

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

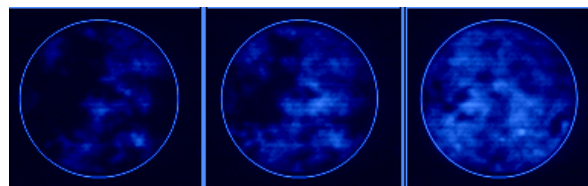
石原 卓

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23年5月10日(火)
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
名古屋大学高等研究院1Fカンファレンスホール

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

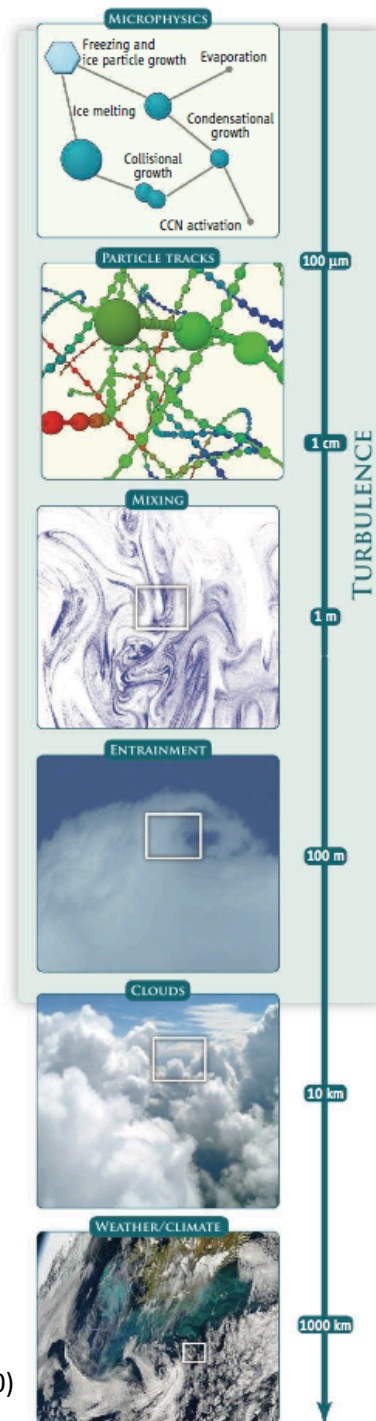


<http://www.nissan-global.com/JP/TECHNOLOGY/INTRODUCTION/DETAILS/3D-SIM/>

乱流の果たす役割(？)

