

課題番号 jh150020-NA14

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)の全域の時系列データの可視化を実現し, 渦組織構造の動力学的解析を行った. (2) 圧縮性乱流中の慣性粒子の追跡シミュレーションのコードの開発を行った. (3) n -ヘプタン予混合自己着火過程の壁ありの 2 次元直接数値計算コードを改良し, 本着火終了時までシミュレート可能にした.

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, 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
- 超大規模データ処理系応用分野
- 超大容量ネットワーク技術分野
- 超大規模情報システム関連研究分野

(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
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, 原始惑星系円盤中のダストの集積過程など自然や宇宙において問題となっている流れ, および, 乱流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) データの可視化と対話的な解析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、原始惑星系円盤中のダストの集積過程、乱流燃焼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, 圧縮性乱流等)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を用いた大規模数値実験

(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 (等温壁の導入)

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、原始惑星系円盤中のダストの集積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。

3. 当拠点公募型共同研究として実施した意義

- 京で実施した格子点数 12288^3 の乱流 DNS による渦度場の時系列データの可視化が実現し、渦組織構造の動力学の観察が可能になった。
- 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を圧縮性乱流の DNS コードに組み込むことに成功した。これにより、圧縮性乱流中の粒子追跡データの解析が可能になった。
- n-ヘプタン自己着火過程の等温壁ありの DNS コードの開発が進み、壁近傍の急激な温度変化を解像することにより、本着火終了時までの数値計算が可能になった。

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、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、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の可視化を実現させるとともに、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。

(B) 乱流中の高効率粒子追跡シミュレーション

前年度は、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。また、粒子の集中を特徴つけるための統計解析コードを開発し、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

前年度は 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。

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 12288^3 の乱流場 ($Re=0(10^5)$) の時系列データを可視化し、強い渦の組織構造の時間変化を観察可能にし、高 Re 乱流特有の階層的な渦構造の動力学の理解を深め、結果を発表した。

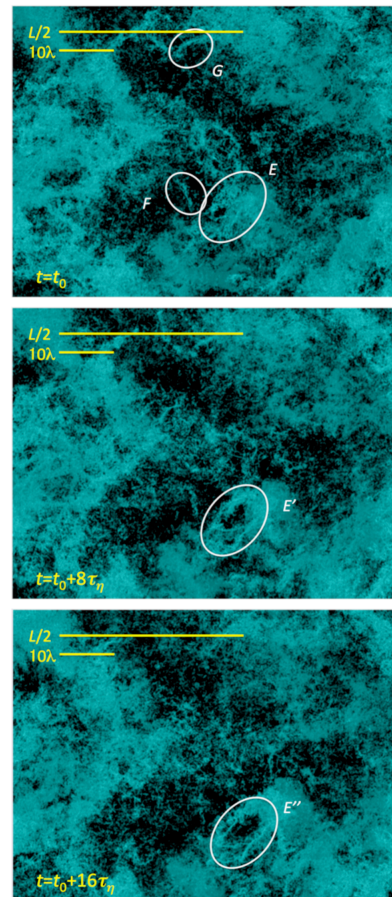


図 1: 世界最大規模の乱流 DNS (格子点数 12288^3 , $Re>10^5$) により得られた渦度組織構造の時間変化. 管状の渦組織構造の生成と消滅が観察された。

(B) 乱流中の高効率粒子追跡シミュレーション

前年度に高効率化した粒子追跡コードを高速化し、格子点数最大 2048^3 の DNS を用いて、原始惑星系円盤中のダストの集積過程解明のための乱流中の

粒子追跡シミュレーションを行い、得られた結果を天文学会にて発表した。また、**圧縮性乱流**の DNS コードに粒子追跡コードの組み込みを行い、乱流中の粒子の運動における圧縮性の影響を解析した。

