

jh140022-NA12

超多自由度複雑流動現象解明のための計算科学

石原 卓（名古屋大学大学院工学研究科）

概要 流体力学, 物理, 計算科学, 及び情報科学の分野の研究者の学際的な共同により, 超多自由度複雑流動現象解明のための計算科学的研究を推進した. 本年度の主な成果の概要は以下の通りである. (1) 一様等方性乱流の世界最大規模直接数値計算結果(格子点数 12288^3 の高レイノルズ数乱流場)の全域の可視化と部分領域の対話的な可視化と解析を実現する手法を開発した. (2) 乱流中の慣性粒子の追跡を可能にする並列版 3 次スプライン補間に基づくコードの高効率化, 格子点数 1024^3 の乱流場中の $128^3 \times 8$ 個の粒子を追跡した数値実験の実施, および, 開発したデータ解析コードの使用, により乱流中の慣性粒子の集中メカニズムの特徴付けを行った. (3) n ヘプタン予混合自己着火過程の数値実験結果に対して温度場の散逸要素分解を用いた解析を行い, 乱流による温度場のトポロジーの変化と着火遅れの関係, および, 乱流によって変形する散逸要素上の化学反応の進行過程についての理解を深めた.

1. 共同研究に関する情報

(1) 共同研究を実施した拠点名

名古屋大学, 神戸大学, RIKEN, 筑波大学,
名古屋工業大学

(2) 共同研究分野

超大規模数値計算系応用分野

(3) 参加研究者の役割分担

【代表】総括・大規模 DNS コード開発

石原卓（名古屋大学大学院工学研究科）

【副代表】大規模 DNS データの可視化

森健策（名古屋大学情報連携統括本部）

【共同研究者】

・大規模 DNS データ解析

Jha, Pradeep（名古屋大学大学院工学研究科）

金田行雄（愛知工業大学基礎教育センター）

吉田恭（筑波大学大学院数理物質科学研究科）

・大規模 DNS データ解析・情報縮約法の開発

芳松克則, 岡本直也（名古屋大学大学院工学研究科）

・並列計算手法の開発

石井克哉（名古屋大学情報基盤センター）

・大規模 DNS コード開発

後藤俊幸（名古屋工業大学創成シミュレーション工学専攻）

・大規模 DNS データの可視化, コード開発

横川三津夫, 森下浩二（神戸大学大学院システム情報学研究科計算科学専攻）

宇野篤也（RIKEN）

2. 研究の目的と意義

目的：積乱雲中の雨滴の急激な成長過程, 乱流による火山灰や汚染物質の拡散過程など自然や環境において問題となる流れ, および, 燃焼や高速移動物体周りの流れなど工学的に重要な流れの多くは非線形性が非常に強く, 自由度が巨大な高レイノルズ数(高 Re)乱流である. よって, 超多自由度複雑流動現象の予測・制御のためには, 複雑さの核となる「乱流」の性質およびその役割の理解が重要である. 乱流現象の解明には, スーパーコンピュータを駆使した大規模な直接的数値シミュレーション(DNS)と生成される大規模乱流(時系列)データの対話的な解析と可視化が非常に有効である. 特に, 近年の大規模 DNS によって得られる高 Re 乱流データは, その詳細な解析と可視化による知見が, 現実的で具体的な応用問題に有効活用できる段階になってきている.

本研究では, 流体力学, 物理学, 計算科学, 情報科学, ハイパフォーマンス・コンピューティング(HPC)の分野の研究者の学際的な共同により, 超多自由度複雑流動現象解明のための計算科学的研究

を展開する。具体的には、乱流のカノニカルな問題のさらなる大規模 DNS を目指したコード開発、大規模乱流 DNS によるデータベース構築、大規模時系列データの解析と可視化および情報縮約手法の開発を行う。また、それらの手法を用いて、応用問題に取り組み、燃焼、雲中の雨粒の生成・発達過程など様々な乱流現象の解明を目指す。

