

# 超多自由度複雑流動現象解明のための 高効率な並列計算コード開発と検証

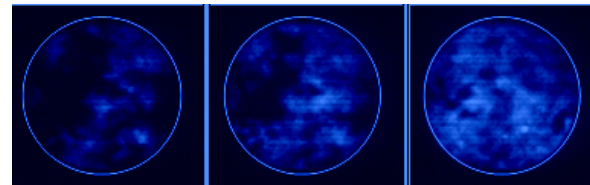
石原 卓

名古屋大学大学院工学研究科附属  
計算科学連携教育研究センター

平成24年5月9日(水)  
名古屋大学HPC計算科学連携研究プロジェクト成果報告シンポジウム  
名古屋大学 IB 電子情報館大講義室(東棟2F)

# 様々な複雑流動現象

- 雲、燃焼、、、
  - 物理・化学的複雑さ
  - 空間的／時間的な多スケール
  - 巨大自由度による複雑さ

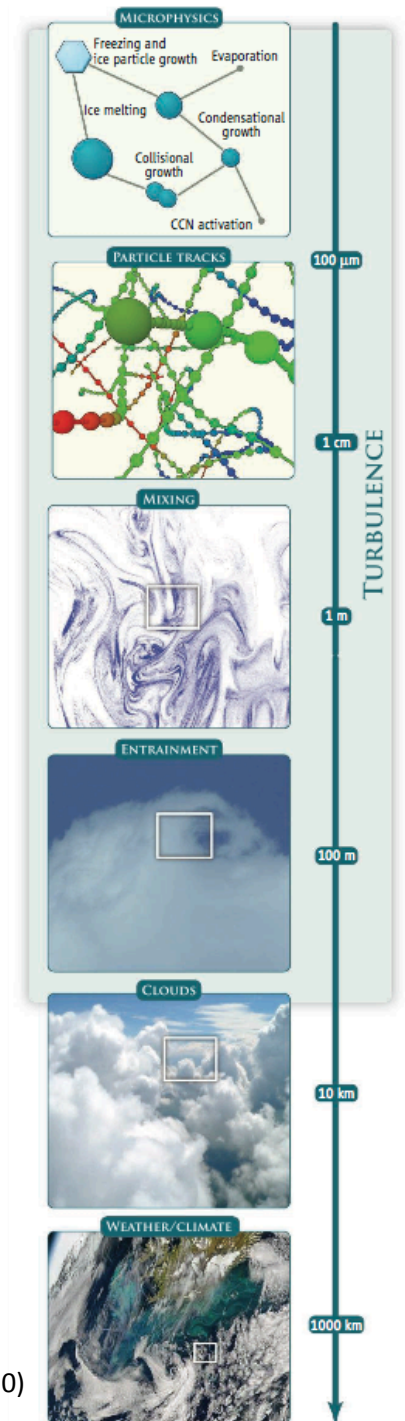


<http://www.nissan-global.com/JP/TECHNOLOGY/INTRODUCTION/DETAILS/3D-SIM/>

乱流の果たす役割(?)

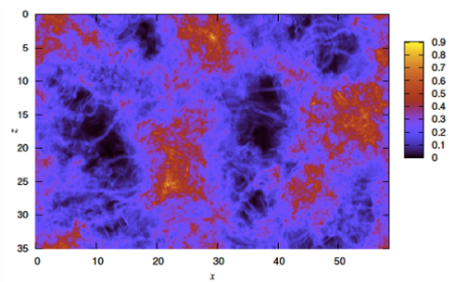
高レイノルズ数ほど

スケール比大、間欠性が増加

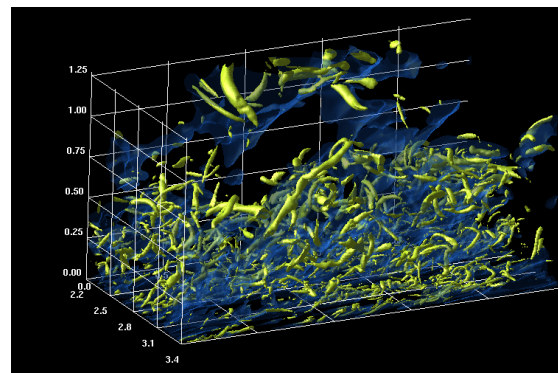


# 乱流の計算科学

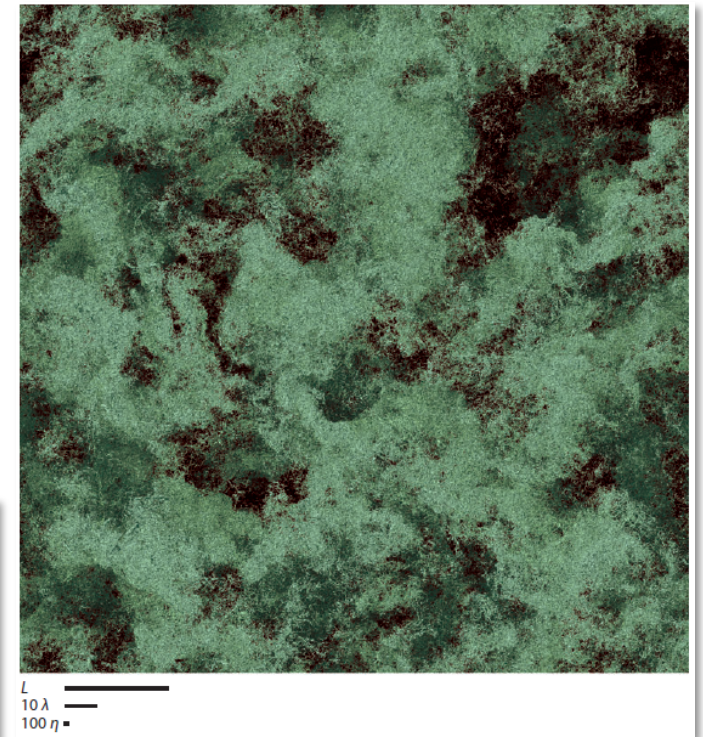
- カノニカルな乱流場の大規模直接数値計算
  - 一様等方性乱流( $4096^3$ )
    - Lagrange的統計( $1024^3$ )
  - 一様非等方性乱流
    - 回転乱流、成層乱流、剪断乱流、MHD
  - 平行平板間乱流( $2048 \times 1536 \times 2048$ )
  - 乱流境界層( $4608 \times 512 \times 768$ )
  - 乱流混合層( $576 \times 384 \times 384$ )
  - 乱流燃焼( $256^3$ )



杉木(2009)



加藤(2010)



Annual Rev. Fluid Mech. (2010)

# 本プロジェクト

- 本研究では、流れ、計算科学を専門とする研究者の学際的な共同研究により、高効率な並列計算手法を追求
- 乱流のカノニカルな問題の高効率な大規模直接数値計算における手法を発展させ、燃焼、雲物理、熱対流などの大規模計算を実現するため
  - 1. 詳細化学反応および簡略化学反応メカニズムを用いた二次元および三次元乱流燃焼用コード
  - 2. 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
  - 3. 熱対流乱流の直接数値計算コードの開発および計算結果の検証を行った。

# メンバー

- 代表: 石原 卓 (工学研究科附属計算科学連携教育研究センター)
- 副代表: 芳松克則 (工学研究科計算理工学専攻)
- 共同研究者
  - 金田行雄 (工学研究科計算理工学専攻)
  - 岡本直也 (工学研究科附属計算科学連携教育研究センター)
  - 石井克哉 (情報基盤センター)
  - 梅田隆行 (太陽地球環境研究所)
- 研究協力者
  - 寺地 敦 (日産自動車)
  - 生田博也、伊藤貴政、藤山崇紘、星野邦雄

