課題番号 jh130029-NA17

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，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実施・展開した．本年度はカノニカルな乱流のさらなる大規模直接数値計算を実現するため，コードの高効率化と使用メモリ削減を実施した．また，開発した乱流燃焼コードを用いた数値実験により，n ヘプタン予混合自己着火過程における温度の非一様性の影響と乱流の役割について解析した．さらに，高レイノルズ数乱流による粒子拡散現象を解明するため乱流中の慣性粒子追跡コードの並列版を開発し，数値計算結果の妥当性を確認した．

1.　研究の目的と意義

目的：雲中の雨滴の生成過程，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，自由度が巨大な複雑流動現象(高レイノルズ数乱流)である．これらの複雑流動現象の予測，制御のためには，複雑さのコアである「乱流」の性質およびその果たす役割の理解が重要である.乱流の解明には，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)の実施とそれによって得られるデータの解析と可視化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ており，高 Re 乱流 DNS データの詳細な解析による知見が，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ている.

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／高効率化するコードは,京コンピュータや次世代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

さらに，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，一般に，台風や積乱雲，大気境界層乱流など現実的な高 Re 乱流の DNS は不可能である．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／高効率化するコードは，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．

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．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．

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拠点名および役割分担

(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)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

Pradeep Jha（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）

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

超大規数値計算系応用分野

(3) 当公募型共同研究ならではという事項など

- paraview を用いた大規模時系列データの系統的な可視化により，高Re乱流中の渦の組織構造およびその中で生成・消滅する強渦度点の時間変化の知見を得ることができた．
- 情報科学分野における技術と環境を活用し，高レイノルズ数乱流中の渦の組織構造を 3 次元プリンタで印刷することにより，複雑な空間構造の把握が可能になった(図1)．
- 3 次スプライン補間の並列化コードを用いた，乱流中の慣性粒子の追跡コードの開発が進み，数値計算結果の妥当性も確認できた．
- 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6144^3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(図2)．

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)のDNSコード

前年度は，一様等方性乱流のフーリエスペクトル法に基づく DNS コードにおける配列を，京コンピュータのインターコネクタのアーキテクチャに合わせ，2 次元分割にしたものを開発した．今年度

は，開発した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．

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ベースを paraview を用いて系統的に解析することにより，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．また，高レイノルズ数乱流中に現れる，複雑な薄い剪断層を含む部分領域を 3 次元プリンタで出力し，その 3 次元的な構造把握を可能にした(図 1)．

図 1：格子点数 4096 の 3 乗の乱流 DNS によって得られた，高 Re 乱流場中の渦の組織構造(薄い剪断層)を含む部分領域を 3 次元プリンタによって出力した例．

今回，コードのさらなる高効率化のために，以下のようなチューニングも行った．1)プログラムの実行時間の多くを占める通信時間を削減するために，出来るだけ利用ノード数が少なくて済むよう使用メモリの削減を行った．具体的には，非線形項を求める際の計算順序を工夫し，同時に利用する配列の数を減らすことにより，使用メモリ量を約 10%削減した．その結果，格子点数 8192^3 の計算がこれまでの半分のノード数 128×64 で実行可能となった．2) 3 次元 FFT を行う際に，「各軸の 1DFFT」と「通信前後のデータ並び替え」の部分のループをまとめることでデータの局所性を高め，キャッシュ効率を向上させた．以上のチューニングの結果として，格子点数 8192^3 の計算を京コンピュータ上の 128×64 ノードを用いて実施し，3.14%の実効性能を得た．

京を用いた平成 25 年度のプロジェクトでは上記で開発したコードを用いて，格子点数 6144^3 および 8192^3 の高 Re 乱流のデータベースを構築したが，本プロジェクトでは，得られたデータベースから渦度データを生成し，可視化を行った(図 2)．

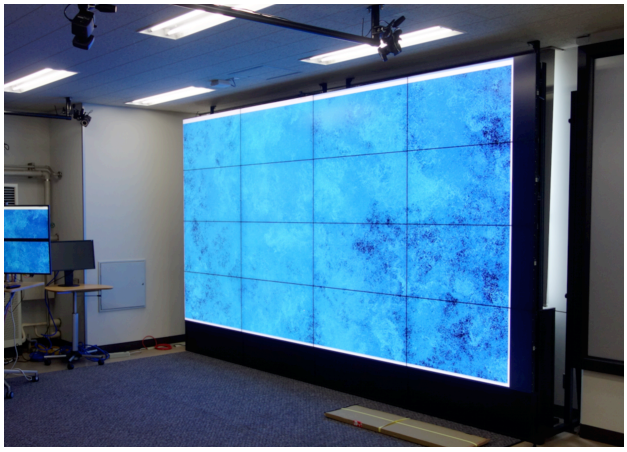

図 2：京を用いて行った乱流 DNS(格子点数 6144^3)による高渦度領域の可視化結果を名古屋大学の高精細可視化システムの巨大スクリーンを用いて表示した例．

(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

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 により，初期の流れ場が乱流の場合と静止場の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．前年度の解析により，自己着火過程における低温酸化反応では，熱発生の盛んな薄い膜状の領域が温度の 870K の等温面とほぼ一致して，極大点から極小点に向かって進行していくことが明らかになった．今年度は，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．