具体的に扱うテーマは以下のものである。

- (A) カノニカル乱流(周期境界条件下の Box 乱流, 平行平板間乱流, 乱流境界層等)の高精度・高解像度 DNS
- (B) 乱流中の高効率粒子追跡シミュレーション
- (C) 詳細もしくは簡略化学反応メカニズムを用いた 3 次元乱流燃焼 DNS

その他、本研究では、京コンピュータによるプロダクトラン、名大の情報基盤センターのスーパーコンピュータを用いて得られたデータの解析と可視化、研究室レベルのワークステーションによるシームレスな詳細可視化解析を可能にする環境を整備し、超多自由度複雑流動現象解明のための計算科学的研究拠点の構築を目指す。

意義：台風や積乱雲、大気境界層乱流など現実的な高 Re 乱流は巨大な自由度を有するため、その DNS は一般に不可能である。しかし、近年のスーパーコンピュータを駆使した、乱流の大規模 DNS により、Re の比較的高い乱流場の直接的な解析が可能になって来ている。近年、日本が世界をリードしてきた乱流の計算科学的研究のノウハウをさらに進化・応用させることにより、より大規模な問題やより新しく実用上重要な問題にチャレンジすることは、学問的に重要であるのみならず、基礎的研究成果を社会に還元し、役立てるという点からも重要である。特に本研究で扱う問題は、積乱雲中の雨粒の生成過程の解明や現実的な汚染物質の拡散の予測の高度化、乱流燃焼の高効率化と制御などに関連しており、計算科学による解決が期待される、挑戦的で意義のあるものである。

なお、本研究で得られる大規模データは、高レイノルズ数のナビエ・ストークス方程式を高精度・高解像度に解くことによって得られる貴重な

ものであり、乱流の基礎および応用研究に用いることができる。そのため、乱流大規模データベースを必要とするコミュニティで拠点を形成し、データを共有して、有効に活用するための基盤技術を開拓することは非常に有意義である。特に、大規模時系列データを対話的に可視化・解析する技術の開拓とそれを可能にする環境(データ構造やストレージ)の整備は今後ますます重要になる。

本研究では、実際に乱流の大規模データベースやそれを作成するための並列化プログラムを共有し、上記の可視化技術の開拓と環境の整備を実践的に実施していくところが新しく、今後の HPC の基盤技術の開発のためにも重要であると思われる。

3. 当拠点公募型共同研究として実施した意義

- 名古屋大学情報基盤センターの協力により、京で実施した格子点数 12288^3 の乱流 DNS による渦度場の可視化の結果を巨大モニターにて観察することができた。また、格子点数 8192^3 の乱流(スナップショット)中に没入していく高精細な動画の作成が実現した。
- 並列版 3 次スプライン補間に基づく、乱流中の慣性粒子の追跡コードの高速化、および、データ解析コードの解析が進み、物理的意味のあるデータが得られるようになった。
- n-ヘプタン自己着火過程の温度場の散逸要素の可視化と解析により、要素の変形と化学反応の進行の関係について理解が深まった。

4. 前年度までに得られた研究成果の概要

(A) 乱流のカノニカルな問題(周期境界条件下の Box 乱流)の DNS

前年度は、開発した一様等方性乱流の DNS コードの計算結果の妥当性を空間解像度の異なる大規模 DNS(格子点数 4096^3 , 6144^3 , 8192^3 , 12288^3)の結果(詳細な渦度場)の比較によって確認した。また、格子点数 4096^3 の乱流 DNS を実施して構築した渦度場の時系列データを paraview を用いて系統的に可視化・解析し、高 Re 乱流中の高渦度領域は、薄い剪断層を形成している割合が高いこと、およ

びそのような渦構造中には非常に強い渦度点が多数存在して生成・消滅を繰り返していることを明らかにした。

(B) 乱流中の高効率粒子追跡シミュレーション

前年度は、京用に開発した領域 2 軸分割のスペクトル法乱流 DNS コードに 3 次スプライン補間を並列に行う粒子追跡コードを組み込み、乱流 DNS によって得られる速度場中の流体粒子および慣性粒子の追跡を可能にした。また、いくつかの数値実験により、計算結果の妥当性の確認を行った。

