

課題番号 12-NA10

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 流れ, 物理, 計算科学, 情報科学分野の研究者の学際的な共同研究により, 超多自由度複雑流動現象解明のための計算科学を展開した. 特に, カノニカルな乱流場, 乱流燃焼, 粒子追跡に関する大規模直接数値計算 (DNS) 手法の検討および開発を行い, 以下の成果を得た. (1) カノニカルな乱流場の世界最大規模 DNS の実現に向け, 京コンピュータ用の領域 1 次元及び 2 次元分割のコードを開発し, 妥当な性能と結果を得た. (2) n ヘプタンの簡略化学反応メカニズムを用いた 3 次元乱流燃焼用コードを用いた計算機実験を行い, 乱流に化学反応を一様化する役割があることを明らかにした. (3) 乱流中の慣性粒子の運動を見る上で重要と思われる渦構造について, その特性を明らかにし, 時系列データを構築した. また, 格子点数 4096 の 3 乗の大規模時系列データから, 興味のある領域を抽出してその時系列可視化を自動化して行う手法を開発した.

1. 研究の目的と意義

目的: 雲中の雨粒の発生・成長過程, 火山灰や汚染物質の拡散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, 超多自由度な複雑流動現象である. それらの流れの理解と予測, 制御のためには, 複雑さのコアとなっている「乱流」の果たす役割の定性的および定量的理解が重要であると思われる. 複雑流動現象解明のためには, 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) の実施とそれによって得られたデータの対話的な可視化・解析が非常に有効である. 特に, 近年, 大規模 DNS を実施することにより, 巨大自由度を有する高レイノルズ数 (Re) 乱流場のデータが得られるようになったため, その詳細なデータ解析による知見が, 現実的で具体的な応用問題に有効活用できるようになってきたと考えられる.

本研究では, 流れ, 物理, 計算科学, 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展開する. 具体的には, 乱流のカノニカルな問題 (周期境界条件下の一様等方性乱流, 平行平板間乱流など) のさらなる大規模 DNS を目指したコード開発, 大規模 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とともに, 乱流 DNS における手法を発展させ, 燃焼, 雲中の雨粒の生成・発達過程などの応用問題における大規模計算を実現するためのコード開発を実施し, 現象の解明を目指す.

具体的に開発するコードは, 京コンピュータやその次世代のスーパーコンピュータの使用を想定した以下のものである.

- (A) 乱流のカノニカルな問題 (周期境界条件下の Box 乱流, 平行平板間乱流) の DNS コード
- (B) 詳細化学反応および簡略化学反応メカニズムを用いた 3 次元乱流燃焼用コード
- (C) 雲物理などへの応用を考慮した, 乱流中の高効率粒子追跡コード

また, 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等のスーパーコンピュータを用いたデータ解析と可視化, 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: 高 Re 乱流は巨大な自由度を有するため, 台風や積乱雲など現実的な高 Re 乱流の 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, 比較的高 Re の乱流場の直接的な解析が可能になりつつある. 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／環境に還元し、役立てるという点からも重要であると考えられる。特に本研究で開発する(A), (B), (C)のコードは、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、計算科学で解決可能な挑戦的で意義のある問題設定であると考えられる。

なお、本研究で得られるデータは、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大規模データであり、乱流の基礎研究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と考えられる。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と考えられる。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。

2. 当拠点公募型共同研究として実施した意義

(1) 共同研究を実施した大学名と研究体制

(i) 共同研究を実施した大学名

名古屋大学, 名古屋工業大学, 筑波大学, 神戸大学

(ii) 研究体制

【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

金田行雄 (愛知工業大学基礎教育センター)

有光敏彦, 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

賀谷 信幸, 陰山 聡, 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)

