

jh160050-NAJ

## 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) 開発した圧縮性乱流のコードによる計算を高精度非圧縮性乱流 DNS と比較・検証し, 数値的および物理的に妥当な結果が得られていることを確認した. (2) 乱流中の粒子追跡コードを用いた数値実験により慣性の大きい粒子のクラスタリングに関する統計解析を行い, 原始惑星系円盤乱流中のダスト粒子の付着衝突過程の考察を行った. (3) n-ヘプタン予混合自己着火過程の壁ありの 2 次元 DNS により, 壁近傍の遅延着火現象を確認した. また, 非線形性の強い乱流場では着火時刻が計算の解像度に依存すること, および解像度を上げると結果が収束することを確認した.

### 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

#### (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（名古屋大学工学研究科）
- ・並列計算手法の開発  
石井克哉（お茶の水女子大学理学部）
- ・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）
- ・データの可視化  
高橋一郎（名古屋大学情報基盤センター）

### 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科学において問題となる流れ, および, 乱流燃焼や高速移動物体周りの流れなど工学応用分野で重要となる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. 従って, 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, 乱流燃焼など多様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(微惑星形成過程の解明)

(C) 詳細もしくは簡略化学反応メカニズムを用いた乱流燃焼 DNS (等温壁近傍の着火現象の解析)

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, 計算科学による解決が期待される, 挑戦的かつ意義あるものである。

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

・OpenSceneGraph というオープンソースソフトウェアを高精細(8K)可視化システムに導入することにより, 京を用いた大規模な乱流 DNS によって得られた渦度場への没入可視化連番データをマウス操作のみで高速かつ対話的に観察できた。

・線形方程式の並列計算法を応用して, 陰的フィルタやコンパクト差分法を大規模なデータ転置をすることなく効率的に並列計算することにより, 圧縮性乱流および乱流燃焼の効率的なシミュレーションプログラムを開発することができた。

### 4. 前年度までに得られた研究成果の概要

#### (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。

#### (B) 乱流中の高効率粒子追跡シミュレーション

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, 粒子の衝突速度に関する数値解析結果を天文分野の学会にて発表した。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。

#### (C) 簡略化学反応メカニズムを用いた 3 次元乱流燃焼 DNS

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。

## 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

・京コンピュータで実施した世界最大規模乱流 DNS で得られた  $Re \sim 2300$  の高レイノルズ数乱流場中で観察された様々なサイズの管状の渦組織構造（ミクロな管状渦のクラスタ）の周りに旋回流があることを速度成分の色つけによる可視化により確認した。また、ミクロな管状渦が密に集合して形成された積分長のオーダーの大きさの層状クラスタが剪断層であることを確認した。

・8 次精度のコンパクト差分法及び 8 次精度の陰的フィルタを用いた圧縮性ナビエ・ストークス方程式の DNS コードによる弱圧縮性乱流の計算結果が、スペクトル法を用いた非圧縮性乱流の DNS の結果と比較して、数理的・物理的に妥当な結果であることを確認した。

・衝撃波捕獲の WENO スキームと高解像度なコンパクト差分法のハイブリッドによる数値計算により高マッハ数 ( $Ma=0.7$ ) における圧縮性乱流の安定した数値計算を実現した。

### (B) 乱流中の高効率粒子追跡シミュレーション

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、慣性小領域における粒子の相対速度の平均と確率密度分布の解

析を行い、岩石ダストの限界付着速度との関係を調べた。また、乱流 DNS を用いて粒子の付着成長シミュレーションを行い、平均相対速度が限界付着速度を超えるような状況においても相対速度が小さい近隣粒子は存在し、付着成長しする粒子があることを実証した。以上の結果を天文学分野の国内外の研究集会で発表した。また、圧縮性乱流中での粒子追跡の数値実験もを行い、特に、慣性の大きい粒子の衝突過程のシミュレーションにおいては、弱圧縮における計算が非圧縮における計算の代替となりうることを確認した。

### (C) 簡略化学反応メカニズムを用いた乱流燃焼 DNS

n ヘプタン自己着火過程の 2 次元 DNS コードの改良により、等温壁近傍の急激な温度変化が解像可能となった。開発したコードを用いた数値実験により、乱流が強い条件では、壁近傍の着火の非一様性が強くなり、局所的に遅延着火する領域が現れることが分かった。また、2 次元の周期的な場の計算においてコンパクト差分法を導入し、コードの高解像度化と格子点数を変えて系統的に数値実験をしたところ、n ヘプタンの着火過程のような、大小様々な拡散係数の化学種が混在する着火過程を正しくシミュレートするためには、流れの非線形性が強い場合ほど十分な空間解像度が必要であることが分かった。

パーシステントホモロジーを用いて、n ヘプタンの着火過程に関係する（簡略化学反応モデルにおける）全化学種を解析したところ、乱流が弱い場合と強い場合において、温度場よりトポロジーの変化が大きい化学種が存在することが判明し、乱流が温度場のみならず反応の進行に大きな影響を及ぼしていたことが分かった。

## 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

圧縮性乱流の DNS コードの開発が進み、結果の妥当性が確認できた（達成度 100%）。

### (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、天文分野の研究集会で成果を発表できた（達成度 100%）。宇宙物理分野の研究者と共同して、論文を執筆し投稿した。

(C)簡略化学反応メカニズムを用いた 3 次元乱流燃焼 DNS

格子点数  $512^3$  の DNS により高レイノルズ数における自己着火過程の計算に成功した。現在データを解析中である（達成度 90%）。

## 7. 研究成果リスト

### (1) 学術論文

• Turbulence Near Interfaces - Modelling and Simulations , J.C.R. Hunt, T. Ishihara, D. Szubert, I. Asproulas, Y. Hoarau and M. Braza , Advances in Fluid-Structure Interaction 133 号 pp.283-292, 2016

