

持続的な安全社会の構築に資する先端的マルチスケール環境予測シミュレーション法と周辺技術の開発

課題責任者

松田 景吾 海洋研究開発機構 付加価値情報創生部門 地球情報科学技術センター

著者

松田 景吾^{*1}, Thibault Maurel-Oujia^{*1,*2,*3}

^{*1} 海洋研究開発機構 付加価値情報創生部門 地球情報科学技術センター, ^{*2} Institut de Mathématiques de Marseille, Aix-Marseille University, ^{*3} 日本学術振興会外国人特別研究員

キーワード：雲乱流，慣性粒子クラスタリング，テセレーション，粒子速度発散，直接数値シミュレーション

1. 緒言

地球温暖化に伴って猛暑や豪雨等の極端気象の激甚化が懸念されており，高解像度気象シミュレーションによる気候変動影響評価や適応策評価が重要な社会課題となっている．計算機性能と高解像度シミュレーション技術の発展により，数十メートル解像度での豪雨シミュレーションも可能となってきた [1]．信頼性の高い高解像度シミュレーションを実現するためには，数値モデルにおける要素物理モデルの信頼性を向上させることが重要である．中でも，ミクロスケールの乱流プロセスは海表面から大気への熱・水蒸気の輸送や雲の発達に大きな影響を及ぼす．そのため，本課題では，乱流モデルを使わずにナビエ・ストークス方程式を精密に計算する直接数値計算（DNS, Direct Numerical Simulation）により，多数の雲粒が雨粒へと成長する過程で重要となる雲乱流プロセスの解明に取り組んできた．乱流中では，流体に比べて密度の大きい雲粒のような慣性粒子は，慣性力によって乱流渦からはじき出され，不均一な空間分布を示す．これは慣性粒子クラスタリングと呼ばれる．実際の雲乱流のような高レイノルズ数乱流場におけるクラスタリングの形成機構を明らかにするために，近年，著者らは粒子群の運動を定量的に評価するためのテセレーション解析手法を提案した [2,3]．今年度，この解析手法に基づいて大規模並列処理を行うことのできる解析ツールを開発した．

2. 粒子速度発散のテセレーション解析

空間中に分散する粒子の数密度を $n(\mathbf{x}, t)$ ，粒子速度場を $\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$ とすると，その輸送方程式は次式で表される．

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla n = -n \nabla \cdot \mathbf{v}$$

このとき，左辺は数密度のラグランジアン微分 (Dn/Dt) を表し，右辺がそれに対する生成項となる．したがって，クラスタリング形成を定量評価するためには，右辺の粒子速度の発散 $\nabla \cdot \mathbf{v}$ を定量化する必要がある．ラグランジアン的に計算された粒子のデータでは粒子速度 $\mathbf{v}$ が離散的な粒子位置でしか与えられないため，これまで，その微分量の算出が困難であった．そこで，粒子速度の発散を定量評価するためにテセレーション解析を導入する．

テセレーションとは空間を図形で敷き詰めることを意味する．空間中に多数の点が配置されている場合には，それらのうち互いに隣接する点を線分で繋いだドロネー図や，最近傍の点ごとに空間を区切ったボロノイ図を構成することができる．ボロノイ図の境界線によって区切られる各セルは所与の点群のうちの一点と対応しているため，その体積（ボロノイ体積）も一点と対応した体積とみなすことができる．したがって，DNS 等によって得られる空間中の粒子分布に基づいて各粒子に対応するボロノイ体積 V_p を求めることで，各粒子近傍の数密度を $n_p = 1/V_p$ として近似的に与えることができる．この関係を用いると，粒子速度の発散を次式により近似的に与えることができる．

$$\nabla \cdot \mathbf{v} \approx \frac{1}{V_p} \frac{DV_p}{Dt}$$

つまり，ある粒子に対応するボロノイ体積の時間変化率を求めることで，粒子速度の発散を近似計算することができる．著者らは，文献 [2]において，時刻 t と $t + \Delta t$ でのボロノイ体積を計算し，その差分値から粒子速度発散 $D(\mathbf{x}_p) \approx \nabla \cdot \mathbf{v}$ を算出する解析手法を提案した．また，文献 [3]では，ボロノイ解析の特性上生じる誤差を低減することのできる修正ボロノイ解析を提案した．図1に，一例