(2) 共同研究分野

超大規模数値計算系応用分野

(3) 当公募型共同研究ならではの事項など

・情報科学の分野の最先端の可視化技術を用いた大規模データの可視化により、高レイノルズ数乱流中の渦の組織構造の解明が進んだ。

・神戸大学の π -CAVE を用いた、平行平板間乱流中の渦構造の時系列 4 次元可視化が実現した。

・高レイノルズ数乱流データベースを活用した解析により乱流の物理モデルの検証が実現した。

・paraview を用いた可視化手法を導入し、動画作成の高効率化を実現した。

3. 研究成果の詳細と当初計画の達成状況

(1) 研究成果の詳細について

(A) 乱流のカノニカルな問題(周期境界条件下の Box 乱流, 平行平板間乱流)の DNS コード

ベクトル型並列計算機であった地球シミュレータ用に開発された、一様等方性乱流のフーリエスペクトル法に基づく DNS コード(1 次元領域分割)をスカラー型並列計算である京コンピュータ用に改

良したもの、および、京コンピュータのインターコネクターのアーキテクチャに合わせ、2次元領域分割にしたものを開発し、結果の検証と性能評価を実施した。その結果、2次元分割コードにおいては、格子点数 4096 の 3 乗の乱流 DNS を 64×64 ノード用いて実施し、実行効率 2.38%を得た(これは、コードの性質上、開発の基礎段階としては妥当な数字である)。

また、格子点数 4096 の 3 乗の乱流 DNS を実施し、渦構造の時間発展を解析するための時系列データベースを構築するとともに、注目した領域を抽出して動画を自動的に作成する手法を開発した。

平行平板間の高レイノルズ数乱流の DNS については、摩擦速度に基づくレイノルズ数 5120 のデータベースを構築し解析可能にしたほか、チェビシェフ・タウ法を用いた大規模計算における時間発展手法が安定である理由を考察し、更なる大規模計算を実施する上で検証すべき問題点をまとめた。

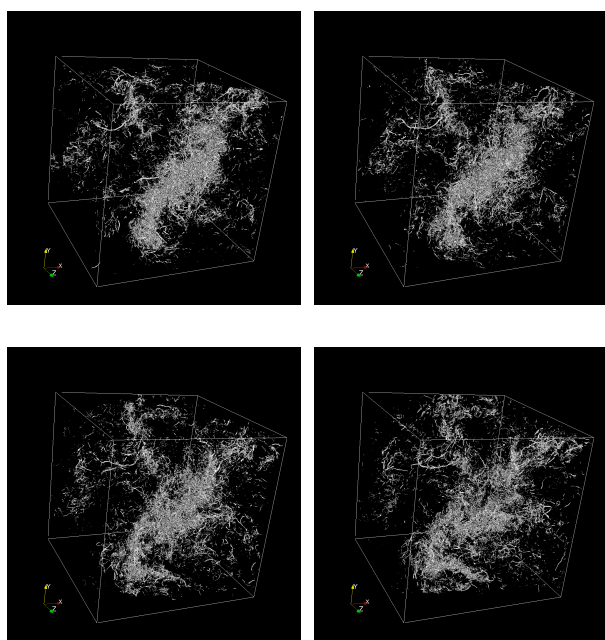


図 1：格子点数 4096 の 3 乗の乱流 DNS によって得られた、高レイノルズ数乱流場中の強い剪断層の $10t_h$ における時間変化。表示領域は格子点数 512 の 3 乗の部分空間。

(B) 詳細化学反応および簡略化学反応メカニズムを用いた 3 次元乱流燃焼用コード

簡略化学反応メカニズムを用いた n ヘプタンの自己着火過程の 3 次元 DNS により、初期の流れ場が乱流の場合と静止場の場合、化学反応がある場合とない場合の比較数値実験を実施し、自己着火過程における化学反応と乱流の相互作用の解析を進めた。その結果、乱流の有無に関わらず、熱発生の伴う低温酸化反応により、薄い膜状の領域で熱発生率が極大となり、膜状領域が高温部から低温部に伝播していく様子が観察できた。また、その薄い膜状領域は温度の 870K の等値面とほぼ一致しており、その進行方向の後方に OH ラジカルの濃度のピークがあることが分かった。また、乱流は、膜状領域の厚さを薄くするとともに、構造を複雑化し、膜同士の衝突頻度を高め、結果として、反応を一様化し、流れなしで温度が一様な 0 次元反応に近づける役割があることが分かった。

