

jh200021-NAH

## 高レイノルズ数乱流のデータ科学プラットフォームの構築

石原 卓 (岡山大学)

### 概要

本研究の目的は「京」を用いて構築した貴重な非圧縮性乱流のビッグデータを活用し、多様な解析や可視化を用いた新しいデータサイエンスを試みるとともに、新たに圧縮性乱流の基礎データベースも構築し、それらを広く解析・活用できるように整備することで、日本が世界を先導する、高レイノルズ数乱流のデータサイエンスの研究のためのプラットフォームを構築することである。今年度は、省メモリ 3DFFT を用いた微分演算プログラムを作成しデータ解析を行った。また、乱流場と乱流中を運動する慣性粒子の位置・速度のデータベースを活用し粒子運動と乱流場の関係を理解するデータ解析を実施した。その他、計算の効率化、コードの修正、安定な計算のための条件の評価を行い、圧縮性乱流の格子点数  $2048^3$  の DNS を実施可能にした。

### 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 九州大学

#### (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

- ・石原 卓(岡山大学) 研究の総括、高レイノルズ数乱流データの管理と整備、データ解析
- ・横川三津夫(神戸大学) 乱流データ構築用プログラム開発、データ解析用プログラム開発
- ・宇野篤也(計算科学研究センター) データ可視化用プログラム開発
- ・小野謙二(九州大学) データ解析用プログラム解析、データ公開用環境整備、技術支援
- ・岡本直也(愛知工業大学) 乱流データ解析
- ・金田行雄(名古屋大学) 乱流データ解析
- ・芳松克則(名古屋大学) 乱流データ解析
- ・高橋一郎(名古屋大学) 乱流データ管理、可視化および技術支援
- ・櫻井幹記(名古屋大学, 岡山大学) 乱流データ構築用プログラム開発、データ解析
- ・白石啓貴(岡山大学) データ解析, コード開発

### 2. 研究の目的と意義

乱流は自然や科学技術のさまざまな問題で現れる現象である。しかし、強い非線形性と巨大自由度を持つため、依然として未解決の難問として知られている。一方、ものづくりや気象予測をはじめ社会的関心の高いさまざまな流動現象は、個々の現象の違いによらず、共通の核として乱流のダイナミクスが深く関わっている。そのため、信頼できる予測や設計のためには乱流の解明が不可欠である。それゆえ乱流の解明は社会的に意義が高い。我々は、「京」の性能を存分に発揮させた、カノニカル乱流の大規模直接数値シミュレーション(Direct Numerical Simulation; DNS)を実施し信頼性の高い乱流 DNS データを構築してきた。

本研究課題では、「京」を用いて構築した貴重な非圧縮性乱流のビッグデータを活用し、多様な解析や可視化を用いた新しいデータサイエンスを試みるとともに、新たに圧縮性乱流の基礎データベースも構築し、それらを広く解析・活用できるように整備することで、日本が世界を先導する、高レイノルズ数乱流のデータサイエンスの研究のためのプラットフォームを構築することを目的とする。

### 3. 当拠点公募型研究として実施した意義

九州大学：京コンピュータで構築した乱流の大規模直接数値計算データの保存、管理、解析の統合環境として、大容量のストレージを有効に利用できること、他の計算機センター（富岳、東京大学、名古屋大学）との大規模ファイルの転送も高効率に実施できること、および、これらを実施するための適切なサポートが得られることが研究目的の達成のために重要であった。これにより、京から富岳への移行期間にデータ解析が実施でき、データ公開に向けてのノウハウも蓄積できた。

名古屋大学：乱流の大規模直接数値計算の今後を考える上で、富岳と同一の環境でコード開発できることが有り難かった。これにより、圧縮性乱流コードの開発が進んだ。また、複数の計算機環境での結果の詳細な比較を行うことにより、コードの信頼性をあげることができた。

### 4. 前年度までに得られた研究成果の概要

京コンピュータでは乱流の大規模直接数値計算 (DNS) のデータ ( $k_{\max} \eta = 1$ , 格子点数  $12288^3$ ,  $8192^3$ ,  $6144^3$ ,  $4096^3$ ;  $k_{\max} \eta = 2$ , 格子点数  $8192^3$ ,  $4096^3$ ;  $k_{\max} \eta = 4$ , 格子点数  $8192^3$ ) の構築を行った。ここで  $k_{\max}$  は乱流 DNS における最大波数、 $\eta$  はコルモゴロフ長である。前年度までに上述のデータを九州大学の大规模ストレージに転送するとともに、データ解析を実施するための汎用コードの開発を行った。実空間の速度場データは京であらかじめ変換済みのものを九州大学で解析した。波数空間データの 3DFFT を必要とする解析 (スペクトル精度の微分など) については必要に応じて大容量メモリが使用可能な他センター (東京大学 Oakforest-PACS) の計算資源 (別プロジェクト) を一部活用した。こうして、京から富岳への移行期間において、データ解析のための環境を整備するとともにデータ公開に向けてのノウハウの蓄積を行った。

