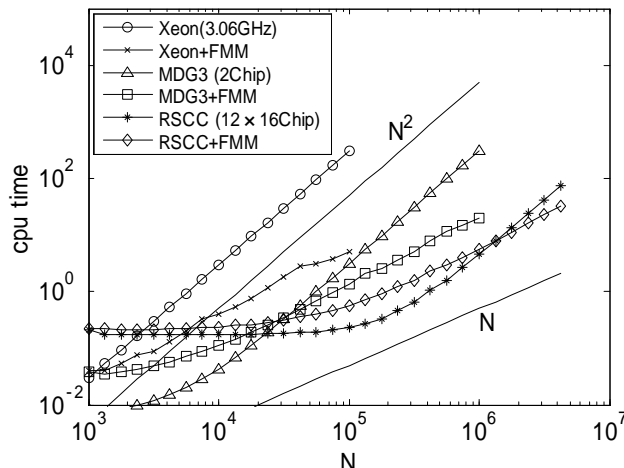


図1 CPU Time Against Number of Particles

## 4 一様等方性乱流

渦法に上記の高速化を適用し、 $Re_\lambda = 40$ 、 $N=128^3$ の3次元一様等方性乱流の解析を行い、同等の初期条件と計算点数のスペクトル法と比較した。

図2に乱流エネルギーの時間変化を示す。Spectral、Vortexはそれぞれスペクトル法、渦法の結果を表す。時間は大規模渦の回転時間  $T$  で無次元化されている。渦法の結果がスペクトル法のものと同様に一致していることが見てとれる。

図3に  $t/T=10$  における乱流エネルギーのスペクトルを示す。ただし、initial は計算開始時のエネルギースペクトルを表す。高波数側で渦法のエネルギーが僅かに過小に見積もられているが、概ねスペクトル法の結果と一致しているといえる。

$t/T=10$  まで計算するための渦法の正味の計算時間は1時間程度であり、同様の台数の汎用計算機上でのスペクトル法の計算とほぼ同等であった。

## 5 まとめ

渦法の計算を MDGRAPE-3 を用いて加速し、一様等方性乱流の計算結果をスペクトル法と比較した結果以下の知見を得た。

十分な渦要素数を用いることで渦法によるメッシュフリーな直接数値シミュレーションが可能であることが示された。また、このような大規模な粒子多体系の計算を加速する手法として、FMMとMDGRAPE-3を併用することで、既存の格子を用いた流体解析法と同等の計算速度を実現することができた。

今後の計算の大規模化に伴い、本手法の計算コスト  $O(N)$  はスペクトル法やFFTを用いた高速Poissonソルバの計算コスト  $O(N \log N)$  に比べて低くなることが予想される。よって、渦法はメッシュフリーであるという利点の他に、粒子多体系専用計算機を利用でき、超大規模計算において相対的に計算コストが低くなるという特長があることが明らかになった。

## 謝辞

本研究の初期段階において、八柳祐一博士(静岡大)に専用計算機(MDGRAPE-2)を用いた渦法の計算について助言をいただいたことを記し、謝意を表す。

## 参考文献

[1] R. Yokota, T. K. Sheel, & S. Obi, 「Calculation

of Isotropic Turbulence Using a Pure Lagrangian Vortex Method」, J. Comp. Phys. in press, doi: 10.1016/j.jcp.2007.06.003

[2] T. K. Sheel, K. Yasuoka, & S. Obi, 「Fast Vortex Method Calculation Using a Special-Purpose Computer」, Comp. Fluids, 36, 1319–1326. (2007)

[3] T. Narumi, Y. Ohno, N. Okimoto, T. Koishi, A. Suenaga, N. Futatsugi, R. Yanai, R. Himeno, S. Fujikawa, M. Ikei, & M. Taiji. 「A 55 TFLOPS Simulation of Amyloid-forming Peptides from Yeast Prion Sup35 with the Specialpurpose Computer System MDGR APE-3, Proceedings of the SC06. (2006)

[4] J. Makino, 「Yet Another Fast Multipole Method Without Multipoles-Pseudo-Particle Multipole Method.」 J. Comp. Phys., 151, 910-920. (1999)

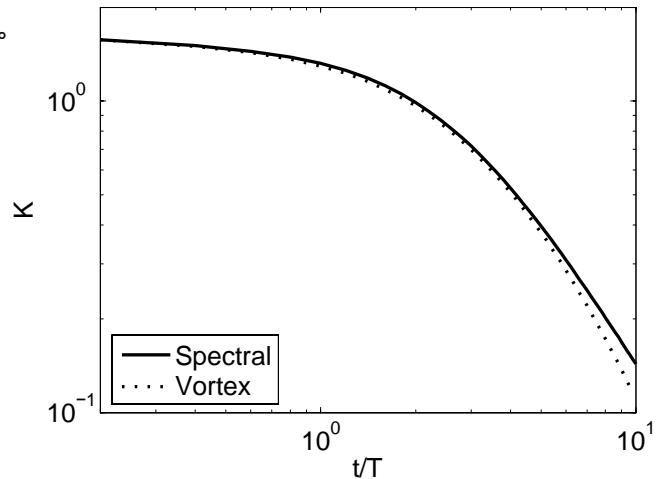


図2 Decay of Kinetic Energy

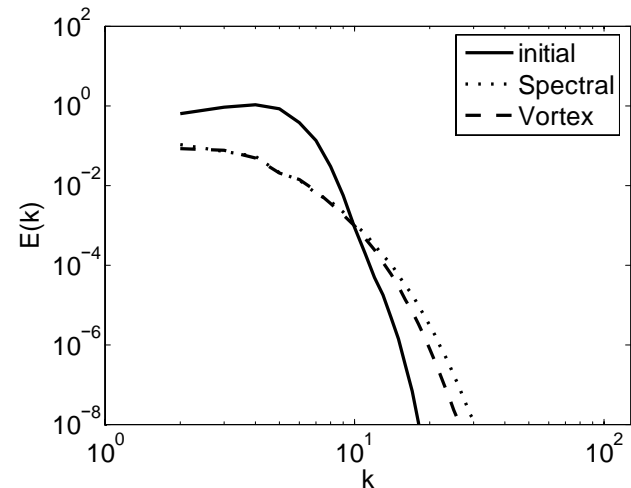


図3 Energy Spectra at  $t/T=10$