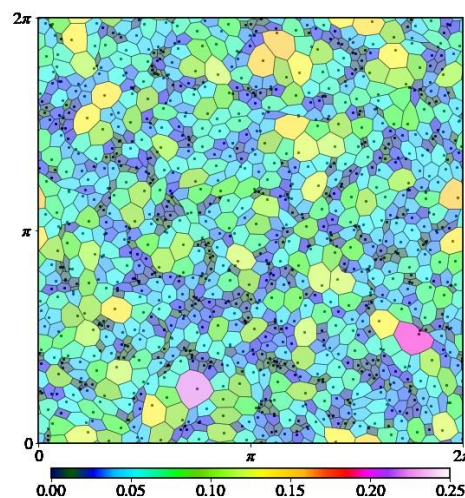


図1 2次元平面上にランダム配置した点に基づく修正ボロノイ図．色はボロノイ体積（セルの面積）を表す．

として、2次元平面上にランダムに分散する点群に対する修正ボロノイ図を示す。粒子が比較的密集しているところでは修正ボロノイセルの体積が小さい一方、粒子が比較的疎なところではセルの体積大きいことがわかる。また、文献 [3]では、さらに、粒子速度発散 $D(\mathbf{x}_p)$ を応用することで、粒子速度の回転 $\nabla \times \mathbf{v}$ や速度勾配テンソルの各成分 $\partial v_i / \partial x_j$ も算出可能であることを示した。

3. 並列テセレーション解析ツールの開発

テセレーション解析ツールの初期バージョンは Python で記述され、テセレーション解析には QHull ライブラリ [4]を利用する。一方、今回開発した並列解析ツールでは、計算速度の向上と並列計算の実装のため、C++により記述し直し、テセレーション解析には CGAL (Computational Geometry Algorithms Library) [5]を用いた。単一ノードのメモリサイズを超える大規模データを扱えるようにしながら、粒子データを細かく分割して分散メモリ上に配置することによる、隣接粒子判定のエラーを抑えるため、並列

化には OpenMPI による分散並列処理と OpenMP によるスレッド並列処理を併用した。作成した C++コードの性能を Python コードと比較したところ、非並列計算で 3.6 倍の高速化が得られた。図 2 に C++コードによる修正ボロノイ体積計算での並列処理性能を示す。計測結果から、粒子数の大きい大規模データでは並列数に対して良好なスケールアップとなることが確認できる。

4. 雲乱流 DNS データへの適用

作成した C++コードを用いて、3次元雲乱流 DNS [6]によって得られた粒子数 $N = 1.07 \times 10^9$ の粒子分布データの解析を行った。DNS の詳細は文献 [6]を参照されたい。図 3 に粒子数 $N = 1.07 \times 10^9$ の粒子分布データから得られた粒子速度発散 $D(\mathbf{x}_p)$ の2次元スライス領域内の解析結果を一例として示す。テイラーマイクロスケール・レイノルズ数は $Re_\lambda = 204$ 、ストークス数は $St = 1.0$ である。なお、粒子速度発散は負値がクラスタ形成を示す。図より、粒子によって粒子速度発散の大きが異なり、クラスタ形成の活発度が異なる様子を観察することができる。