(C) 簡略化学反応メカニズムを用いた 3 次元乱流燃焼 DNS

前年度は n ヘプタンの簡略化学反応メカニズムを用いた自己着火過程の 3 次元 DNS の結果を解析し、自己着火過程で重要な低温酸化反応がおきる薄い領域について、その膜状領域の厚さと進行速度が温度勾配に依存して決まっていることを定量的に明らかにした。また、乱流による混合が、初期温度揺らぎのある予混合気の温度の最大値の上昇を抑制し、平均着火時期を遅らせることを明らかにした。

5. 今年度の研究成果の詳細

(A) 乱流のカノニカルな問題(周期境界条件下の Box 乱流)の DNS

今年度は、京コンピュータの一般課題プロジェクト「カノニカル乱流の大規模直接数値シミュレーション」で得た格子点数 8192^3 の乱流場 ($Re=0(10^5)$) の高渦度領域を系統的に可視化(全域の可視化と没入可視化)し、高 Re 乱流中の強い渦の組織構造には 10λ (λ はテイラー長) を超えて分厚い構造がないこと(渦度集中領域がある方向に薄いこと)を観察した。また、データベース構築中の格子点数 12288^3 の世界最大 Re 乱流場 ($Re>10^5$) の全域における高渦度領域を可視化(図 1)するとともに、粗視化したエンストロフィー場を用いて部分領域を対話的に可視化(特徴的な渦組織構造を抽出して可視化)する方法を開発・活用し、高 Re 乱流特有の階層的な渦構造の理解を深めた。

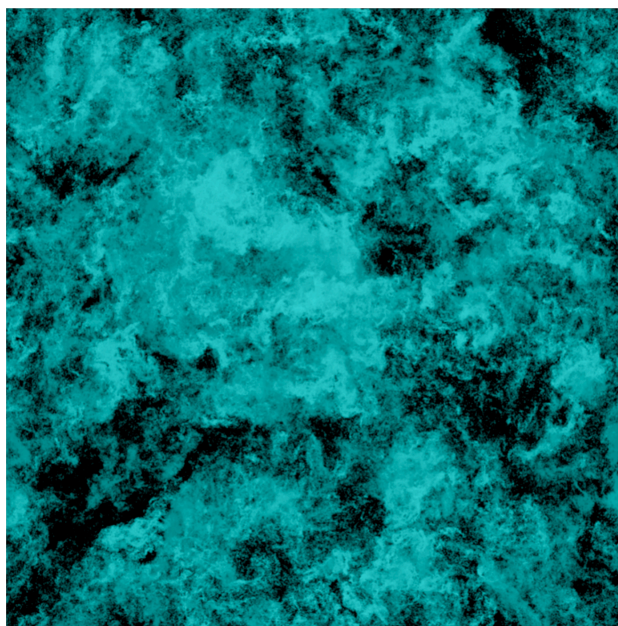


図 1: 世界最大規模の乱流 DNS (格子点数 12288^3 , $Re>10^5$) による渦度集中領域の可視化

(B) 乱流中の高効率粒子追跡シミュレーション

前年度開発したコードの粒子追跡部分に対して、スプライン補間計算用通信データをリパックすることにより、粒子位置での速度計算を 18 倍 (5.5T から 0.3T に) 高速化することに成功した(格子点数 256^3 の乱流場において 128^3 の粒子追跡を 16 ノード用いて行う計算で流体部分の計算時間を T とした時)。また、粒子データ通信を隣接ノード間のみで実施することより粒子位置情報の通信部分を 5.5 倍 (3.3T から 0.6T) 高速化した。結果として、乱流 DNS の格子点数を N^3 としたとき、 $(N/2)^3$ の粒子追跡を $2T$ 程度で計算可能にした。また、格子点数 1024^3 や 2048^3 の乱流 DNS 中で $128^3 \times 8$ 程度の粒子追跡が(粒子追跡無しの DNS と比べ)2 割弱の計算時間増加のみでできるようにした。さらに、粒子の集中を特徴つけるための統計解析コードの開発も進み、物理的に意味のある結果が得られるようになった。