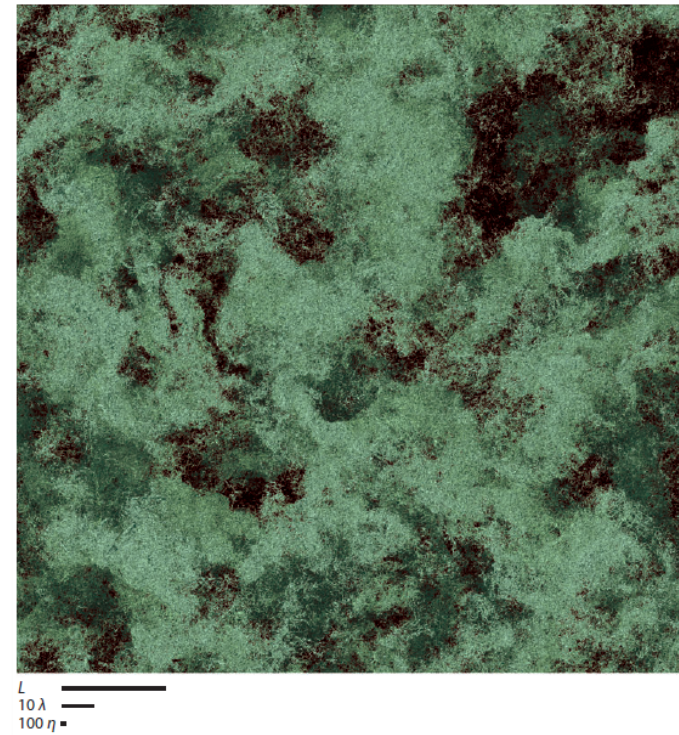
高レイノルズ数ほど

スケール比大、間欠性が増加



乱流の計算科学

- これまで
 - 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($1023 \times 1536 \times 1024$)
 - 乱流境界層($4608 \times 512 \times 768$)
 - 乱流混合層($576 \times 384 \times 384$)
 - ...



乱流の計算科学

- これから
 - 乱流の計算科学的研究における知識とノウハウおよび得られた乱流データベースを活用し、様々な応用問題にも挑戦
- 雲物理、燃焼、、、
- 学際的な共同研究
 - 現象の理解
 - 計算科学的手法の開発

本プロジェクト

- 本研究では、流れ、プラズマ、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、雲物理などの大規模計算を実現するため
 - 1. プラズマや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
 - 2. 熱対流乱流の直接数値計算コード
 - 3. 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及び三次元乱流燃焼用コード
- 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)、西田成志 (ブリジストン)、森川貴弘 (リコー)
 - 生田博也、星野邦雄 (金田研M2)、三木貴史、棚橋崇博 (金田研M1)

1. 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
- これまで
 - 一様等方性乱流による二粒子拡散の解析
 - ベクトル並列計算機(VPP5000)用流体粒子追跡コード

粒子の運動

$$\frac{d\mathbf{X}}{dt} = \mathbf{V}$$
$$M \frac{d\mathbf{V}}{dt} = \mathbf{F}$$

$\mathbf{X}$:粒子の位置
 $\mathbf{V}$:粒子の速度
 M :粒子の質量
 $\mathbf{F}$:粒子に働く力

粒子の半径を a 、密度を ρ_p 、流体の密度を ρ_f 、流速を $\mathbf{u}$ とする

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

μ :粘性係数

無次元化

粒子の運動方程式

$$\frac{d\mathbf{X}}{dt} = \mathbf{V}$$
$$\frac{d\mathbf{V}}{dt} = \frac{1}{St} (\mathbf{V}_T + \mathbf{u} - \mathbf{V})$$

$$\text{ストークス数 } St = \frac{\rho_p a^2 U}{\mu L} \quad \mathbf{u}: \text{流速}$$

$$\text{重力の効果 } \mathbf{V}_T = \frac{(\rho_p - \rho_f) a^2}{\mu U} g \mathbf{e}_z$$

ρ_p :粒子の密度
 ρ_f :流体の密度
 a :粒子の半径
 μ :粘性係数
 U :代表速度
 L :代表長さ
 g :重力加速度
 $\mathbf{e}_z$:z 方向の単位ベクトル

ストークス数(St)

ストークス数(St)は粒子の流体に対する追従性を表す

St ≠ 0 のとき

粒子の運動方程式

$$\begin{aligned}\frac{d\mathbf{X}}{dt} &= \mathbf{V} \\ \frac{d\mathbf{V}}{dt} &= \frac{1}{St}(\mathbf{V}_T + \mathbf{u} - \mathbf{V})\end{aligned}$$

粒子は流れ場にすぐには追従しない。

St = 0 のとき

$$\mathbf{V}_T + \mathbf{u} - \mathbf{V} = 0$$

粒子の運動方程式は下の式になる

$$\frac{d\mathbf{X}}{dt} = \mathbf{u} + \mathbf{V}_T$$

粒子は流れ場に追従する。

St = 0 のとき慣性が働かない
St ≠ 0 のとき慣性が働く

流れ場 u

支配方程式

非圧縮ナヴィエ-ストークス方程式(3次元)

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \nabla^2 \mathbf{u} + \mathbf{f}$$