# 1. 詳細および簡略化学反応メカニズムを用いた 二次元および三次元乱流燃焼用コード開発

- 目的: 乱流燃焼の大規模DNSを実現し、燃焼における乱流の役割を理解する
  - 従来の点火方式に比べ、高熱効率、クリーンな排気が期待できるHCCIエンジンの実用化には、自己着火過程の理解が重要
- 平成23年度
  - Nへプタンの簡略化学反応メカニズムを用いた乱流燃焼の直接数値シミュレーションを実施
    - 自己着火過程の3次元直接数値シミュレーション(生田)
    - 自己着火過程における進行反応帯と渦の相互作用の2次元直接数値シミュレーション(伊藤)

# Nヘプタン自己着火過程の直接数値シミュレーション

## 支配方程式

質量保存式

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0$$

運動量保存式

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = \mathbf{P} \cdot (\nabla \mathbf{u})$$

エネルギー保存式

$$\frac{\partial \rho T}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} T) = -\frac{1}{C_v} \nabla \cdot \mathbf{q} - \frac{1}{C_v} \mathbf{P} : (\nabla \mathbf{u}) + \frac{1}{C_v} \sum_n^{33} (h_n - R_n T) \nabla \cdot (\rho D_n \nabla Y_n) - \frac{1}{C_v} \sum_n^{33} (h_n - R_n T) \omega_n$$

化学種保存式

$$\frac{\partial \rho Y_n}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} Y_n) = \nabla \cdot (\rho D_n \nabla Y_n) + \omega_n \quad n = 1, 2, \dots, 32$$

$$\mathbf{q} = -\lambda \nabla T - \sum_n^{33} \nabla \cdot (\rho D_n h_n \nabla Y_n)$$

$$\omega_m = W_m \sum_{k=1}^{38} \left\{ (v_{m,k}^{**} - v_{m,k}^*) \alpha_k \prod_{l=1}^{33} \left( \frac{\rho Y_l}{W_l} \right)^{v_{l,k}} \right\}$$

$$\mathbf{P} = \left[ p + \frac{2}{3} \mu (\nabla \cdot \mathbf{u}) \right] \mathbf{E} - \mu [(\nabla \mathbf{u}) + (\nabla \mathbf{u})^T] \quad p = \rho R T \sum_n^{33} \left( \frac{Y_n}{W_n} \right) \quad \sum_n^{33} Y_n = 1$$

$\rho$  : 密度

$\mathbf{u}$  : 速度

$T$  : 温度

$Y$  : 質量分率

$p$  : 圧力

$h$  : エンタルピ

$W$  : 物質質量

$\gamma$  : 比熱比

$\mu$  : 粘性係数

$D$  : 物質拡散係数

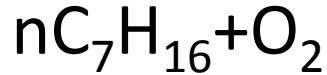
$\lambda$  : 熱伝導係数

$R$  : 気体定数

$C_v$  : 定積比熱



# 簡略化化学反応モデル (Tsurushima, 2009)



## 詳細化学反応メカニズム

化学種数 : 556種, 素反応数 : 2540個



## Tsurushima メカニズム (2009)

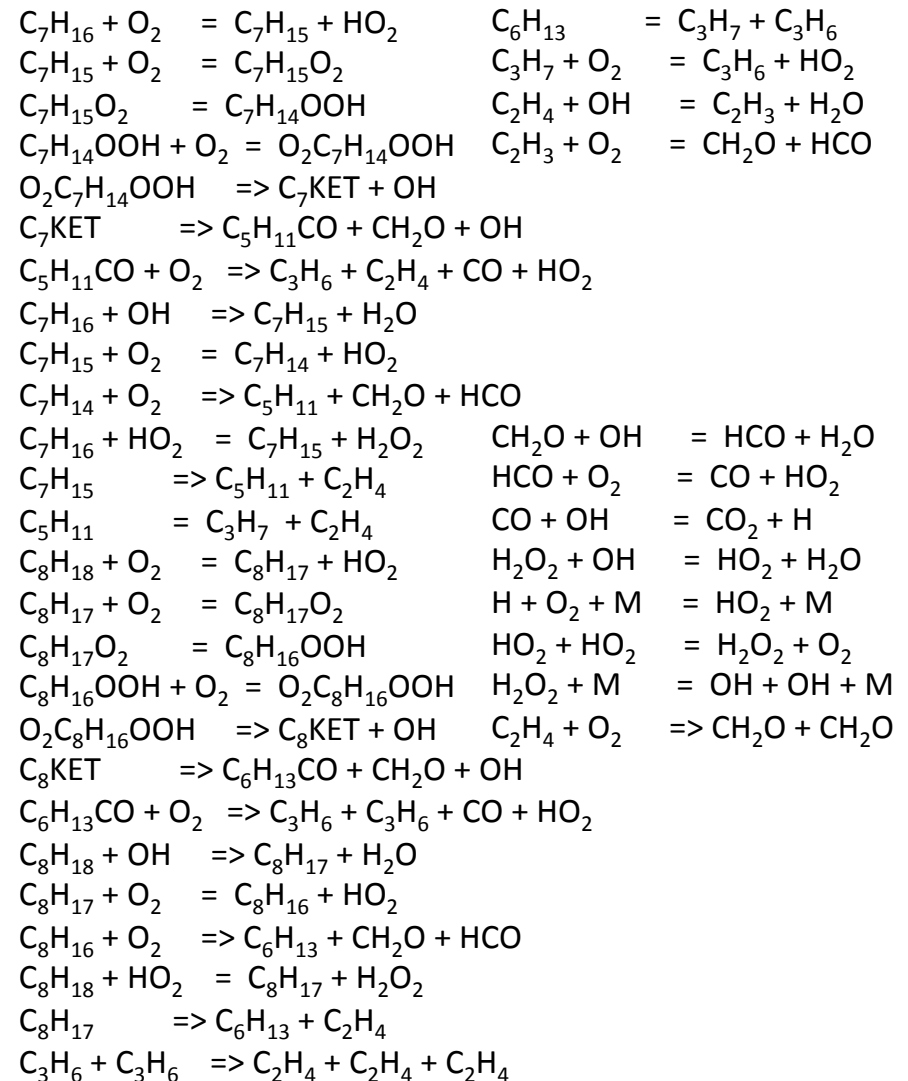
化学種33種, 素反応数38式

着火前の低温酸化反応および  
着火遅れを定量的によく再現するモデル

### 化学種33種

$C_7H_{16}$   $C_7H_{15}$   $C_7H_{14}$   $C_7H_{15}O_2$   $C_7H_{14}OOH$   
 $O_2C_7H_{14}OOH$   $C_7KET$   $C_5H_{11}CO$   $C_5H_{11}$   
 $C_8H_{18}$   $C_8H_{17}$   $C_8H_{16}$   $C_8H_{17}O_2$   $C_8H_{16}OOH$   
 $O_2C_8H_{16}OOH$   $C_8KET$   $C_6H_{13}CO$   $C_6H_{13}$   
 $C_3H_7$   $C_3H_6$   $C_2H_4$   $C_2H_3$   $CH_2O$   $HCO$   $CO$   
 $CO_2$   $H_2O_2$   $HO_2$   $H$   $OH$   $H_2O$   $O_2$   $N_2$

### 素反応38式





# 3次元直接数値シミュレーション

## 計算条件

計算領域（周期境界条件）

$4 \times 4 \times 4$  [mm<sup>3</sup>]

格子点数：256<sup>3</sup>

初期条件

平均温度：781 [K]

温度の標準偏差：9.4 [K]

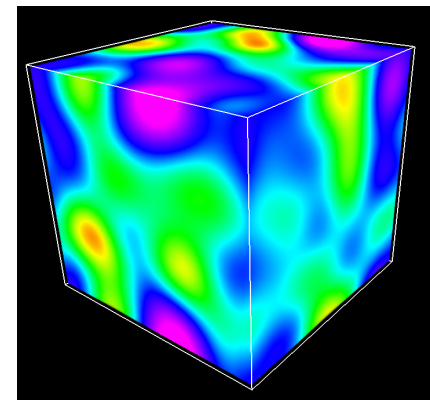
当量比：0.5

初期圧力：40 [atm]