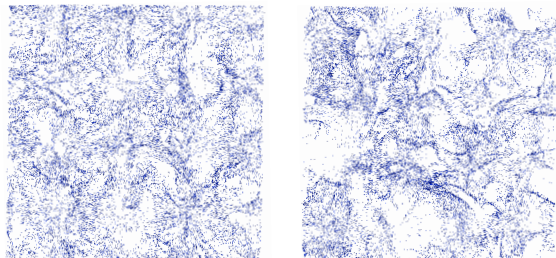


図 2: 非圧縮乱流 (左) と圧縮性乱流 (右) 中の慣性粒子 ($St=1$) の集積の様子の比較. 大スケールにおける粒子の集積の様子が異なることを示唆する結果が得られた。

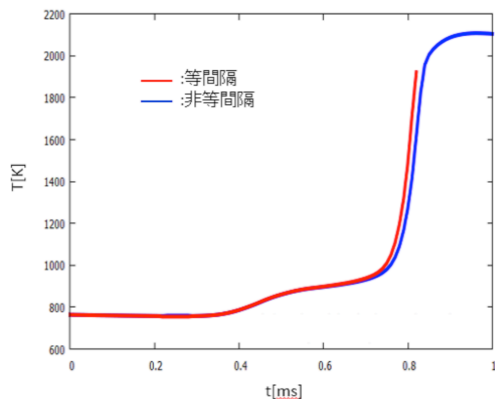


図 3: 等温壁がある場合の n ヘプタンの自己着火過程の 2 次元 DNS によって得られた温度履歴. 壁近傍に格子を集中する非等間隔格子の導入により本着火終了時までの計算が可能になった。

(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壁ありの 3 次元 DNS コードを開発し、数値実験を行った。これにより等温壁のある設定で速度揺らぎがある場合には自己着火が遅れる傾向が壁のない場合に比べて強くなることがわかった。温度場の時系列データに対し、パーシステントホモロジー解析を実施した結果、着火遅れが大きくなる状況では最高温点近傍のトポロジーの変化が大きいことが判明した。また、2 次元 DNS コードにおいて、壁近傍

の格子点数を密にすることにより、等温壁近傍の急激な温度変化を解像し、本着火終了時までの計算を可能にした。

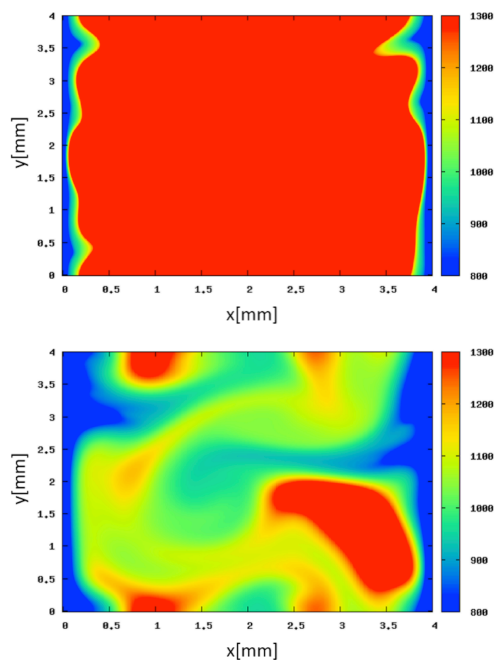


図 4: 等温壁がある場合の n ヘプタンの自己着火過程の 2 次元 DNS によって得られた時刻 $t=0.85ms$ における温度場の比較. 上: 速度揺らぎ 1m/s, 下: 速度揺らぎ 4m/s. 速度揺らぎが強い場合に壁近傍の低温部が壁から離れた領域に侵入し着火が遅れることがわかった。

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 乱流場の時系列データの可視化が実現し、渦の組織構造の時間変化の理解が深まった。得られた成果を発表し、流体力学会の数値流体力学シンポジウムの注目研究に選出された。(達成度 90%)。また、現在 DNS 結果公開の準備を進めている。

(B) 乱流中の高効率粒子追跡シミュレーション

粒子追跡コードのさらなる高速化により、物理的に意味のある結果が得られ、天文学会で成果を発表できた(達成度 100%)。現在、宇宙物理分野の研究者と共同して、論文を執筆中である。