$\mathbf{u}$:流速
 ρ :密度
 p :圧力
 ν :動粘性係数
 $\mathbf{f}$:外力

計算条件

流れ場 u

空間積分	スペクトル法
時間積分	4次ルンゲクッタ法
境界条件	各方向 2π 周期境界
補間方法	3次スプライン補間
格子点数	$128 \times 128 \times 128$

粒子の追跡 $\mathbf{X}$:粒子の位置 $\mathbf{V}$:粒子の速度

計算方法	4次ルンゲクッタ法
粒子の初期速度	乱流場の初期速度
粒子数	16^3

粒子の初期配置として

16^3 個の粒子を等間隔に配置

プロジェクトにおける成果

- 流体粒子のみならず、慣性や重力の影響を考慮した粒子追跡コードの実装と計算結果の検証

-
- コードのMPI化
 - コードの高効率化
 - 並列化手法の改良

2. 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
- これまで
 - 平行平板間乱流の高効率DNSコードの開発

熱対流乱流の支配方程式

ブシネスク近似を用いた、
非圧縮ナビエ-ストークス方程式

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\frac{\nabla p}{\rho} + \nu \nabla^2 \mathbf{u} + \alpha g \theta \mathbf{e}_y$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$$

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

$$T = -\frac{T_1 - T_2}{d} y + \theta$$

$\mathbf{u}(x, t)$: 速度

$p(x, t)$: 動圧

$T(x, t)$: 温度場

$\theta(x, t)$: 温度変動場

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

ρ : 密度

ν : 動粘性係数

α : 体膨張係数

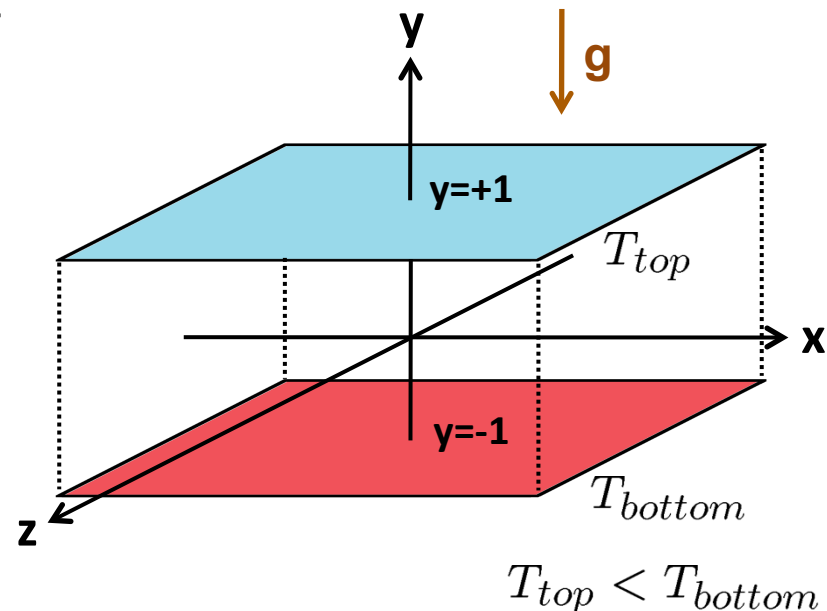
g : 重力

κ : 熱拡散係数

d : 平板間隔

T_{top} : 上面温度

T_{bottom} : 下面温度



数値計算手法

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = f_{NL} + \frac{1}{D} \nabla^2 \psi$$

$$\begin{aligned} \psi &= \{g, \phi, \theta\} \\ f_{NL} &= \{h_g, h_v, h_\theta\} \\ D &= \{1, 1, Pr\} \end{aligned}$$

$$\psi(x, y, z) = \sum_{k_x} \sum_{k_z} \hat{\psi}(k_x, y, k_z) e^{i(k_x x + k_z z)}$$

$$\frac{\partial \hat{\psi}}{\partial t} = \hat{f}_{NL} + \frac{1}{D} \left[-(k_x^2 + k_z^2) + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right] \hat{\psi}$$