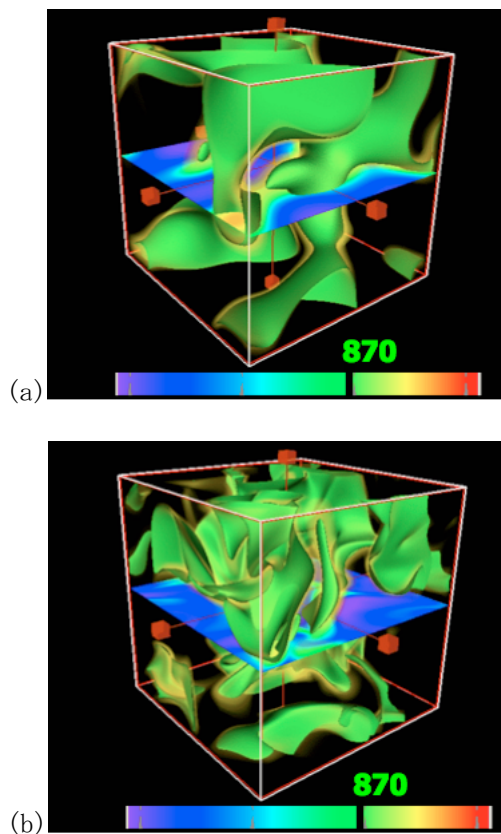


図 2：n ヘプタンの自己着火過程の直接数値シミュレーションによって得られた、低温酸化反応進行時の急激な熱発生を伴う反応領域(黄)と温度 870K の等値面。(a) 初期に速度静止場の場合、(b) 初期にランダム場を用いた場合。

(C) 雲物理への応用を考慮した, 乱流中の高効率

粒子追跡コード

高レイノルズ数乱流中の慣性粒子の追跡コードの開発そのものを進める以前に, ターゲットとする乱流場の DNS の高効率化が必要となり, (A) のコード開発を先行して実施することとなった. また, 慣性粒子の運動と関係して興味のある乱流場およびターゲットとなる渦構造として, 高レイノルズ数乱流場中の強い剪断層と乱流境界層の乱流/非乱流界面近傍に着目した解析を進め, それらの構造の定量的な特徴付けを実施した.

(2) 当初計画の達成状況について

一様等方性乱流 DNS について, 京コンピュータ用の 1 次元および 2 次元分割コードが完成し, おおの結果の検証が出来たため, 今後の更なる高速化および最適化の基礎が完成した. また, 平行平板間乱流については, 高レイノルズ数乱流場のデータベースが構築でき, 更なる大規模計算の問題点も整理できたため, 達成度は 100% に近い.

また, 乱流燃焼コードについては, 京コンピュータ用に MPI と自動並列のハイブリッド化が実施できたこと, 及び, 予備的な数値計算により, 自己着火過程における乱流の役割が明らかになってきたことにより, より現実的な問題に挑戦する準備が整ってきたと考えられる. そのため達成度は 100% である.

乱流中の粒子追跡については, まだコード完成に至っていないが, ターゲットとなる乱流場の高効率な DNS コードの開発が進んだこと, およびターゲットとなる渦構造の性質の理解が進んだことにより, 一定の進展はあったと考えられ, 達成率は 70% である.

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については, 可視化手法技術の高度化, プログラムの改良や大規模データの共有による乱流の計算科学的研究が加速しており, 国際/国内共同研究へとつながっている. 以上から, 十分に当初の目標を達成していると考えられる. (達成度 95%)