データ解析では、実空間データから差分近似して得られる乱流統計量とフーリエ・スペクトル法の手法で微分して得られる乱流統計量の性質の相

違点と類似点を明らかにした。この知見をもとに、高レイノルズ数乱流中の(1)エネルギー散逸率の極端値の統計、(2)慣性力と粘性力の比の統計、(3)乱流中の渦構造と慣性粒子の分布の関係についての解析を進め、結果を得た。

また、格子点数  $2048^3$  および  $4096^3$  の乱流場においては、時間発展する場の中で追跡した流体粒子および慣性粒子の位置・速度データのデータベースも解析できるように整備し、解析を行った。

さらに、非圧縮性乱流と圧縮性乱流における慣性粒子の振る舞いを比較するためのデータベースを整備し、結果をまとめて発表し論文投稿するとともに、圧縮性乱流の高精度・高解像度計算コードのコアとなる 8 次精度コンパクト差分法の並列計算の高速化を行った。

### 5. 今年度の研究成果の詳細

今年度は、九州大学で整備した乱流 DNS データおよび乱流場中で追跡した流体粒子および慣性粒子の位置・速度データのデータベースを用いて、(1)慣性小領域の渦構造の相似性についての解析、(2)乱流中の特徴的な流れ構造周りの慣性粒子の運動についての解析、(3)微細渦構造周りの慣性粒子の分布についての解析、(4)粒子の慣性の大きさの違いが乱流拡散の仕方に与える影響についての解析、(5)慣性大きいダスト粒子と高レイノルズ数乱流中の組織渦構造の関係について解析を行った。

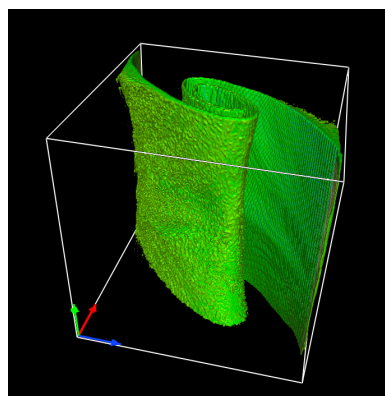


図 1: 高渦度領域周りの慣性粒子の集中領域[7.(4)-5 より]

これらのうち(2)-(5)は乱流中の微粒子運動についての解析であるが、乱流場とその乱流場中で追

跡された慣性粒子の位置・速度データによって、粒子の衝突付着過程について多くの知見が得られることがわかり、データベースとしての有効性が確認できた。

前年度投稿した、圧縮性乱流と非圧縮性乱流中の慣性粒子の運動の類似性と相違性を解析した論文については、新たに天文分野で多く用いられる等温圧縮計算の結果も加え、受理（2021 年度発表）に至った[7(1)-5]。また、高レイノルズ数乱流中の著しい散逸についての論文も改訂の段階で新たなデータ解析の結果を追加し、受理・発表に至った[7(1)-3]。なお、実空間の速度微分に関する統計量はデータの解像度 ( $k_{\max} \eta$  の値) と微分計算の方法（スペクトル微分か差分における近似精度）に依存するが、解像度と微分精度を一致させれば一貫したレイノルズ数依存性（すなわち、高レイノルズ数ほど間欠性が強いという性質）が得られること、また、 $k_{\max} \eta$  の値が 4 程度と高解像度のデータでは高解像度差分法の結果がスペクトル法に基づく結果と区別つかなくなること等の知見が得られている。

また、圧縮性乱流の直接数値計算については、京、九大、名大の計算機で結果を比較する過程で一部データの初期化忘れのバグを見つけ、その修正により、計算機環境および問題サイズに依存しない、結果の完全な一致が確認できた。また、これまで非圧縮乱流の結果との比較を同等の時間刻みを用いて行い、特に問題なかったが、圧縮性乱流の格子点数 2048<sup>3</sup> 以上の計算では、粘性項や移流項の時間変化を解像するための条件と比べ、音波を解像するための条件が最もシビアになることが明らかとなった。