3段1次ルンゲ・クッタ法

陰的オイラー法

$$\left[\begin{array}{l} k = 1, 2, 3 \\ \text{calc: } \hat{f}_{NL}^{n+\frac{k-1}{3}} \\ \text{solve: } \frac{d^2 \hat{\psi}^{n+\frac{k}{3}}}{dy^2} - \left[\frac{D}{\alpha_k \Delta t} + (k_x^2 + k_z^2) \right] \hat{\psi}^{n+\frac{k}{3}} = -D \left[\hat{f}_{NL}^{n+\frac{k-1}{3}} + \frac{1}{\alpha_k \Delta t} \hat{\psi}^n \right] \end{array} \right. \quad \alpha_k = \left\{ \frac{1}{3}, \frac{1}{2}, 1 \right\}$$

ヘルムホルツ方程式

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dy^2} f - \kappa f &= r \quad -1 \leq y \leq 1 \\ B.C. \quad f(y = -1) &= A, \quad f(y = +1) = B \end{aligned}$$

これをチェビシェフ・タウ法を用いて解く。

プロジェクトにおける成果

- 温度場を組み込んだコードの実装
- 現在、結果の検証中

-
- 高Raの実現
 - 計算手法の検討
 - 計算の高効率化

3. 詳細および簡略化学反応メカニズムを用いた 二次元及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
- hydrogen/air の2次元直接数値計算(DNS)
 - Echehki et al (Combust. Flame, 2003)
 - Sankaran et al (Combust. Flame, 2005)
 - Chen et al (Combust. Flame, 2006)
- これまで
 - Nヘプタンの簡略化学反応メカニズムを用いた乱流
燃焼の二次元直接数値シミュレーションを実施
 - 自己着火過程における中間生成物の拡散の影響の解析
(西田ら2010)
 - 自己着火過程の温度依存性の解析(森川ら2011)
 - 渦度場と温度場の相関と着火遅れ時間の解析(三木2011)