(C) 簡略化学反応メカニズムを用いた 3 次元乱流燃焼 DNS

今年度は、n ヘプタンの自己着火過程の DNS で得られたデータを温度場の散逸要素を用いて解析し、乱流が温度場のトポロジーを変えることによって、

着火時期を遅らせる働きがあることを明らかにした。また、個々の散逸要素の流れによる変形と散逸要素上の反応の進行の関係を解析し、細長く伸びた散逸要素上では温度勾配が小さく反応は速く進行し、それと垂直な方向では温度勾配が大きく反応が遅く進行することを明らかにした。

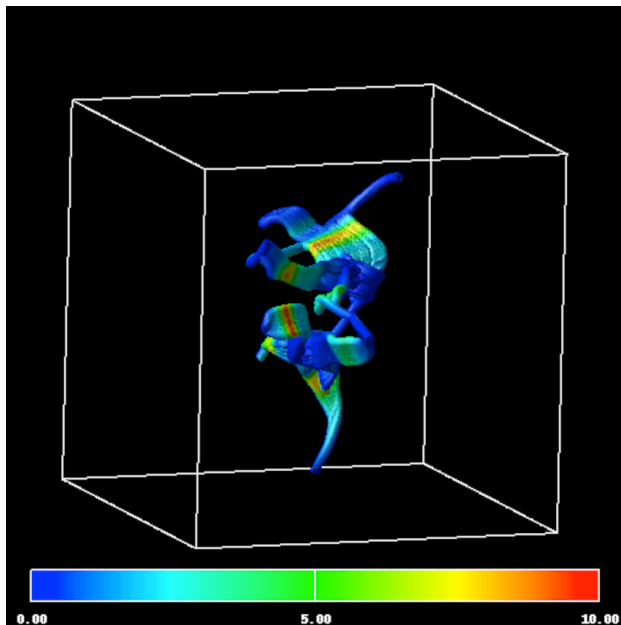


図 2: n ヘプタンの自己着火過程における散逸要素上の温度勾配の大きさの可視化。温度の極小点近傍で要素が細長く伸びた箇所温度勾配が小さくなっていることが確認できる。

6. 今年度の進捗状況と今後の展望

(A) 乱流のカノニカルな問題(周期境界条件下の Box 乱流)の DNS

京コンピュータを用いて得られた高 Re 乱流場の解析と可視化が進み、成果が得られつつある。また、公開用データの構築も進んでいる(達成度 100%)。

高 Re 乱流特有の渦の組織構造の可視化と解析をさらに進め、その統計的性質のレイノルズ数依存性および時間変化について明らかにしていくことが今後の課題である。

(B) 乱流中の高効率粒子追跡シミュレーション

乱流の大規模 DNS で実用的な効率の粒子追跡が可能となり、物理的に意味のある結果が得られるようになった(達成度 100%)。

今後、HPC の専門家と連携し、更なる高速化を行う。そして、格子点数 4096³ 以上、粒子数 1024³ 以上の粒子追跡シミュレーションの実現を目指す。これにより、高 Re 乱流特有の渦の組織構造と慣性粒子の運動の関係が明らかになると期待できる。

(C) 簡略化学反応メカニズムを用いた 3 次元乱流燃焼 DNS

乱流燃焼 DNS によって得られる時系列データの詳細な散逸要素解析が可能になった(達成度 90%)。

今後は、時間発展法、差分法の見直しもを行い、計算のさらなる効率化を図る。そして、より大規模な DNS の実現とそれにより得られる時系列データの解析を目指す。また、これまで、n ヘプタンの自己着火過程における低温酸化反応と流れの関係を主に解析してきたが、今後はイソオクタンの強乱流下の失火現象(本着火を含む、よりスティッフな現象)の解明もターゲットに入れたコード開発も実施していく予定である。

7. 研究成果リスト

(1) 学術論文

・ Thin shear layer structures in high Reynolds number turbulence -Tomographic experiments and a local distortion model, Julian C. R. Hunt, Takashi Ishihara, Nicholas A. Worth, Yukio Kaneda, FLOW TURBULENCE AND COMBUSTION, 92(3), 607-649, 2014