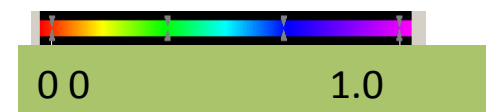
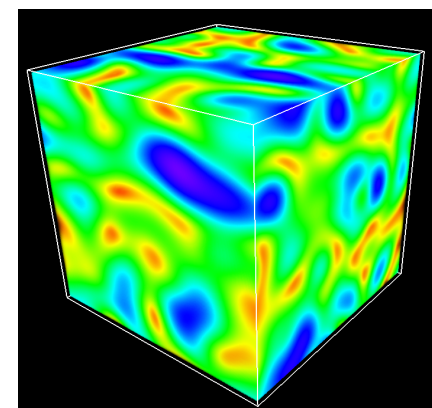
初期速度場は非圧縮ランダム場

RUN		初期条件
0D		流れなし, 温度一様
3D	run0	温度揺らぎのみ
	runW	$u_{rms}=1.0$ [m/sec]
	runM	$u_{rms}=2.0$ [m/sec]
	runS	$u_{rms}=4.0$ [m/sec]

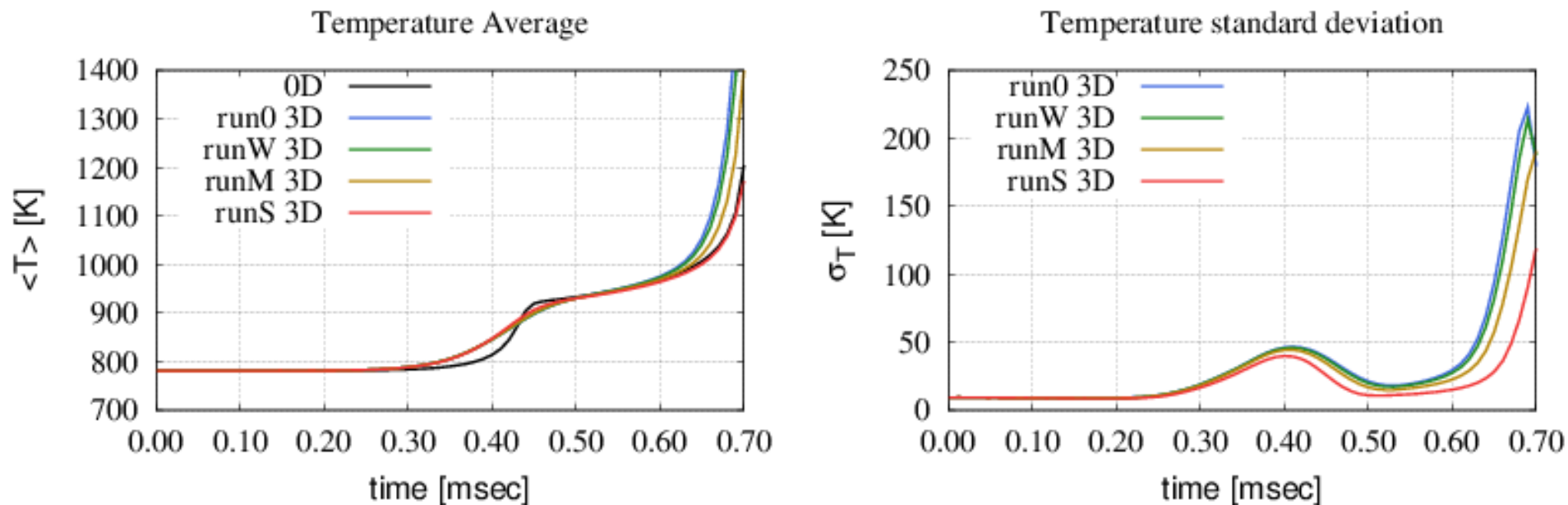
初期温度場 (3D)



初期渦度場 (3D)

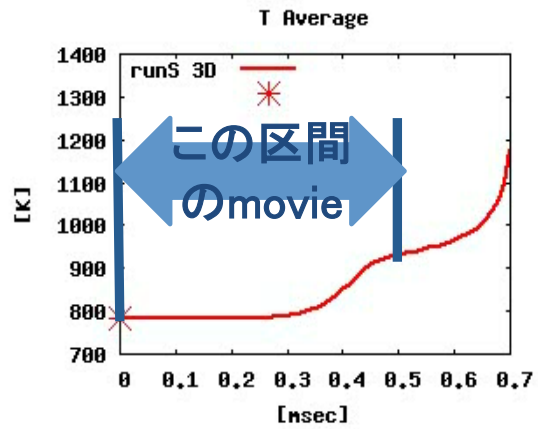


# 平均温度&標準偏差の時間変化

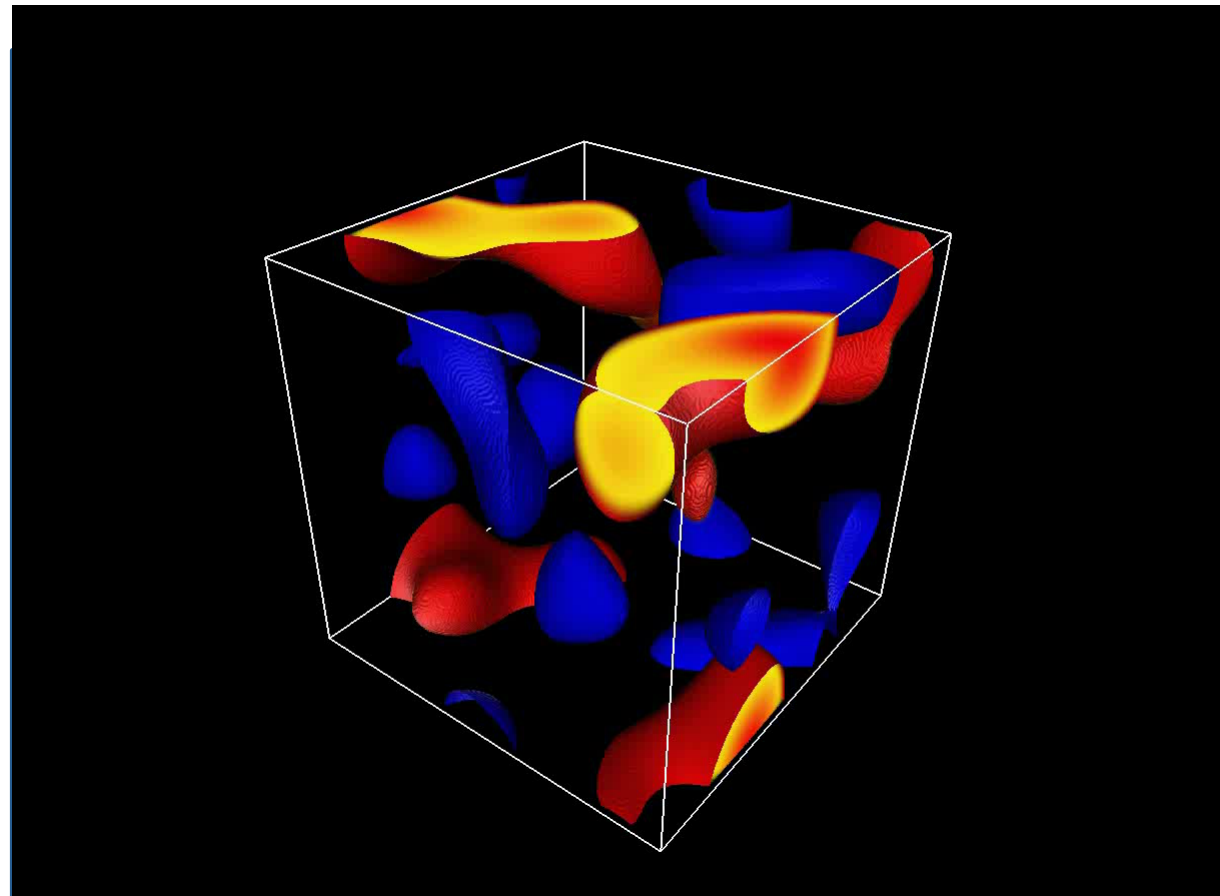


	run0	runW	runM	runS
3D	温度揺らぎのみ	$u_{rms}=1.0$	$u_{rms}=2.0$	$u_{rms}=4.0$
0D	流れなし, 温度一様			