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

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

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

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

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

ρ : 密度

u : 速度

T : 温度

Y : 質量分率

p : 圧力

h : エンタルピー

W : 物質質量

γ : 比熱比

μ : 粘性係数

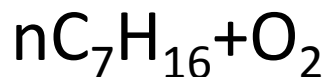
D : 物質拡散係数

λ : 熱伝導係数

R : 気体定数

$\overline{C_v}$: 定積比熱

簡略化化学反応モデル



詳細化学反応メカニズム

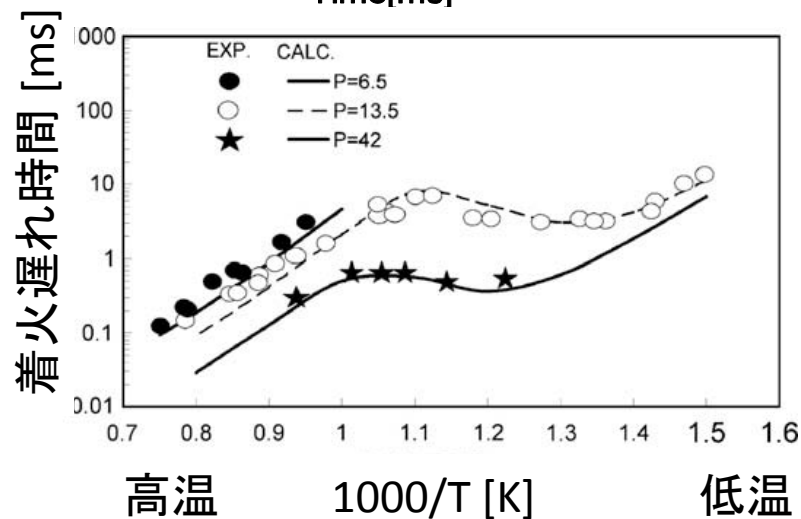
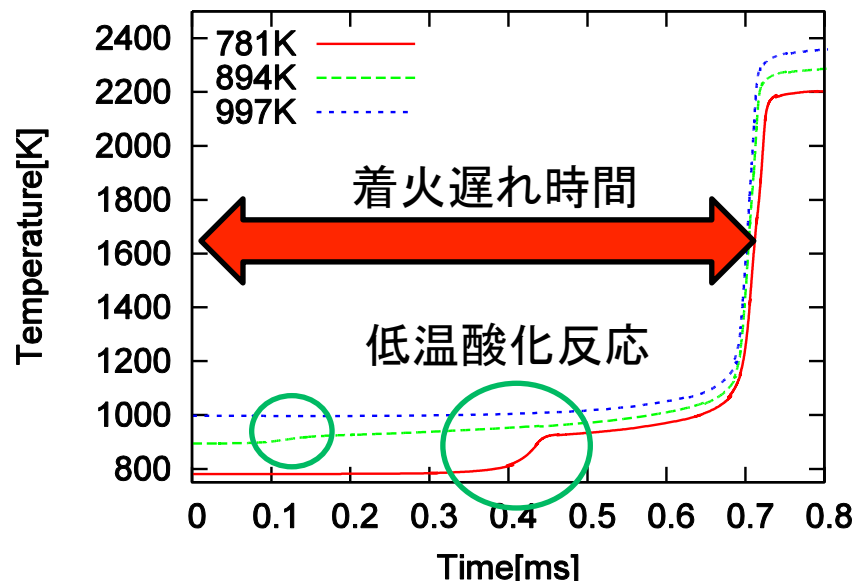
化学種数 : 556種
素反応数 : 2540個



Tsurushima (Combust. Flame, 2009)

化学種数 : 33種
素反応数 : 38個

着火遅れ時間の実験結果
をよく再現している



Tsurushimaメカニズム

Tsurushima (Combust. Flame, 2009)