・ 高レイノルズ数乱流中の強い渦の組織構造, 石原 卓, 偏微分方程式の背後にある確率過程と解の族が示す統計力学的な現象の解析 Stochastic Processes and Statistical Phenomena behind RDFs RIMS 共同研究報告集 1919, 35-37, 2014

・ Small-scale anisotropic intermittency in magneto- hydrodynamic turbulence at low magnetic Reynolds numbers, Naoya Okamoto, Katsunori Yoshimatsu, Kai Schneider, Marie Farge, Physical Review E, 89 巻 3 号, 033013, 2014

・ ノルマルヘプタン予混合自己着火過程に対する温度非一様性及び乱流の影響の直接数値計算によ

る解析, 石原 卓, 伊藤 貴政, 三木 貴史, 芳松 克則, 寺地 淳, 日本機械学会論文集, Vol. 80, No. 820, DOI: 10.1299/transjsme.2014tep0, 2014

・ Analysis of conditional statistics obtained near the turbulent/non-turbulent interface of turbulent boundary layers, Takashi Ishihara, Hiroki Ogasawara, Julian C.R. Hunt, Journal of Fluids and Structures, Volume 53, pp 50-57, doi:10.1016/j.jfluidstructs.2014.10.008, 2014

・ 一様等方性乱流の直接数値シミュレーションコードの京コンピュータ向け最適化, 森下 浩二, 横川 三津夫, 宇野 篤也, 石原 卓, 金田 行雄, 研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC) , 2014-HPC-147, 17 号, pp1-5, 2014

(2) 国際会議プロシーディングス

該当なし

(3) 国際会議発表

・ Vortical Structures in the DNS of Turbulence at Reynolds Number Higher Than 10^4 , Takashi Ishihara, Mini-Workshop for Turbulence Research, The University of Hong Kong, 2014/7/11

・ Interfacial phenomena in turbulent magnetohydrodynamic channel flows in an imposed magnetic field, Naoya Okamoto, Yusuke Otake, Takashi Ishihara, Waves and Turbulence in Rotating, Stratified and Electrically Conducting Fluids, Cambridge, UK, 2014/07/14-07/25

・ Dissipation element analysis of an auto-ignition process in a homogeneous n-heptane/air mixture turbulence with temperature fluctuations, Takashi Ishihara, JSPS Supported Meeting on Interscale Transfers and Flow Topology in Equilibrium and Nonequilibrium Turbulence, University of Sheffield, 2014/9/15-16

・ Interfacial phenomena in turbulent magnetohydrodynamic channel flows at low magnetic Reynolds number, Naoya Okamoto, Yusuke Otake, Takashi Ishihara, 67th Annual Meeting of the APS Division of Fluid Dynamics, The Moscone Center, San Francisco, 2014/11/23-11/25

・ Energy Spectra of Higher Reynolds Number Turbulence by the DNS with up to 12288^3 Grid Points, Takashi Ishihara, Yukio Kaneda, Koji Morishita, Mitsuo Yokokawa, Atsuya Uno, 67th Annual Meeting of the APS Division of Fluid Dynamics, The Moscone Center, San Francisco, 2014/11/23-11/25

・ Coherent vorticity extraction in turbulent channel flow using anisotropic wavelets, Katsunori Yoshimatsu, Teluo Sakurai, Kai Schneider, Marie Farge, Koji Morishita, Takashi Ishihara, 67th Annual Meeting of the APS Division of Fluid Dynamics, The Moscone Center, San Francisco, 2014/11/23-11/25

・ Vortical Structures in High Reynolds Number Turbulence ($Re \sim 10^5$) by Large-Scale DNS on K computer, Takashi Ishihara, Seminar at Imperial College London, 2014/10/8

・ Thin shear layers in homogeneous high Reynolds number turbulence and in turbulent boundary layer, Takashi Ishihara, Julian C.R. Hunt, Seminar at Delft University of Technology, 2014/10/10

・ Interfacial phenomena in turbulent magnetohydrodynamic channel flows in an imposed magnetic field, Waves and Turbulence in Rotating, Naoya Okamoto, Yusuke Otake, Takashi Ishihara, Stratified and Electrically Conducting Fluids, 2014/07/14 -07/25 Cambridge, UK