# 流れが強い時 (runS) の反応伝播



反応帯は  
高温部から低温部  
へと伝播する。

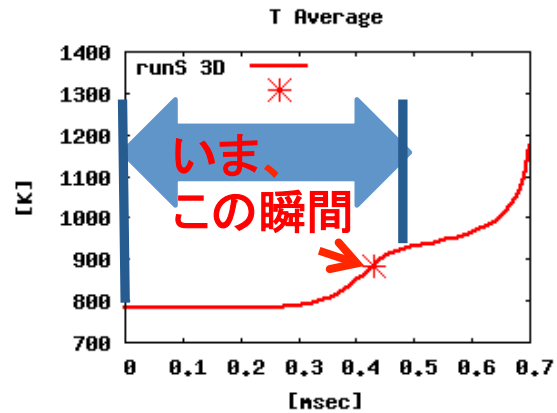


$$\langle HR \rangle + 1.5\delta_{HR}$$

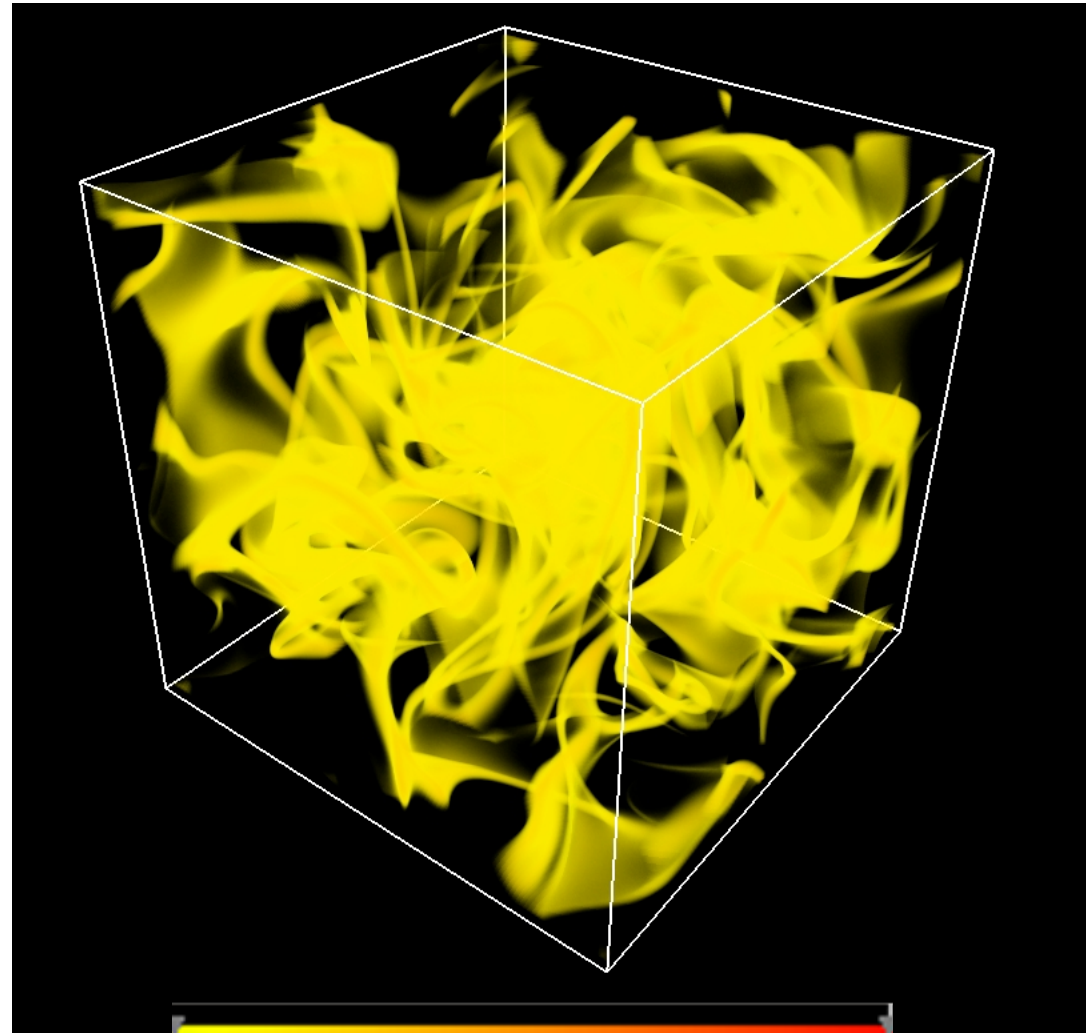
$$\langle HR \rangle + 7.0_{HR}$$

赤  $\langle T \rangle + 1.5\sigma_T$ , 青  $\langle T \rangle - 1.5\sigma_T$

# 流れが強い時 (runS) の反応伝播



高温部から低温部へ  
と伝播する反応帯は、  
膜状 + 紐状構造



$$\langle HR \rangle + 1.5\delta_{HR}$$

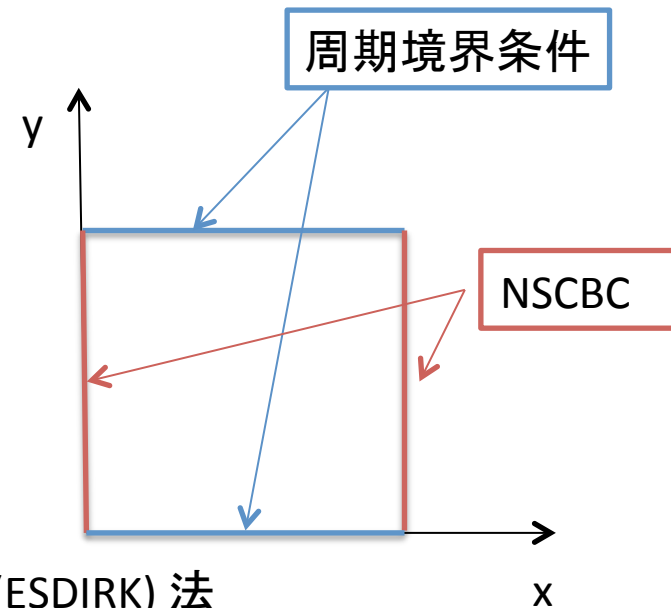
$$\langle HR \rangle + 7.0\delta_{HR}$$

# 自己着火過程の2次元直接数値シミュレーション

進行反応帯と渦の相互作用

## 計算手法

- 境界条件
  - x方向:Navier-Stokes Characteristic Boundary Condition (NSCBC)  
境界上で数値的な反射波を発生させないための境界条件
  - y方向:周期境界条件
- 空間微分
  - x方向:6次精度コンパクト差分
  - y方向:8次精度中心差分
- ローパスフィルター
  - x方向:8次精度非周期フィルター
  - y方向:8次精度周期フィルター
- 時間積分
  - Explicit Singly Diagonal Implicit Runge-Kutta (ESDIRK) 法  
3次精度陽的Runge-Kutta法に部分的に陰解法を組み合わせたもの



# 問題設定

- 計算条件 (森川ら、2011)

初期平均温度	800K
初期圧力	40atm
当量比	0.5
計算領域	4mm×4mm

- 渦度 (Poinsot and Lele , 1992)

計算領域の中心にピークを持つように設定  
流れ関数

$$\Psi = C \exp\left[-\frac{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2}{2R_c^2}\right]$$