(C)簡略化学反応メカニズムを用いた 3 次元乱流 燃焼 DNS

等温壁のある 3 次元乱流燃焼 DNS コードが完成し、n-ヘプタンの自己着火過程に対する乱流と壁の影響を調べることができた(達成度 90%)。低温酸化反応後の高温酸化反応(本着火)時に壁近傍で解が発散していたが、(2 次元計算においては)コードの改良により発散せず本着火終了時までシミュレート可能となった。壁から離れた領域で急激な温度勾配が発生する様子が観察できた。今後は、急激な温度勾配が生じる箇所で行っている物理現象の詳細を解析する予定である。

また、パーシステントホモロジー解析が有効であることが分かり、今後は温度場のみならず様々な化学種に対して組織的な解析を実施する予定である。

7. 研究成果リスト

(1) 学術論文

• Accurate Parallel Algorithm for Tracking Inertial Particles in Large-Scale Direct Numerical Simulations of Turbulence, Takashi Ishihara, Kei Enohata, Koji Morishita, Mitsuo Yokokawa, Katsuya Ishii, Parallel Computing Technologies Lecture Notes in Computer Science, Volume 9251, pp 522-527, 2015

(2) 国際会議プロシーディングス

• Coherent vorticity in turbulent channel flow: a wavelet viewpoint, Katsunori Yoshimatsu, Teluo Sakurai, Kai Schneider, Marie Farge, Koji Morishita, Takashi Ishihara, Ninth International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena,

(3) 国際会議発表

• Direct numerical simulation and dissipation element analysis of an auto-ignition process in a homogeneous n-heptane/air mixture turbulence with temperature fluctuations, Takashi

Ishihara, Workshop on Conditional statistics along lines and trajectories in turbulence, RWTH Aachen University, Germany, 2015/08/24

• Accurate Parallel Algorithm for Tracking Inertial Particles in Large-Scale Direct Numerical Simulations of Turbulence, Takashi Ishihara, Kei Enohata, Koji Morishita, Mitsuo Yokokawa, Katsuya Ishii, PaCT2015 13th International Conference on Parallel Computing Technologies, Petrozavodsk, Russia, 2015/09/01

• Coherent vorticity in turbulent channel flow: a wavelet viewpoint, Katsunori Yoshimatsu, Teluo Sakurai, Kai Schneider, Marie Farge, Koji Morishita, Takashi Ishihara, Ninth International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena, The University of Melbourne, Australia, 2015/07/02

• Energy spectrum in high Reynolds number turbulence - high resolution DNS results, Koji Morishita, Takashi Ishihara, Yukio Kaneda, Mitsuo Yokokawa, Atsuya Uno, American Physical Society 68th Annual DFD Meeting (APS-DFD2015), The Hynes Convention Center, Boston, USA, 2015/11/24

• Relative diffusion of a pair of inertial particles in the inertial sub-range of turbulence, Kei Enohata, Koji Morishita, Takashi Ishihara, American Physical Society 68th Annual DFD Meeting (APS-DFD2015), The Hynes Convention Center, Boston, USA, 2015/11/23

• General mechanisms of thin layers in high Reynolds number turbulent flows, Julian Hunt, Takashi Ishihara, Koji Morishita, American Physical Society 68th Annual DFD Meeting (APS-DFD2015), The Hynes Convention Center, Boston, USA, 2015/11/23

• Thin shear layers in homogeneous high Reynolds number turbulence and in turbulent boundary

layers, Takashi Ishihara, Koji Morishita, Julian Hunt, American Physical Society 68th Annual DFD Meeting (APS-DFD2015), The Hynes Convention Center, Boston, USA, 2015/11/23

・ Direct numerical simulations of canonical high Reynolds number turbulence, Takashi Ishihara, Koji Morishita, Mitsuo Yokokawa, Atsuya Uno, Yukio Kaneda, 2015 Japan-Russia Workshop, Japan, 2015/12/10

・ Turbulent/non-turbulent interface in turbulent magnetohydrodynamic channel flows at low magnetic Reynolds number, Naoya Okamoto, Yusuke Otake, Takashi Ishihara, 2015 Japan-Russia Workshop, Japan, 2015/12/10