• A new statistical tool to study the geometry of intense vorticity clusters in turbulence, Alberto Vela-Martin, Takashi Ishihara, Journal of Physics: Conference Series 708 号 pp.012004, 2016

• Adaptive wavelet simulation of weakly compressible flow in a channel with a suddenly expanded section, N. Okamoto, M. O. Domingues, K. Yoshimatsu and K. Schneider, ESAIM: PROCEEDINGS AND SURVEYS, 2016, Vol. 53, pp. 38-48

### (2) 国際会議プロシーディングス

• Three types of thin shear layers observed in high Re turbulence , Takashi Ishihara, Koji Morishita, J.C.R. Hunt, Proceedings of IMA Conference on Turbulence, Waves and Mixing, July 6-8, 2016

### (3) 会議発表(口頭, ポスター等)

• Turbulent/non-turbulent interface in magnetohydrodynamic channel flow, Naoya Okamoto, Yusuke Otake, Takashi Ishihara, 24th International Congress of Theoretical and Applied Mechanics, Montréal, Canada, August 21

-26, 2016

• Thin shear layers observed in the DNS of high Reynolds number turbulence , Takashi Ishihara, Koji Morishita, Julian C.R. Hunt, International Symposium on Near-Wall Flows: Transition and Turbulence, June 20-22, 2016

• Three types of thin shear layers observed in high Re turbulence , Takashi Ishihara, Koji Morishita, J.C.R. Hunt, IMA Conference on Turbulence, Waves and Mixing, July 6-8, 2016

• Decay of anisotropic turbulent velocity and scalar fields with/without stratification, K. Yoshimatsu, P. A. Davidson, Y. Kaneda, The 2016 Leverhulme Trust International Network Meeting on Waves and Turbulence, July 18-26, Department of Engineering, Cambridge

• Frequency modulation by turbulence in stratified flow, Y. Kaneda and K. Yoshimatsu, The 2016 Leverhulme Trust International Network Meeting on Waves and Turbulence, July 18-26, Department of Engineering, Cambridge

• Decay of passive scalar fluctuations in axisymmetric turbulence, K. Yoshimatsu, P. A. Davidson, Y. Kaneda, THE 69th ANNUAL MEETING OF THE AMERICAN PHYSICAL SOCIETY- DIVISION OF FLUID DYNAMICS, Portland Oregon, November 20 - 22, 2016

• Vortex Clusters and Their Time Evolution in High- Reynolds-Number Turbulence, Takashi Ishihara, Atsuya Uno, Koji Morishita, Mitsuo Yokokawa, Yukio Kaneda, THE 69th ANNUAL MEETING OF THE AMERICAN PHYSICAL SOCIETY- DIVISION OF FLUID DYNAMICS, Portland Oregon, November 20 - 22, 2016

• Rapid Dust Coagulation expedited by Turbulent Clustering in Protoplanetary Disks, Takashi Ishihara, Formation of the Solar System and the Origin of Life, Lorentz center, 2017 年 2 月

• Direct numerical simulations of incompressible and compressible turbulence,

Takashi Ishihara, Yoshiki Sakurai, JAPAN-RUSSIA WORKSHOP ON INNOVATIVE APPROACHES AND SUPERCOMPUTER TECHNOLOGIES IN COMPUTATIONAL PHYSICS, KIAM, 2017 年 3 月

・ Computational science of dust coagulation process in protoplanetary disk turbulence, Takashi Ishihara, Kobayashi Naoki, Enohata Kei, Shiraishi Kenji, Umemura Masayuki, JpGU-AGU Joint Meeting 2017, 2017 年 5 月

・ 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 年 3 月

・ 原始惑星系円盤乱流中のダストの運動の数値シミュレーション, 石原卓, 宇宙生命計算科学連携拠点 第 2 回ワークショップ, 2016 年 4 月

・ 微惑星形成過程解明のための乱流の大規模直接数値計算と粒子追跡, 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 年秋季年会, 2016 年 9 月

・ 乱流の直接数値計算を用いた原始惑星系円盤ダストの衝突付着成長シミュレーション, 濱端航平, 江野畑圭, 石原卓, 白石賢二, 梅村雅之, 日本天文学会 2016 年秋季年会, 2016 年 9 月

・ 大規模直接数値シミュレーションによる乱流の速度構造関数, 石原卓, 森下浩二, 横川三津夫, 宇野篤也, 金田行雄, 日本流体力学会 年会 2016, 2016 年 9 月

・ 一様等方性乱流中の渦構造の動的統計解析, 服部裕司, 石原卓, 日本流体力学会 年会 2016, 2016 年 9 月

・ 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, 第 3 回「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題成果報告会, 2016 年 10 月

・ 乱流燃焼の 2 次元直接数値計算による等温壁近傍の n-ヘプタン自己着火過程の数値解析, 清水 聖有, 加藤正人, 石原卓, 第 27 回内燃機関シンポジウム, 2016 年 12 月

・ 圧縮性乱流直接数値シミュレーション手法の検

討, 櫻井 幹記, 古谷 眸, 岡本直也, 石原卓, 第 30 回数値流体力学シンポジウム, 2016 年 12 月  
・ 原始惑星系円盤乱流場中のダスト成長過程, 石原卓, ポスト「京」萌芽的課題・計算惑星 第 1 回 公開シンポジウム: 惑星の起源・進化と環境変動の解明を目指して, 2017 年 3 月

(4) その他 (特許, プレス発表, 著書等)

該当なし