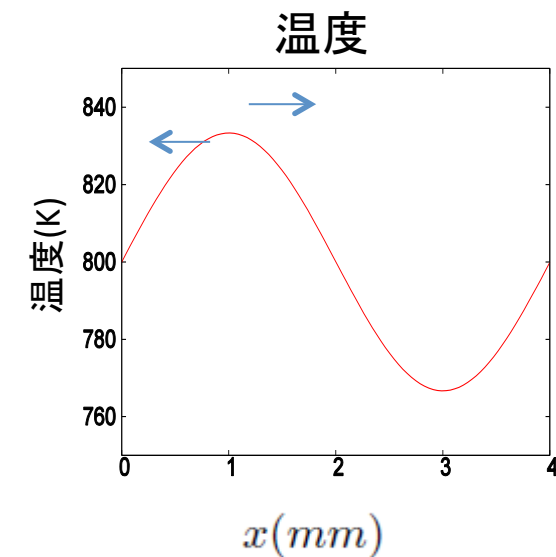
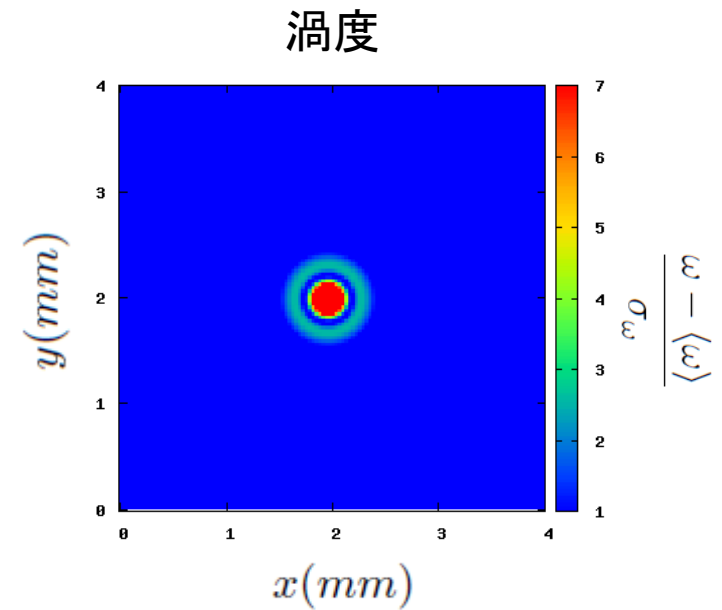
$C$  : 渦強度       $R_c$  : 渦半径

$(x_0, y_0)$  : 渦の初期位置

渦が誘導する最大速度 :  $\frac{1}{\sqrt{e}} \frac{C}{R_c}$

- 格子点数

129×128



# 進行反応帯の時間変化

エネルギー保存式

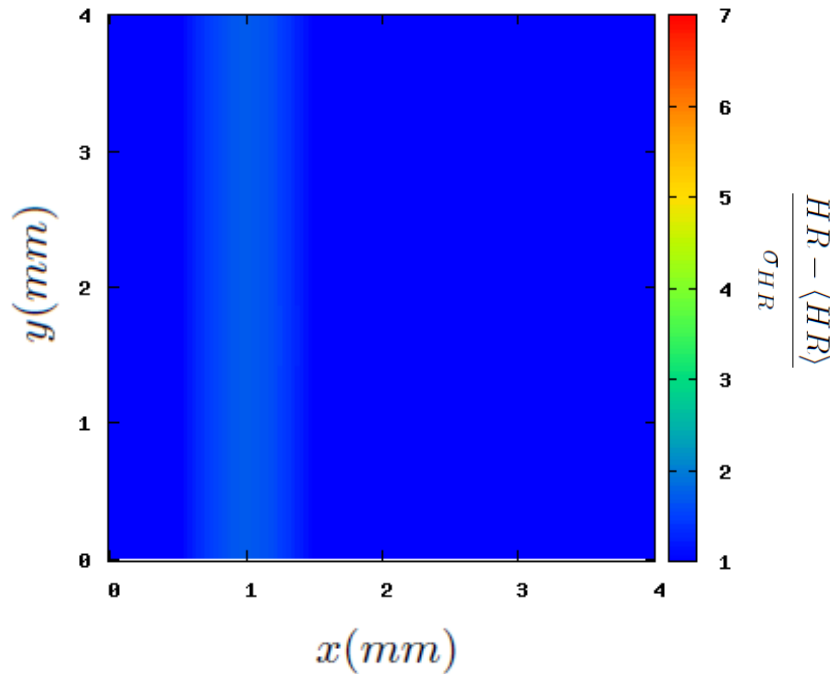
$$\frac{\partial \rho T}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u T) = -\frac{1}{C_v} \nabla \cdot q - \frac{1}{C_v} P : \nabla u + \frac{1}{C_v} \sum_n^{33} (h_n - R_n T) \nabla \cdot (\rho D_n \nabla Y_n) - \frac{1}{C_v} \sum_n^{33} (h_n - R_n T) w_n$$

反応が寄与する項

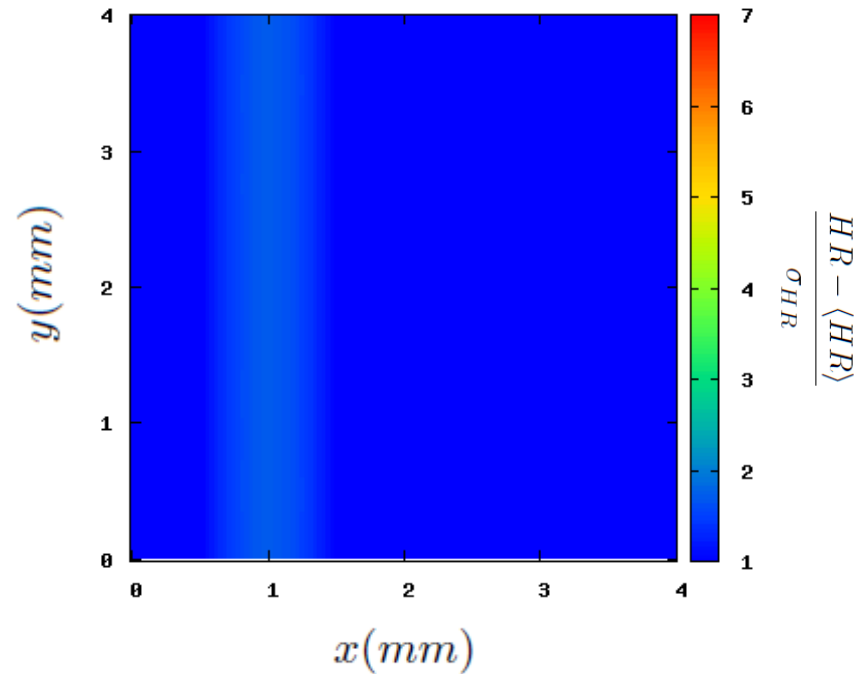


熱発生率 :  $HR = -\frac{1}{C_v} \sum_n^{33} (h_n - R_n T) w_n$

弱い渦



強い渦





## 2. 雲物理やプラズマへの応用を考慮した 乱流中の高効率粒子追跡コード開発

- 目的: 高レイノルズ数乱流中の物質(各種粒子、スカラー)の運動を理解する. そのための高効率な手法を開発する
  - 平成22年度
    - 一様等方性乱流中の流体粒子および慣性粒子の追跡
  - 平成23年度
    - 乱流混合層中の流体粒子および慣性粒子の追跡

# ◆計算手法:流れ場 (杉木ら(2009))

●支配方程式

$$\begin{cases} \frac{\partial \omega}{\partial t} = \nabla \times (\mathbf{U} \times \omega) + \frac{1}{Re} \nabla^2 \omega & \text{(渦度方程式)} \\ \nabla \cdot \omega = 0 & \text{(ソレノイダル条件)} \end{cases}$$

$\omega$  : 渦度場  
 $\mathbf{U}$  : 速度場  
 $Re$  : レイノルズ数  
 $\Delta U$  : 主流速度差  
 $\delta_\omega$  : 初期渦度厚さ

