

# 平成23年度名古屋大学 HPC 計算科学連携 研究プロジェクト成果報告書

研究課題名：超多自由度複雑流動解析のための効率的な並列計算コード開発と検証

研究代表者：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）

燃焼，熱対流，雲形成などの複雑流動現象において，乱流の果たす役割の定性的および定量的理解が必要となってきた。それら複雑流動現象の解明には，近年発展が著しい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)が非常に有効である。そこで，本研究では，流れ，計算科学，及び計算機科学を専門とする研究者の学際的な共同研究により，超多自由度複雑流動現象を解明するためのDNSコードの開発と効率化，および数値実験結果の検証と物理的考察を行った。具体的には，(1) ガソリン燃料の主成分の一つである  $n$  ヘプタンの簡略化学反応メカニズムを用いた2次元及び3次元乱流燃焼用DNSコード，(2) 平行平板間の熱対流乱流のDNSコード，(3) 雲物理などへの応用を考慮した，乱流混合層における慣性粒子拡散のDNSコードの開発をFX1上で行い，結果の検証と考察及びプログラムの高効率化を実施した。得られた成果は以下の通りである。

(1) では， $n$  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DNSコードについて，昨年度開発した3次元周期境界条件用DNSコードを用いていくつかの数値実験(2次元計算との比較，0次元計算との比較，反応のありとなしの比較等)を行い，結果の妥当性を検証した。効率化については，現在，フラットMPIによる計算でピーク性能比5.4%という結果を得ているが更なる検討が必要である。その他，開発済みの2次元周期境界条件用計算コードを基にNSCBCによる無反射境界条件を導入したコードの開発を実施した。開発したコードを用いて， $n$  ヘプタン予混合気の低温酸化反応時に高温領域から低温領域に向けて伝播する，急激な熱発生を伴う薄い膜状の進行反応帯と孤立渦との相互作用を解析した。その結果，渦の強度が強い場合，反応帯は渦内部に巻き込まれることが分かった。

(2) では，規範的な熱対流乱流の一つであるレイリー・ベナール対流乱流の大規模DNSを実施し，実空間において，乱流場をプルーム領域(熱対流乱流の典型的な秩序構造)とそれ以外の領域に分割しプルームの渦構造の統計的性質について調べた。その結果，プルーム領域では渦度と速度が整列する傾向が強いことを見出した。また，物理変数の代表変数の取り方を変えることなどにより，同じ格子点数同じレイリー数に対して時間刻み幅を約1000倍大きくすることに成功した。

(3) では，時間発展乱流混合層のDNSコードに流体粒子及び慣性粒子の追跡コードを組み込み，結果の検証と考察を行った。その結果，流体粒子は渦とともに移流されるが，慣性粒子は巻き上がる渦の中心からはじき出され，渦あり領域と渦無し領域の境界の薄い領域に集まる傾向があることを見出した。