4. 今後の展望

- (A) 乱流 DNS コードの高効率化および最適化をすすめ, 世界最大規模の乱流 DNS の実施とそれによって, 物理的に意味のあるデータベースの構築を目指す. また, 超大規模時系列データを活用した研究を推進し, 様々な超他自由度複雑流動現象を計算科学的な解明を目指す.
- (B) 乱流燃焼のコードの効率化を実施し, 格子点数 2048 の 3 乗の DNS を目指す. 現在のところ, 名古屋大学の FX1 を用いた格子点数 256 の 3 乗の計算で実現できる領域サイズは 4mm 立方であるが, 2048 の 3 乗の計算では実用的な内燃機関のサイズの計算が実現可能である. 今後は, 京コンピュータと次世代スーパーコンピュータを活用して, 実用的な問題サイズにおいて, 燃焼を制御するための様々な課題に取り組んでいきたいと考える.
- (C) (A) で開発した乱流 DNS コード (2 次元領域分割) に実際に慣性粒子の追跡を行うコードを組み込み, 高レイノルズ数乱流中の慣性粒子の振る舞いの解析の実現を目指す.

5. 研究成果リスト

- (1) 学術論文 (投稿中のものは「投稿中」と明記)
 - ・大規模直接数値シミュレーションによる周期境界乱流中のエネルギー散逸率とエネルギースペクトル, 金田行雄, 石原 卓, 横川三津夫, 板倉憲一, 宇野篤也, ながれ, 31 巻 241-244 (2012)
 - ・Examination of the Four-Fifths Law for Longitudinal Third-Order Moments in Incompressible Magnetohydrodynamic Turbulence in a Periodic Box, K. Yoshimatsu, Phys. Rev. E, 85, 066313-1 - 066313-7 (2012)
 - ・Coherent Vorticity and Current Density Simulation of Three-Dimensional Magneto hydrodynamic Turbulence Using Orthogonal Wavelets, K. Yoshimatsu, N. Okamoto, Y. Kawahara, K. Schneider and M. Farge, Geophys. Astrophys. Fluid Dyn., 107, Issue 1-2, 73-92 (2013)

- Study of two elements constituting turbulence by a multifractal theory for probability density functions--- Through the analyses of 4096³ DNS ---, T. Arimitsu, N. Arimitsu, K. Takechi, Y. Kaneda and T. Ishihara, J. Phys. : Conf. Series, 410, 012083 (5pp.) (2013)
- Analyses of turbulence in a wind tunnel by a multifractal theory for probability density functions (A selected paper from BIFD2011), N. Arimitsu, T. Arimitsu and H. Mouri, Fluid Dynamics Research, 44, 031402 (15pp.), (2012)
- On freely decaying, anisotropic, axisymmetric Saffman turbulence, P. A. Davidson, N. Okamoto and Y. Kaneda, Journal of Fluid Mechanics, 706 巻 150-172 (2012)
- ノルマルヘプタン自己着火過程における反応と乱流の相互作用の三次元 DNS 解析, 寺地 淳, 生田 博也, 三木 貴史, 石原 卓, 日本機械学会論文集 (B 編) 79 巻 (799 号) 431-438 (2013)

(2) 国際会議プロシーディングス

- Numerical Analysis of Effect of Intermediate Species Diffusion on Low Temperature Oxidation Process in a Homogeneous n-Heptane Mixture, Atsushi Teraji, Takashi Ishihara and Yukio Kaneda, Proc. COMODIA2012(2012)
- Improvement of Reality of CG Motion Pictures by Hydrodynamic Effects: Effects of Turbulence, Takashi Ishihara, Yuji Hattori, Ninth International Conference on Flow Dynamics (2012)
- Interactive visualizations of the large-scale data generated by the DNS of isotropic turbulence on 40963 grid points, Takashi Ishihara, Kensaku Mori, USB Proceedings of JSST2012 International Conference on Simulation Technology (2012)
- 4D visualization of isotropic turbulence and dynamics of high-entropy structures, Yuji Hattori, Takashi Ishihara, USB Proceedings of JSST2012 International Conference on

Simulation Technology (2012)

- Coherent Vorticity and Current Density Simulation of Magnetohydrodynamic Turbulence, K. Yoshimatsu, N. Okamoto, Y. Kawahara, K. Schneider, and M. Farge, Proceedings of 31st JSST Annual Conference JSST 2012 International Conference on Simulation Technology Sep. 27-28, 2012, Kobe, Japan, 184-189 (2012)