## ●境界条件

$\left\{ \begin{array}{l} xz \text{ (水平) 方向: 周期境界条件} \\ y \text{ (垂直) 方向: } \lim_{y \rightarrow \pm\infty} \mathbf{U}(x, y, z, t) = \left( \pm \frac{\Delta U}{2}, 0, 0 \right), \quad \lim_{y \rightarrow \pm\infty} \omega(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}) = \mathbf{0} \end{array} \right.$

## ●空間微分

$\left\{ \begin{array}{l} xz \text{ (水平) 方向: フーリエ・スペクトル法} \\ y \text{ (垂直) 方向: ヤコビ・スペクトル法} \end{array} \right.$

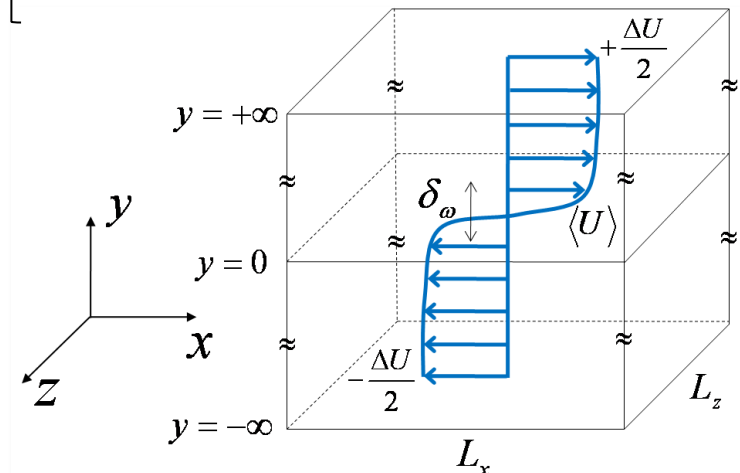
$\left[ \begin{array}{l} \eta = \tanh\left(\frac{y}{y_0}\right) \quad y_0: \text{パラメータ} \\ y = (-\infty, \infty) \rightarrow \eta = [-1, +1] \end{array} \right.$

## ●時間積分

省メモリ型陽的三次精度ルンゲ・クッタ法(Wray)

## ●格子点数

$$N_x \times N_y \times N_z = 128 \times 256 \times 64$$



# ◆ 粒子の運動

## ● 運動方程式

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d\mathbf{X}}{dt} = \mathbf{V} \\ M \frac{d\mathbf{V}}{dt} = \mathbf{F} \end{array} \right. \left( \begin{array}{lll} \mathbf{X} : \text{粒子の位置} & a : \text{粒子の半径} & \mu : \text{粘性係数} \\ \mathbf{V} : \text{粒子の速度} & \rho_p : \text{粒子の密度} & U : \text{代表速度} \\ M : \text{粒子の質量} & \rho_f : \text{流体の密度} & L : \text{代表長さ} \\ \mathbf{F} : \text{粒子に働く力} & \mathbf{u} : \text{流速} & \\ \mathbf{V}_t : \text{浮力、重力の効果} & \mathbf{e}_z : z \text{方向の単位ベクトル} & \end{array} \right)$$

$$\ast \mathbf{F} = \mu a (\mathbf{u} - \mathbf{V}) + (\rho_p - \rho_f) a^3 g$$

 無次元化

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d\mathbf{X}}{dt} = \mathbf{V} \\ \frac{d\mathbf{V}}{dt} = \frac{1}{St} (\mathbf{V}_t + \mathbf{u} - \mathbf{V}) \end{array} \right.$$

$$V_t = \frac{(\rho_p - \rho_f) a^2}{\mu L} g \mathbf{e}_z$$

※今回、重力加速度の影響は無視

$$g = 0 \text{より } \mathbf{V}_t = \mathbf{0}$$

$$\text{ストークス数: } St = \frac{(\rho_p - \rho_f) a^2 U}{\mu L}$$

粒子の流体に対する追従性を表すパラメータ

# ◆粒子の運動

●運動方程式  $St \neq 0$  のとき

$$\begin{cases} \frac{d\mathbf{X}}{dt} = \mathbf{V} \\ \frac{d\mathbf{V}}{dt} = \frac{1}{St}(\mathbf{u} - \mathbf{V}) \end{cases}$$

粒子は流れ場にすぐには追従しない

$St = 0$  のとき

$$\begin{aligned} \mathbf{u} - \mathbf{V} &= 0 \\ \Downarrow \\ \frac{d\mathbf{V}}{dt} &= \mathbf{u} \end{aligned} \quad \left( \begin{array}{l} \mathbf{X} : \text{粒子の位置} \\ \mathbf{V} : \text{粒子の速度} \\ \mathbf{u} : \text{流速} \end{array} \right)$$