(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 Re 乱流中の流体粒子および慣性粒子の追跡コードの開発のため，粒子位置における流体速度を求めるために必要な3次スプライン補間の並列化コードの開発を行った．平成25年度は，そのコードを，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．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．その後，格子点数256^3の予備的な乱流DNSにより粒子追跡を行った結果，粒子の慣性の強さ（流体運動への追従性の悪さ）に応じて，粒子位置における渦度や速度勾配テンソルの第二不変量などの確率密度関数が異なることを確認した．粒子追跡のコードの高速化，および，より大規模なDNSによる粒子追跡の数値シミュレーションは今後の課題である．

(2) 当初計画の達成状況について

(i) これまでの進捗状況

一様等方性乱流DNSについて，京コンピュータ用に開発した2次元分割コードについて，メモリの削減と高効率化を行った結果，格子点数 8192^3 の計算において，使用ノード数を従来(128×128)の半分(128×64)にして，実効性能は2%から3%へと1.5倍になった．これは，限られた計算資源で積分時間が1.5倍に拡大したことを意味する．これにより平成25年度の京のプロジェクトでは格子点数6144^3と8192^3の乱流DNSデータベースを構築することができた．これらのDNSによるデータの計算領域全域における可視化も実現できた．現在，平成26年度のプロジェクトにおいて，世界最大規模DNS(格子点数12288^3)による高Re乱流データベースを構築中である．（達成度は100%）．

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済みである．コードの性能評価を行ったところ，一部スレッド非並列部が見つかりOpenMPでスレッド並列を行ったところ全体で20%高速化した．nヘプタンの予混合圧縮自己着火過程のDNSでは，反応の進行において温度分布および温度勾配が鍵を握ることが明らかになってきたため，温度場に着目した詳細な解析を進めた．その結果，乱流による温度場の混合により，最高温度の上昇が抑制され，平均自己着火時期が遅れることが分かった(投稿中)．今後，更なる大規模計算を目指す予定である．(達成度は100%)

乱流中の粒子追跡については，3次スプライン補間の並列コードの乱流DNSコードへの組み込みが完了し，乱流DNSの速度場中で実際に粒子追跡を実施するシミュレーションが実現した．今後，粒子追跡コードの高効率化を実施する予定である．（達成度は100%）

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，乱流DNSに必要なコードの高効率化が進み，京コンピュータの性能を最大限に活用した大規模な乱流DNSによるデータベース構築が実現した．現在までに構築したデータの整理や大規模データの可視化手法の開発も進んでおり，データの様々な形での共有が実現し，乱流の計算科学的研究が加速している．その他，一様等方性乱流のDNSコードを活用したMHD乱流コードや平行平板間乱流DNSコードを活用した熱対流コードや平行平板間MHD乱流コードの開発も進んでいる．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100%)

4. 今後の展望

(A) 世界最大規模の乱流DNSの実施による，十分に発達した高レイノルズ数乱流場のデータベースの構築を実施する．そのデータを解析し，高レイノルズ数乱流中の間欠的な渦構造の時間発展とその役割を明らかにする．また，世界最大規模乱流データの公開・共有の方法を検討する．

(B) 乱流燃焼のDNSコードを用いた大規模な数値実験を実施する．その一方で，乱流燃焼の制御に向けて，温度場等のスカラー場の時間変化を有効に解析する手法の開拓も実施する．

(C) 高レイノルズ数乱流中で慣性粒子を追跡する大規模な数値実験を行い，粒子の振る舞いを明らかにする.

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）

・Thin Shear Layers in High Reynolds Number Turbulence-DNS Results, Takashi Ishihara, Yukio Kaneda, Julian C.R. Hunt, Flow Turbul. Combust. 91 (4), pp 895-929, 2013

・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 Turbul. Combust. 2013

・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, T. Ishihara, Journal of Physics: Conference series, 410 (012083) , 2013

・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（頁：431-438），2013

・Analysis of conditional statistics obtained near the turbulent/non-turbulent interface of turbulent boundary layers, Takashi Ishihara, Hiroki Ogasawara, Julian C. R. Hunt, J. Fluids Struct. (投稿中)

・Small-Scale Anisotropic Intermittency in Magnetohydrodynamic Turbulence at Low Magnetic Reynolds Numbers, N. Okamoto, K. Yoshimatsu, K. Schneider and M. Farge, Phys. Rev. E, 89, 033013, 2014.

・温度非一様性と乱流のノルマルヘプタン予混合自己着火過程に対する影響の DNS 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（投稿中).