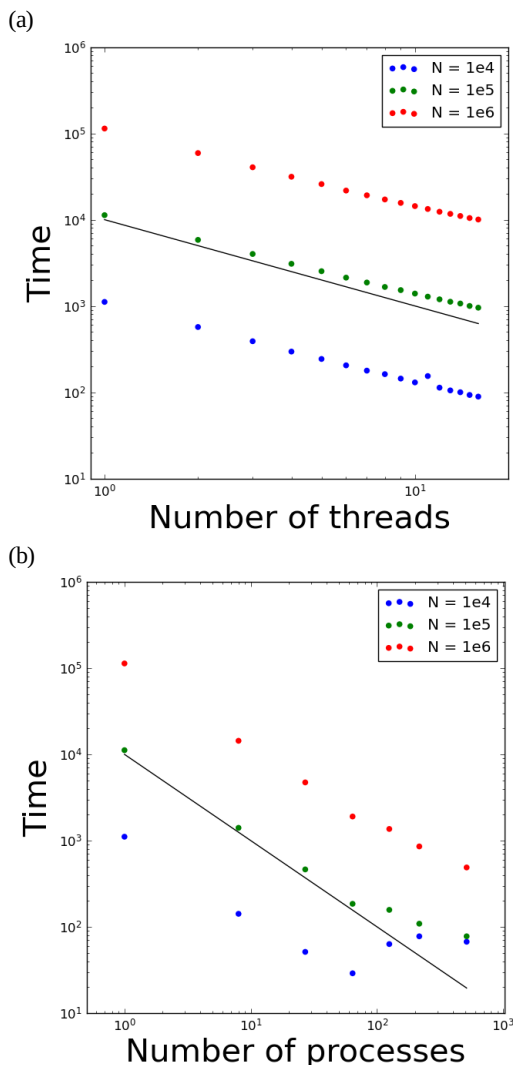


図 2 修正ボロノイ体積計算における (a) スレッド並列および (b) MPI 並列に対する strong scaling. 粒子数 $N = 10^4$, 10^5 , および 10^6 のケースで計測した。

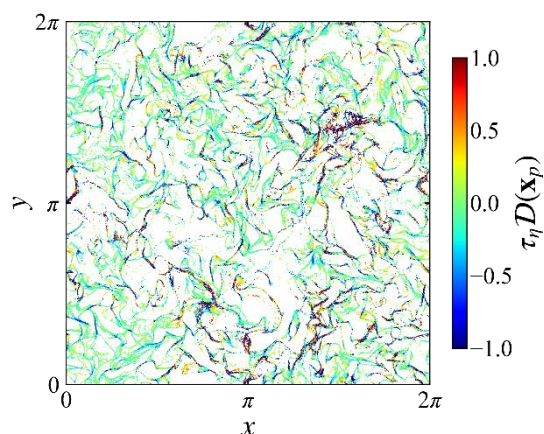


図 3 3次元乱流中の慣性粒子の粒子速度発散 $D(\mathbf{x}_p)$. 2次元スライス領域内の粒子について、粒子ごとの発散をコルモゴロフ時間 τ_η により規格化し、カラーで表示した。粒子は慣性力の作用によって不均一に分布している。

5. 結言

本課題では、ミクロスケールの雲乱流プロセスにおける雲粒の慣性粒子クラスタリング形成挙動を定量評価が可能な、大規模並列テセレーション解析ツールを開発し、その性能評価を行った。開発した大規模並列テセレーション解析ツールでは、分散並列とスレッド並列のハイブリッド並列を採用しており、その両方において良好な並列性能を示すことを確認した。開発したツールを雲乱流の DNS データに適用し、約 10 億個の粒子の収束発散挙動を評価できることを確認した。今後、この解析ツールを活用して高レイノルズ数乱流中のクラスタリング形成機構を明らかにする予定である。また、本解析ツールは、様々なラグランジアン粒子運動の解析に適用できるため、粒状体の変形解析等への幅広い応用も期待される。

謝辞

本研究の実施にあたって, Thibaut Maurel-Oujia は日本学術振興会外国人研究者招へい事業(外国人特別研究員(欧米短期))の支援を受けた。

文献

- [1] 松田景吾, 杉山徹, 後藤浩二, 松本圭太, 竹内太, “持続的な安全社会の構築に資する先端的マルチスケール環境予測シミュレーション法と周辺技術の開発”, 地球シミュレータ令和4年度アニュアルレポート(年報)2022, (2023).
- [2] T. Oujia, K. Matsuda and K. Schneider, “Divergence and convergence of inertial particles in high-Reynolds-number turbulence”, J. Fluid Mech., A14 (2020).
- [3] T. Maurel-Oujia, K. Matsuda, K. Schneider, “Computing differential operators of the particle velocity in moving particle clouds using tessellations”, J. Comput. Phys., 498, 112658 (2024).
- [4] C. B. Barber, D. P. Dobkin and H. T. Huhdanpaa, "The Quickhull algorithm for convex hulls," ACM Trans. on Mathematical Software, 22(4):469-483, Dec 1996, <http://www.qhull.org>
- [5] CGAL, Computational Geometry Algorithms Library, <https://www.cgal.org>
- [6] K. Matsuda, K. Schneider and K. Yoshimatsu, “Scale-dependent statistics of inertial particle distribution in high Reynolds number turbulence”, Phys. Rev. Fluids, 6, 064304 (2021).