粒子は流れ場に追従する

$St \neq 0$  のとき、慣性が働く  
 $St = 0$  のとき、慣性が働かない

# ◆計算手法:粒子

●初期速度

$St \neq 0$  : 0

$St = 0$  : 流れ場に等しい

●時間積分 : ホイン法

●流れ場の補間方法 : 線形補間

●ストークス数 :  $St = 0, 0.5, 1, 2$

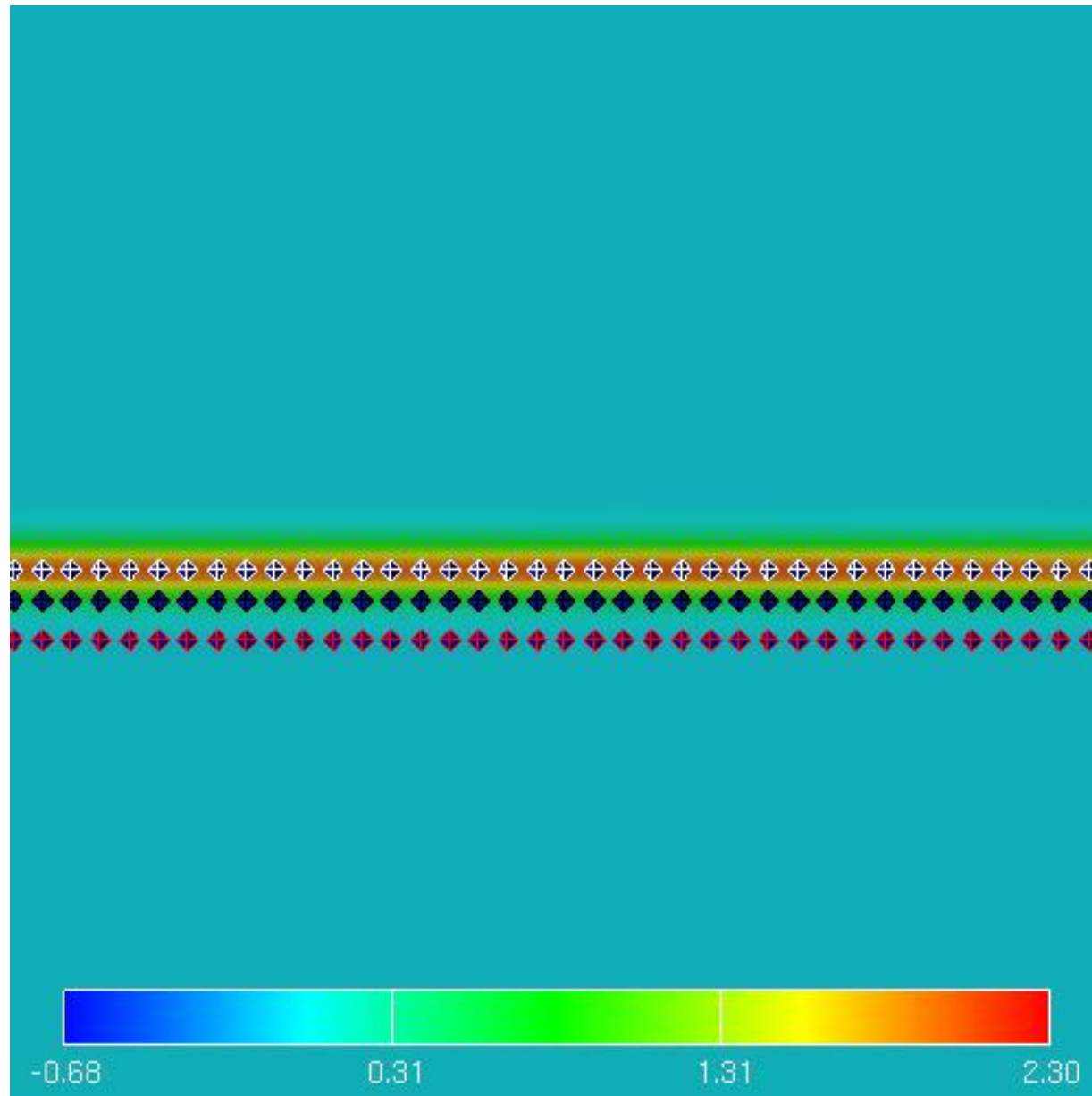
# 初期位置: $t=0$ の粒子

白: 渦中  
黒: 渦端  
赤: 渦外

渦中

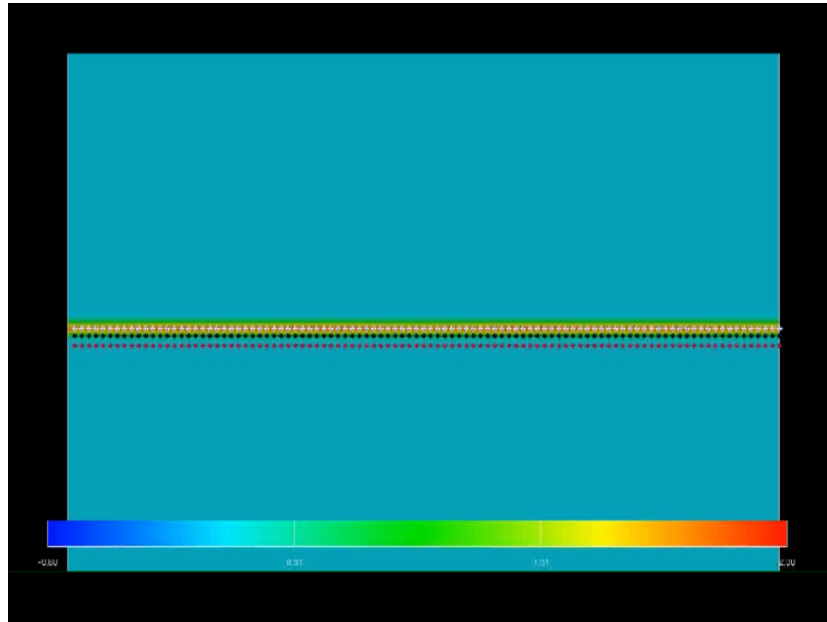
渦端

渦外

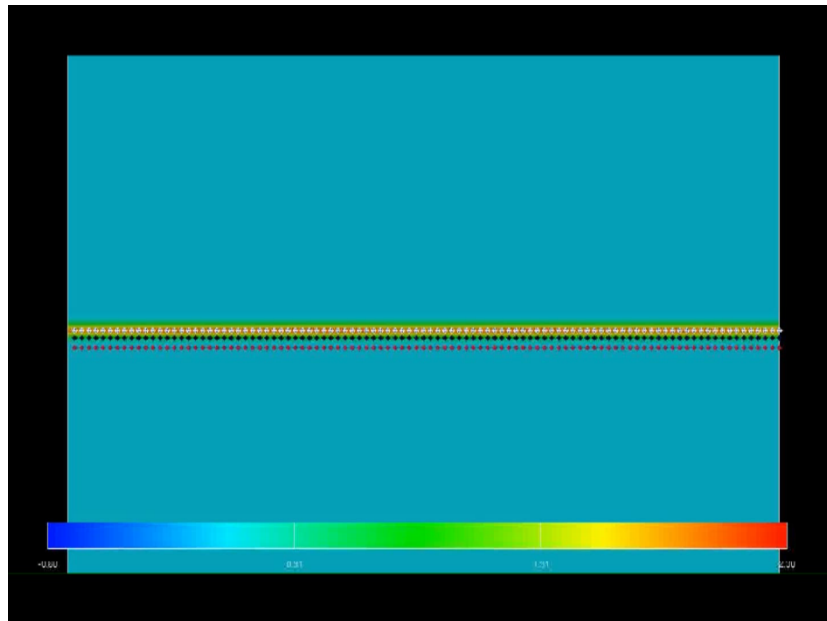


◆ 結果

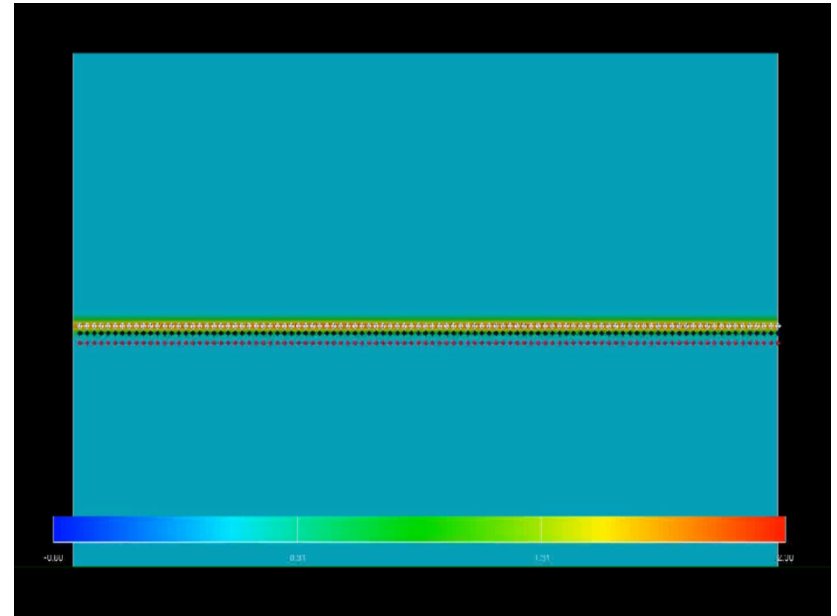
St = 0



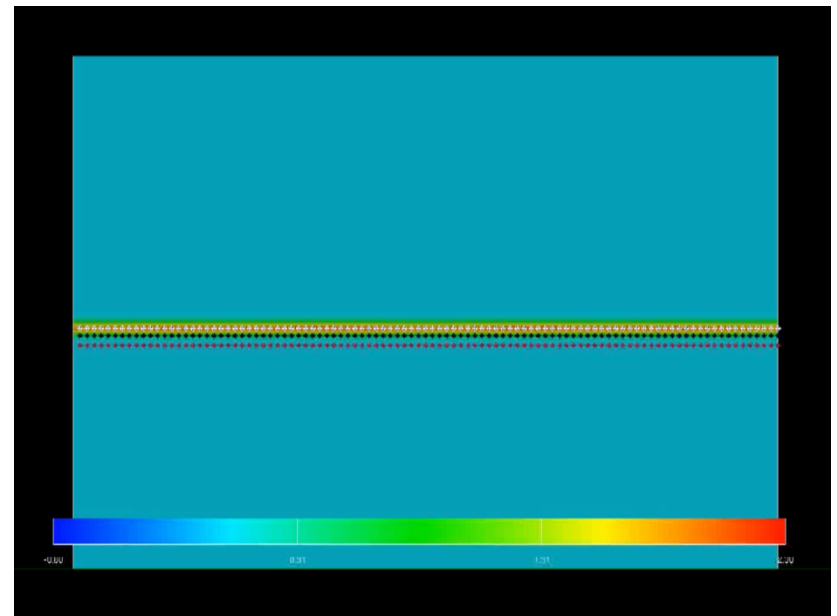
St = 1.0



St = 0.50



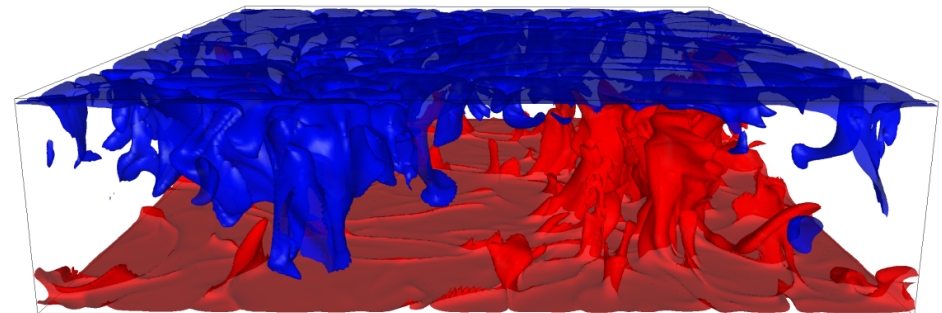
St = 2.0



白:渦中  
黒:渦端  
赤:渦外

### 3. 熱対流乱流の直接数値計算コード開発

- 目的: 高レイリー数熱対流によって駆動される乱流中の特徴的な流れ構造を理解する
  - 平成22年度  
平行平板間乱流DNSコードを基にしたコード開発
  - 平成23年度  
DNSの実行、データ解析