・ Influence of vortex structure /dynamics on turbulence statistics - Is it so significant? Katsunori Yoshimatsu, Koujiro Anayama, Yukio

Kaneda, Waves and Turbulence in Rotating, Stratified and Electrically Conducting Fluids, 2014/07/14-07/25 Cambridge, UK

・ Coherent vorticity extraction in turbulent channel flow using orthogonal wavelets, T. Sakurai, K. Yoshimatsu, K. Schneider, M. Farge, K. Morishita, T. Ishihara, European Fluid Mechanics Conference 10, Copenhagen, Denmark, 2014/09/14-09/18

・ Direct numerical simulation of high Reynolds number turbulence by the K computer, T. Ishihara, K. Morishita, M. Yokokawa, A. Uno, Y. Kaneda, JAPAN-RUSSIA WORKSHOP ON SUPERCOMPUTER MODELING, INSTABILITY AND TURBULENCE IN FLUID DYNAMICS (JR SMIT2015), Keldysh Institute for Applied Mathematics RAS, Moscow, Russia, 2015/3/3-3/6

・ Adaptive Wavelet Simulation for Weakly Compressible Flow Bounded by Solid Walls of Arbitrary Shape, Naoya Okamoto, Margarete Domingues, Katsunori Yoshimatsu, Kai Schneider, 2015 SIAM Conference on Computational Science and Engineering, The Calvin L. Rampton Salt Palace Convention Center, Utah, USA, 2015/3/14-3/18

・ Scalar and momentum transfer processes across stratified sheared turbulent interfaces, J. C. R. Hunt, M. Moustou, A. Mahalov, T. Ishihara, J. Westerwel, M. Braza, EUROMECH Colloquium 567: Turbulent mixing in stratified flows, DAMTP, Centre for Mathematical Sciences, Cambridge, UK, 2015/3/22-3/25

(4) 国内会議発表

・ Vortical structures in homogeneous high Reynolds number turbulence, 石原卓, Joint seminar (with Prof. Konstantin Mischaikow) at Osaka University, 2014/4/17

・ 低磁気レイノルズ数電磁流体チャネル乱流における乱流・非乱流界面, 岡本直也, 大竹悠介, 石

原卓, 日本物理学会 2014 年秋季大会, 中部大学春日井キャンパス, 2014/9/7-9/10

・ 乱流における小スケールの渦構造の大スケールの統計への影響, 芳松克則, 穴山晃士郎, 金田行雄, 日本物理学会 2014 年秋季大会, 2014 年

・ 一様等方性乱流の直接数値シミュレーションコードの京コンピュータ向け最適化, 森下 浩二, 横川 三津夫, 宇野 篤也, 石原 卓, 金田 行雄, 第 205 回 ARC・第 147 回 HPC 合同研究発表会 (HOKKE-22), 小樽経済センターホール, 2014/12/9-12/10

・ 乱流境界層における慣性粒子の運動の直接数値シミュレーション, 平田 亮介, 石原 卓, 第 28 回数値流体力学シンポジウム (タワーホール船堀), 2014/12/9-12/11

・ ノルマルヘプタン予混合気の HCCI 乱流燃焼の散逸要素解析, 浅田 宗志, 石原 卓, 芳松 克則, 第 28 回数値流体力学シンポジウム (タワーホール船堀), 2014/12/9-12/11

・ Computational science of high Reynolds number turbulence, 石原卓, 流体方程式の構造と特異性に迫る数値解析・数値計算 (名古屋大学), 2014/12/8-12/9

・ 乱流燃焼の大規模直接数値シミュレーション, 石原卓, 第 22 回 LBM 研究会 (名古屋大学), 2014/12/19

・ カノニカル乱流の大規模直接数値計算, 石原卓, 第 27 回 理論懇シンポジウム 「理論天文学・宇宙物理学と境界領域」, 国立天文台 三鷹キャンパス すばる棟大セミナー室, 2014/12/24 - 12/26

(5) その他 (特許, プレス発表, 著書等)

該当無し