## 6. 今年度の進捗状況と今後の展望

今年度は特に、(A)大規模な波数空間データの解析を可能とする省メモリ型 3DFFT 活用解析プログラムの開発、(B)乱流中を運動する慣性粒子の位置・速度データと乱流場の関係を理解するための新しいデータ解析、(C)圧縮性乱流コードの高効率化と大規模な DNS(格子点数 2048<sup>3</sup>)の実施、を計

画していた。(A)については、省メモリ型 3D FFT プログラムを開発したが 8192<sup>3</sup> のデータを変換するためには Oakforest-PACS の 2048 ノードを必要とした。(B)については 5 の(2)-(5)に記述した内容の研究が実施でき、今後の研究とデータベース構築の方針を立てることができた。また、(C)については、圧縮性乱流のコードの高効率化が実現でき、かつ安定性条件が明らかとなり、格子点数 2048<sup>3</sup> の計算が実現できる目処がたった。以上より、研究は概ね順調に進んだと考えられる。(90%)

## 7. 研究業績一覧（発表予定も含む。投稿中・投稿予定は含まない）

### (1) 学術論文（査読あり）

1. 梅村雅之, 石原 卓, 宇宙物理におけるナビエ・ストークス方程式の直接数値計算 —原始 惑星系円盤乱流中のダスト成長—, シミュレーション, Vol.39 No.2 (2020 年 6 月)
2. T. Ishihara, Y. Kaneda, K. Morishita, M. Yokokawa, A. Uno, Second-order velocity structure functions in direct numerical simulations of turbulence with  $Re_\lambda$  up to 2250, Phys. Rev. Fluids, vol. 5 No.10, 104608 (2020 年 10 月)
3. G. Elsinga, T. Ishihara, J.C.R. Hunt, Extreme dissipation and intermittency in turbulence at very high Reynolds numbers. Proceedings A, Vol. 476, No.2243, 20200591 (2020 年 11 月)
4. Yoshiki Sakurai, Takashi Ishihara, Hitomi Furuya, Masayuki Umemura, and Kenji Shiraishi, Effects of Compressibility of Turbulence on Dust Coagulation Process in Protoplanetary Disks, The Astrophysical Journal (accepted)

### (2) 国際会議プロシーディングス（査読あり）

該当なし

### (3) 国際会議発表（査読なし）

該当なし

(4) 国内会議発表 (査読なし)

1. 石原 卓, jh190068-NAH: 高レイノルズ数乱流のデータ科学プラットフォームの構築, JHPCN: 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点第 12 回 シンポジウム 2020 年 7 月(オンライン, 招待講演)
2. 石原 卓, jh200021-NAH: 高レイノルズ数乱流 のデータ科学プラットフォームの構築, JHPCN: 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点第 12 回 シンポジウム 2020 年 7 月(オンライン, ポスター発表)
3. 櫻井 幹記, 石原 卓, 梅村 雅之, Multi-scale turbulent flow structures and particle collision statistics on planetesimal formation, JpGU-AGU Joint Meeting 2020, 2020 年 7 月 14 日
4. 森中 宏樹, 石原 卓, 稲津 将, 台風に伴う気象現象と流れ構造の関係のデータ解析, 日本流体力学会 年会 2020, 山口大学, 2020 年 9 月 18 日(オンライン)
5. 白石 啓貴, 櫻井 幹記, 石原 卓, 乱流中の 慣性粒子の衝突・付着現象理解のための数値解析 2, 日本流体力学会 年会 2020, 山口大学, 2020 年 9 月 19 日(オンライン)
6. 櫻井 幹記, 石原 卓, 乱流中の多重スケール 流れ構造と粒子衝突統計の関係についての数値解析, 日本流体力学会 年会 2020, 山口 大学, 2020 年 9 月 20 日(オンライン)
7. 石原 卓, 高レイノルズ数乱流中の微粒子運動 のデータ科学, 大阪大学 MMD モデリング部門主催ワークショップ「工学と数学の接点を求めて」2020 年 11 月 27 日(オンライン)
8. 浅井瑞貴, 石原 卓, 乱流中の慣性粒子の衝突過程に対する重力の影響の DNS データ解析, 第 34 回数値流体力学シンポジウム 2020 12 月 (オンライン)
9. 石原 卓, 金田 行雄, 森下 浩二, 横川 三津 夫, 宇野 篤也, テイラー長に基づくレイノルズ数 2250 までの乱流 DNS における 2 次の速度構造関数, 第 34 回数値流体力学シンポジウ ム 2020 年 12 月(オンライン)

(5) 公開したライブラリなど

該当なし

(6) その他(特許, プレスリリース, 著書等)

該当なし