化学種33種
素反応数38式

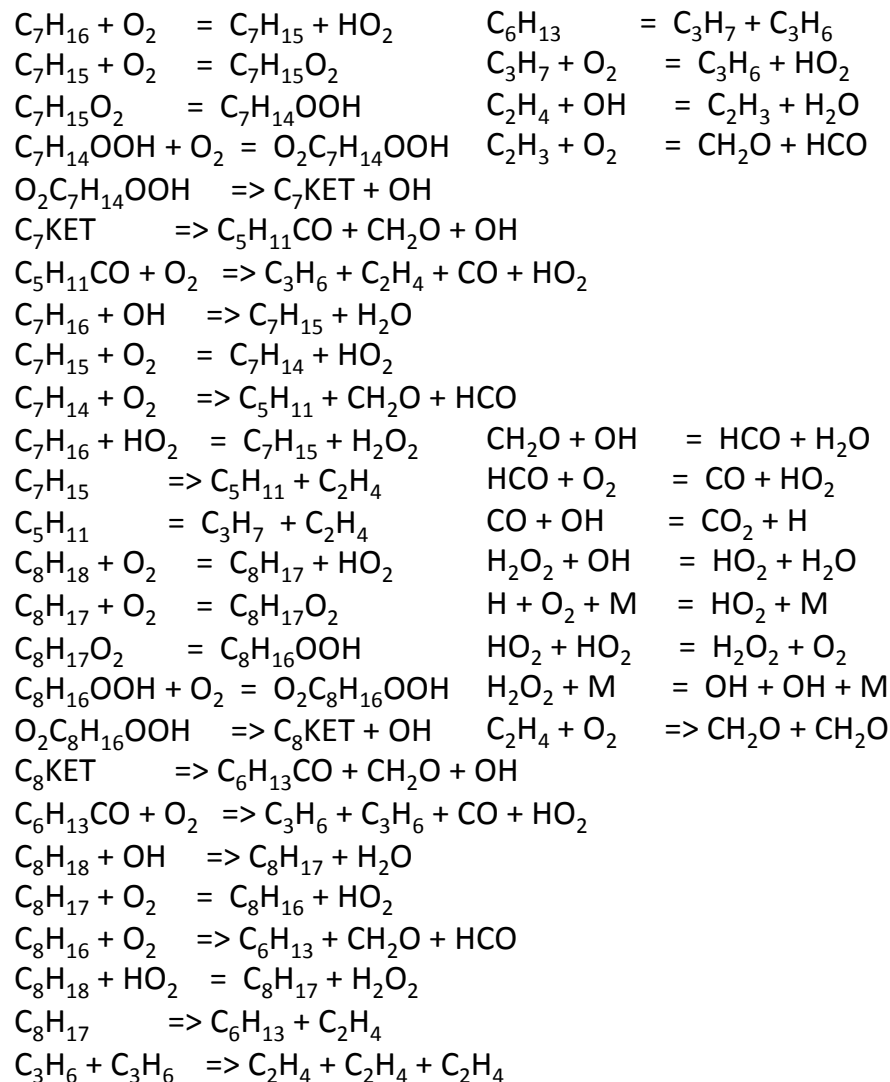
化学反応式

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

化学種33種

C₇H₁₆ C₇H₁₅ C₇H₁₄ C₇H₁₅O₂ C₇H₁₄OOH
O₂C₇H₁₄OOH C₇KET C₅H₁₁CO C₅H₁₁
C₈H₁₈ C₈H₁₇ C₈H₁₆ C₈H₁₇O₂ C₈H₁₆OOH
O₂C₈H₁₆OOH C₈KET C₆H₁₃CO C₆H₁₃
C₃H₇ C₃H₆ C₂H₄ C₂H₃ CH₂O HCO CO
CO₂ H₂O₂ HO₂ H OH H₂O O₂ N₂

素反応38式



計算手法

空間微分

8次精度中心差分法

8次精度空間low-passフィルタ

境界条件

周期境界条件

時間積分

4次精度陽的

Runge-Kutta法

計算領域

4mm × 4mm

4.1mm×4.1mm(Chen et al, 2006)

格子点数

512×512, 1024×1024

720×720(Chen et al, 2006)

主な結果

- 自己着火過程における中間生成物の拡散の影響の解析(西田ら2010)
 - 温度揺らぎがある場では、中間生成物の一つであるOHの流入・流出が低温酸化反応の促進・抑制に寄与
 - 乱流場では、高渦度領域において、低渦度領域と比べOHの流入出量が低下することで、他の領域から孤立し、高温点での反応が促進され、低温点の反応が抑制される
- 自己着火過程の温度依存性の解析(森川ら2011)
 - 着火時期は初期空間平均温度に依存し、温度揺らぎ、乱流のありなしには依存しない
 - 初期に乱流がある場合はない場合に比べ高温点と低温点の温度差は減少
 - 初期温度の上昇により着火が遅れる温度領域では、低温領域において低温酸化反応が進行した後、温度場は乱流により著しく空間一様化
- 渦度場と温度場の相関と着火遅れ時間の解析(三木2011)
 - 初期の渦度場と温度場の相関が強いほど着火遅れの時間差が大きくなる傾向がある

プロジェクトにおける成果

- 化学反応部分のコード生成の半自動化
 - 他の燃料の計算も可能
 - 並列化手法の改良
 - データ通信法の改良による高速化
 - 時間積分法の改良
 - Kennedy(2003)による3次精度ESDIRK (Explicit, Singly Diagonally Implicit Runge-Kutta) 法の導入により、計算が効率化、また、着火時までの解析が可能に
-
- コードの3次元化
 - 現在、計算結果の検証中