(3) 国際会議発表

- Strong thin shear layers in homogeneous high Re turbulence-structures and statistics, Takashi Ishihara, Julian C.R. Hunt, Yukio Kaneda, First Multiflow Conference on the Turbulent-Non turbulent interface, Madrid, Spain Oct 25-26, 2012
- Intermittency and isotropy in three-dimensional homogeneous magnetohydrodynamic turbulence, K. Yoshimatsu, Mathematical Theory of Turbulence via Harmonic Analysis and Computational Fluid Dynamics, Nagoya University, Japan, 2012 年 12 月 07 日~2012 年 12 月 08 日
- Coherent vorticity and current density simulation of three-dimensional magnetohydrodynamic turbulence using orthogonal wavelets, K. Yoshimatsu, N. Okamoto, Y. Kawahara, K. Schneider and M. Farge, American Physical Society 65th Annual DFD Meeting, San Diego, California 2012 年 11 月 18 日-2012 年 11 月 20 日
- Coherent Vorticity and Current Density Simulation of Magnetohydrodynamic Turbulence, K. Yoshimatsu, N. Okamoto, Y. Kawahara, K. Schneider, and M. Farge, 31st JSST Annual Conference JSST 2012 International Conference on Simulation Technology, Kobe, Japan 2012 年 09 月 27 日~2012 年 09 月 28 日
- Coherent vorticity simulation of three-dimensional forced homogeneous isotropic

turbulence using orthogonal wavelets, N. Okamoto, K. Yoshimatsu, K. Schneider, M. Farge and Y. Kaneda, 6th EUROPEAN CONGRESS ON COMPUTATIONAL METHODS IN APPLIED SCIENCES AND ENGINEERING (ECCOMAS 2012), ウィーン, オーストリア 2012 年 9 月 10 日～9 月 14 日

・ Strong Shear Layer in High Re Turbulence - DNS Results, Takashi Ishihara, Mini Workshop on Urban Research a Review & Outlook on the Hong Kong Built Environment (2012)

・ Conditional analysis of the statistics near the turbulent/non-turbulent interface of turbulent boundary layers, Hiroki Ogasawara, Takashi Ishihara, APS 65th annual DFD meeting (2012)

・ Small-scale statistics in direct numerical simulation of turbulent channel flow up to $Re_\tau=5120$, Koji Morishita, Takashi Ishihara, Yukio Kaneda, APS 65th annual DFD meeting (2012)

・ Intense dissipative mechanisms of strong thin shear layers in high Reynolds number turbulence, Takashi Ishihara, Julian C. R. Hunt, Yukio Kaneda, APS 65th annual DFD meeting (2012)

・ 4D visualization of isotropic turbulence and dynamics of high-entropy structures, Yuji Hattori, Takashi Ishihara, JSST2012 International Conference on Simulation Technology (2012)

・ Interactive visualizations of the large-scale data generated by the DNS of isotropic turbulence on 4096^3 grid points, Takashi Ishihara, Kensaku Mori, JSST2012 International Conference on Simulation Technology (2012)

・ Improvement of Reality of CG Motion Pictures by Hydrodynamic Effects, Takashi Ishihara, Yuji Hattori, Ninth International Conference on Flow Dynamics (2012)

・ Numerical Analysis of Effect of Intermediate Species Diffusion on Low Temperature Oxidation Process in a Homogeneous n-Heptane Mixture, Atsushi Teraji, Takashi Ishihara and Yukio Kaneda, COMODIA2012 (2012)

(4) 国内会議発表

・ 大規模直接数値シミュレーションによる周期境界乱流中のエネルギー散逸率とエネルギースペクトル, 金田行雄, 石原 卓, 横川三津夫, 板倉憲一, 宇野篤也, 日本流体力学会年会 2012, 2012 年