(2) 国際会議プロシーディングス

・Small scale universality and spectral characteristics in turbulent flows, Y. Kaneda, K.Morishita, T.Ishihara, Proceedings of TSFP-8, Poitiers, 2013

・Turbulence near interfaces - modeling and simulations, J. C. R. Hunt, T. Ishihara, Y. Hoarau, M. Braza, Proceedings of ERCOFTAC SYMPOSIUM on Unsteady Separation in Fluid-Structure Interaction, 17-21 June 2013, Mykonos, Greece, 55-60 2013

(3) 国際会議発表

・Inertial Subrange Spectra in the Log-Law Layer of Turbulent Channel Flow, Yukio Kaneda, Koji Morishita, Takashi Ishihara, APS-66th Annual DFD meeting, Pittsburgh, Pennsylvania, USA, 2013/11/24-26

・Structure of the turbulent/non-turbulent interface of turbulent boundary layers - DNS results, Takashi Ishihara, Hiroki Ogasawara, Julian C.R. Hunt, APS-66th Annual DFD meeting, Pittsburgh, Pennsylvania, USA, 2013/11/24-26

・Temporal behavior of strong shear layers in high Reynolds number turbulence, Pradeep K. Jha, Takashi Ishihara, APS-66th Annual DFD meeting, Pittsburgh, Pennsylvania, USA, 2013/11/24-26

・Structure of the turbulent/non-turbulent interface of turbulent boundary layers - DNS results, Takashi Ishihara, Turbulence Colloquium Mediterranea (TCM), 2013

・Predictability of three-dimensional homogeneous turbulence, Katsunori Yoshimatsu, Turbulence Colloquium Mediterranea (TCM), 2013

・Directional multi-scale statistics of quasi-static magnetohydrodynamic turbulence, N.Okamoto, K.Yoshimatsu, K.Schneider, M. Farge, Turbulence Colloquium Mediterranea (TCM), 2013

・Thin Shear Layers In High Reynolds Number Turbulence-Dns Results, Takashi Ishihara, Julian Hunt, Yukio Kaneda, ETC14, 2013年

・Thin Shear Layers In High Reynolds Number Turbulence-A Coherent-structure, Julian Hunt, Takashi Ishihara, Yukio Kaneda, ETC14, 2013

・ Dynamic Geometrical Analysis of High-Enstrophy Structures in Isotropic Turbulence , Yuji Hattori, Takashi Ishihara, European Turbulence Conference(ETC)14, 2013

・On the four-fifths law in magnetohydrodynamic turbulence, Katsunori Yoshimatsu, Eurpean Turbulence Conference(ETC)14, 2013年

・Turbulence Near Interfaces - Modelling and Simulations, ERCOFTAC SYMPOSIUM on Unsteady Separation in Fluid-Structure Interaction, J.C.R. Hunt, T. Ishihara, Y. Hoarau, M. Braza, ERCOFTAC SYMPOSIUM on Unsteady Separation in Fluid-Structure Interaction, 2013

・Analysis of conditional statistics obtained near the turbulent/non-turbulent interface of turbulent boundary layers, T. Ishihara, H. Ogasawara, ERCOFTAC SYMPOSIUM on Unsteady Separation in Fluid-Structure Interaction, 2013

・ Directional multi-scale statistics of quasi-static magnetohydrodynamic turbulence, N. Okamoto, K. Yoshimatsu, K. Schneider, and M. Farge, 55th Annual Meeting of the APS Division of Plasma Physics, 2013

(4) 国内会議発表

・一様等方性乱流中の高渦度領域の動的形状解析 , 服部裕司, 石原　卓, 日本物理学会　2013年秋季大会, 2013年

・高レイノルズ数乱流中の剪断層の時間発展, 石原　卓, Jha Pradeep, 金田行雄, Julian Hunt, 日本流体力学会　年会2013, 2013年

・3 次元等方乱流の予測可能性, 芳松克則, 日本流体力学会 年会2013, 2013年

・一様等方性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 , 穴山晃士郎, 芳松克則, 金田行雄, 日本流体力学会 年会 2013 , 2013年

・ 超多自由度複雑流動現象解明のための計算科学, 石原　卓, 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点第5回シンポジウム, 2013年

・高レイノルズ数乱流の渦構造について, 石原卓, 「宇宙生命計算科学連携拠点」ワークショップ, 2013年

・低磁気レイノルズ数 MHD チャネル乱流における乱流・非乱流界面, 大竹悠介, 岡本直也, 石原 卓, 第27回 数値流体力学シンポジウム, 2013年

・ノルマルヘプタンの自己着火過程の３次元 DNS と温度場に着目したデータ解析, 伊藤貴政, 石原卓, 第27回 数値流体力学シンポジウム, 2013年

・「京」コンピュータを用いたカノニカル乱流の大規模直接数値シミュレーション, 石原 卓, 森下浩二, 横川三津夫, 宇野篤也, 金田行雄, 第 27 回 数値流体力学シンポジウム, 2013年

・結合コンパクト差分法を用いた３次元熱対流乱流の直接数値計算, 久富夏規, 芳松克則, 石井克哉, 第27回数値流体力学シンポジウム, 2013年

・乱流のエネルギー散逸場の領域分割による解析, 武智公平, 吉田恭, 有光直子, 日本物理学会第６９回年次大会, 2014年

(5) その他（特許, プレス発表, 著書等）

該当無し