# 熱対流乱流の支配方程式

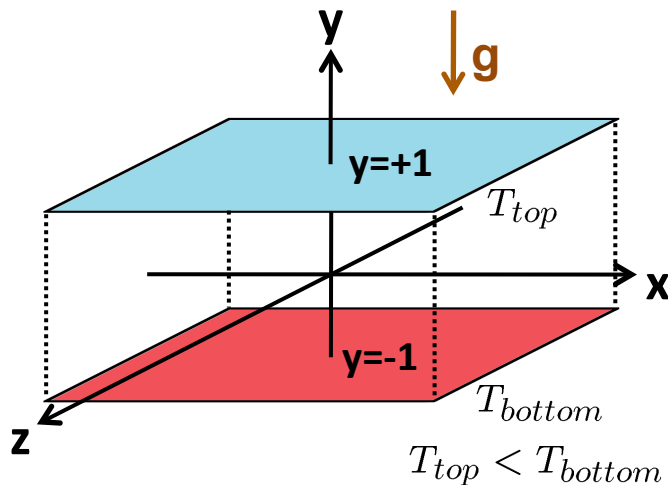
ブシネスク近似を用いた  
3次元非圧縮ナビエ・ストークス方程式

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\nabla p + \text{Pr} \nabla^2 \mathbf{u} + \text{RaPr} \theta \mathbf{e}_y$$
$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \theta = \nabla^2 \theta + v$$

温度場は、線形分布と温度変動場に分解した。

$$T = -y + \theta$$



$$\mathbf{u} = (u, v, w)$$

$$\mathbf{e}_y = (0, 1, 0)$$

$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$  : 速度場

$p(\mathbf{x}, t)$  : 圧力場

$T(\mathbf{x}, t)$  : 温度場

$\theta(\mathbf{x}, t)$  : 温度変動場

$$\text{Ra} = \frac{\alpha g \beta d^4}{\nu \kappa} : \text{レイリー数}$$

$$\text{Pr} = \frac{\nu}{\kappa} : \text{プラントル数}$$

$\nu$  : 動粘性係数

$\alpha$  : 体膨張係数

$g$  : 重力加速度

$\beta$  : 温度勾配係数

$\kappa$  : 熱拡散係数

$d$  : 高さ

# 計算手法・計算条件

- 離散化

- 空間

- x-z平面 : フーリエスペクトル法
    - y 方向 : チェビシェフ・タウ法

- 時間

- 非線形項 : 3段2次のルンゲ・クッタ法
    - 散逸項 : 陰的オイラー法

- パラメータ

$$Ra = 10^7, Pr = 0.7$$

$$N_x \times N_y \times N_z = 256 \times 128 \times 256$$

$$L_x = L_z = 4d$$

# プロジェクトにおける成果

## ■ プルームの領域(plume)

$$|T(x, y, z) - \langle T \rangle (y)| \geq 2\sigma_T(y)$$

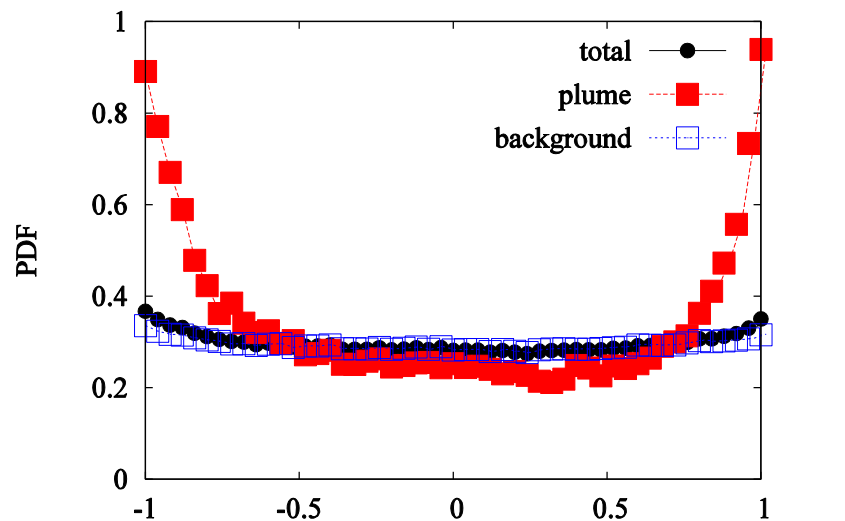
## □ それ以外の領域(background)

$$|T(x, y, z) - \langle T \rangle (y)| < 2\sigma_T(y)$$

$$\langle \cdot \rangle (y) = \frac{1}{L_x L_z} \int_0^{L_x} \int_0^{L_z} \cdot dx dz$$

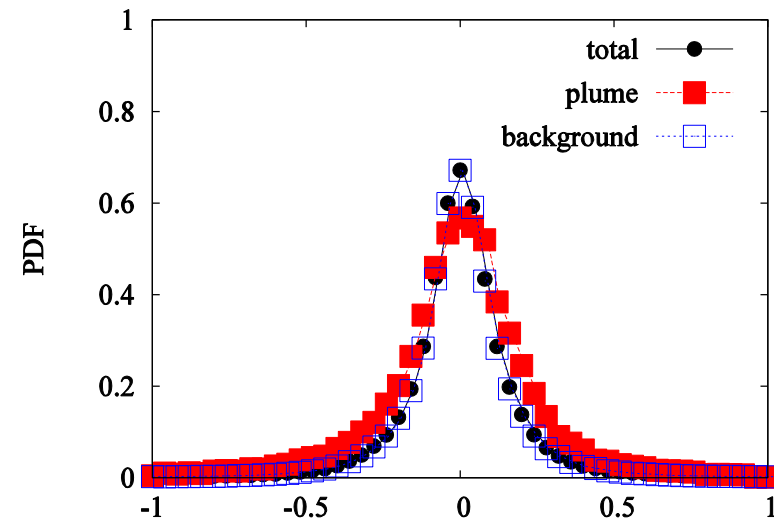
$$\sigma_T(y) = \sqrt{\langle (T - \langle T \rangle)^2 \rangle}$$

中央



$$\cos\psi = \mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\omega} / (|\mathbf{u}| |\boldsymbol{\omega}|)$$

境界層内



$$\cos\psi = \mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\omega} / (|\mathbf{u}| |\boldsymbol{\omega}|)$$

# まとめ

- 自己着火過程の直接数値シミュレーション
  - 周期3Dコードの検証, 無反射2Dコードの開発
  - DNS(3D): 乱流中の反応の進行
  - DNS(2D): 反応帯と渦の相互作用

課題: コードの効率化

- 乱流中の粒子拡散
  - 乱流混合層中の流体粒子と慣性粒子の追跡

課題: コードの並列化

- 熱対流の直接数値シミュレーション
  - DNS(3D) ( $Ra=10^7$ ): プルームの抽出, 条件付き統計解析

課題: 高Ra, 乱流場の特徴付け