(4) 国内会議発表

・ Applications of wavelet analysis to turbulence, Naoya Okamoto, 2015 International Workshop on Computational Science and Engineering, 名古屋大学, 2015/05/23

・ 一様等方性乱流中の高渦度領域の動的形状解析 II, 服部裕司, 石原 卓, 日本物理学会 2015 年秋季大会 関西大学 (千里山キャンパス), 2015/9/18

・ 大規模直接数値シミュレーションによる乱流のエネルギースペクトル, 石原 卓, 森下浩二, 横川三津夫, 宇野篤也, 金田行雄, 日本物理学会 2015 年秋季大会 関西大学 (千里山キャンパス), 2015/9/18

・ ノルマルヘプタン予混合気自己着火過程の温度場のパーシステントホモロジーを用いた解析, 石原 卓, 末吉 史弥, 荒井 迅, Mischaikow Konstantin, 日本流体力学会 年会 2015, 東京工業大学, 2015/9/26

・ ノルマルヘプタンの予混合自己着火過程における流れの役割解明のための数値実験, 末吉 史弥, 石原 卓, 芳松克則, 日本流体力学会 年会 2015, 東京工業大学, 2015/9/28

・ 平行二等温壁間のノルマルヘプタンの自己着火過程の直接数値シミュレーション, 加藤正人, 石

原 卓, 芳松克則, 日本流体力学会 年会 2015, 東京工業大学, 2015/9/28

・ 微惑星形成過程解明のための乱流の直接数値計算と粒子追跡, 江野畑圭, 石原 卓, 白石賢二, 森下浩二, 中本泰史, 梅村雅之, 日本天文学会 2015 年秋季大会, 甲南大学, 2015/9/10

・ 電磁流体乱流の直接数値シミュレーションによる原始惑星系円盤内の粒子運動の解析, 高橋良輔, 江野畑圭, 岡本直也, 芳松克則, 石原 卓, 白石賢二, 梅村雅之, 日本天文学会 2015 年秋季大会, 甲南大学, 2015/9/10

・ 乱流の直接数値計算による原始惑星系円盤中の粒子運動に対する鉛直重力の影響の解析, 小林直樹, 江野畑圭, 石原卓, 白石賢二, 梅村雅之, 日本天文学会 2015 年秋季大会, 甲南大学, 2015/9/10

・ Analysis of Complex Spatiotemporal Structures of Vortices in High Reynolds Number Turbulence, T. Ishihara, Y. Hattori, Twelfth International Conference on Flow Dynamics (ICFD2015), 東北大学, 2015/10/28

・ 高レイノルズ数乱流中の渦の組織構造とその時間発展, 石原 卓, 宇野 篤也, 森下浩二, 横川三津夫, 金田行雄, 第 29 回数値流体力学シンポジウム, 2015/12/17

・ カノニカルな古典乱流の大規模直接数値シミュレーション, 石原 卓, 平成 27 年度物性研究所短期研究会「量子乱流と古典乱流の邂逅」, 2016/1/6

・ Vortex Clusters and Their Time Evolution in High - Reynolds - Number Turbulence, Takashi Ishihara, A3 workshop :Vortex Dynamics and Turbulence, 2016/3/13

・ 原始惑星系円盤乱流と微惑星成長, 石原 卓, 江野畑圭, 小林直樹, 白石賢二, 中本泰史, 梅村雅之 日本天文学会 2016 年春季年会, 2016/3/15

・ 原始惑星系円盤における圧縮性乱流場中の粒子運動, 古谷眸, 江野畑圭, 石原卓, 白石賢二, 芳松克則, 岡本直也, 梅村雅之, 日本天文学会 2016 年春季年会, 2016/3/14

・ 乱流の「第一原理計算」による原始惑星系円盤

中のダスト粒子衝突過程に対する鉛直重力の影響
の解析, 小林直樹, 江野畑圭, 石原卓, 白石賢二,
梅村雅之, 日本天文学会 2016 年春季年会,
2016/3/15

その他（特許, プレス発表, 著書等）

・自然や人工系の流体シミュレーション, 石原卓, 特集: 物理科学, この 30 年(3), パリティ 6 月号, 34-36(2015)