・ 高レイノルズ数一様等方性乱流中の強い剪断層, 石原 卓, Hunt Julian C. R., 金田行雄, 日本流体力学会年会 2012, 2012 年

・ 高レイノルズ数乱流の計算科学, 石原 卓, 流体若手夏の学校 2012, 京都大原, 2012 年 7 月

・ Volume Penalization 法による翼果まわりの流れの数値解析, 澤村陽一, 石原 卓, 研究集会「生物流体力学における同期および関連する現象」, 2012 年

・ 直接数値計算による三次元レイリー・ベナール対流乱流の渦構造, 丹羽佑太, 星野邦雄, 芳松 克則, 石原 卓, 日本流体力学会年会 2012, 高知大学 朝倉キャンパス 2012 年 9 月 16 日～9 月 18 日

・ Study of two elements constituting turbulence by a multifractal theory for probability density functions --- Through the analyses of 4096^3 DNS ---, T. Arimitsu, N. Arimitsu, K. Takechi, Y. Kaneda and T. Ishihara, International Conference on Mathematical Modeling in Physical Sciences (IC-MSQUARE-2012) 2012 年 9 月 3-7 日, Mercure Korona Hotel, Budapest, Hungary

・ レイノルズ数の異なる 4096^3 DNS 乱流のマルチフラクタル PDF 理論による比較解析, 武智公平, 有光直子, 有光敏彦, 金田行雄, 石原 卓, 日本物理学会 2012 年秋季大会 2012 年 9 月 18 日--21 日, 横浜国立大学, 横浜

・ 一様磁場中における電磁流体チャネル乱流の直

接数値計算, 大竹悠介, 岡本直也, 石原卓, 日本流体力学会年会 2012, 2012 年 9 月 18 日, 高知大学

・高レイノルズ数乱流中の強い渦の組織構造, 石原卓, RIMS 共同研究 研究集会「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」 2013 年 2 月 14 日

・高レイノルズ数チャンネル乱流の非等方スペクトル, 森下浩二, 石原卓, 金田行雄, 九大応力研共同利用研究集会「壁乱流における大規模構造の統計法則と動力学に果たす役割」, 2013 年 2 月 23 日

・乱流境界層の乱流・非乱流界面近傍の条件付き統計解析, 石原卓, 小笠原浩樹, 九大応力研共同利用研究集会「壁乱流における大規模構造の統計法則と動力学に果たす役割」, 2013 年 2 月 23 日

・ノルマルヘプタンの自己着火過程における反応と乱流の相互作用の 3 次元 DNS とデータ解析, 三木貴史, 生田博也, 寺地 淳, 石原卓, 第 26 回数値流体力学シンポジウム, 2012 年

・乱流境界層の DNS における乱流・非乱流界面近傍の構造と統計, 小笠原浩樹, 石原卓, 第 26 回数値流体力学シンポジウム, 2012 年

・n-Heptane 予混合圧縮自己着火過程の 3 次元直接数値シミュレーションに基づくデータ解析, 三木貴史, 生田博也, 寺地 淳, 石原卓, 第 50 回燃焼シンポジウム, 2012 年

・乱流境界層の直接数値シミュレーションを用いた乱流・非乱流界面の解析, 小笠原浩樹, 石原卓, 金田行雄, 日本流体力学会年会 2012, 2012/9/16-18

・ノルマルヘプタン自己着火過程における反応と乱流の相互作用の三次元 DNS 解析, 寺地 淳, 生田博也, 三木貴史, 石原卓, 第 23 回内燃機関シンポジウム, 2012 年

(5) その他 (特許, プレス発表, 著書等)

・乱流の計算科学 乱流解明のツールとしての大規模数値シミュレーション, 金田行雄, 石井克哉, 石原卓, 岩本 薫, 吉田 恭, 半場藤弘, 芳松

克則, 共立出版, 2012 年

・Energy dissipation rate and energy spectrum in high resolution direct numerical simulations of turbulence in a periodic box, 金田行雄, 石原卓, 横川 三津夫, 板倉 憲一, 宇野 篤也, 日本流体力学会 2011 年度学会賞 論文賞, 2012 年 2 月