

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25年5月8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ES総合館1階ESホール

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
 - 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)
 - 森下浩二 (神戸大学大学院システム情報学研究科)
- 研究協力者
 - 寺地 敦 (日産自動車)
 - 澤村陽一, 三木貴史, 伊藤貴政, 浅田宗志, 丹羽佑太, 小笠原浩樹, 大竹悠介

様々な複雑流動現象

- 燃焼、雲、熱対流、プラズマ、複雑境界、
 - 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
 - 境界の複雑さ

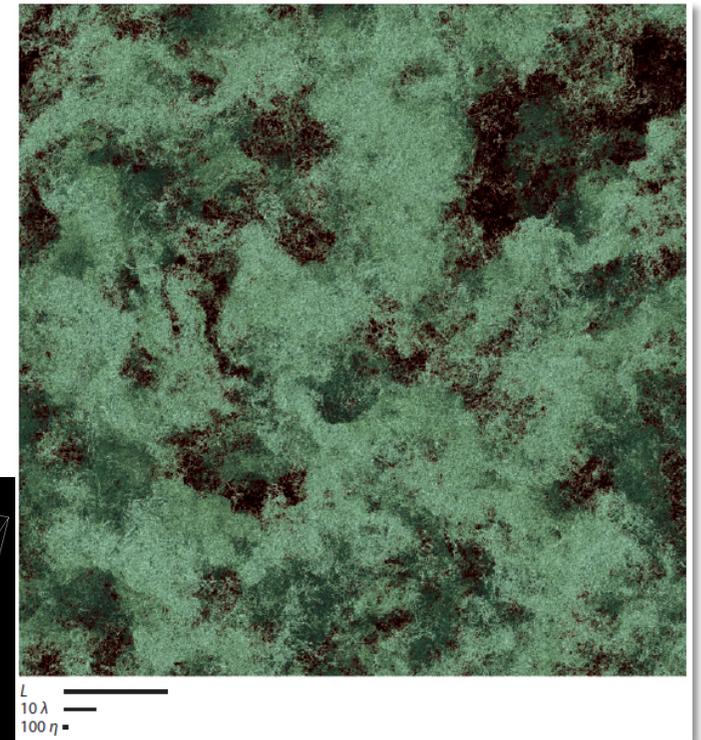
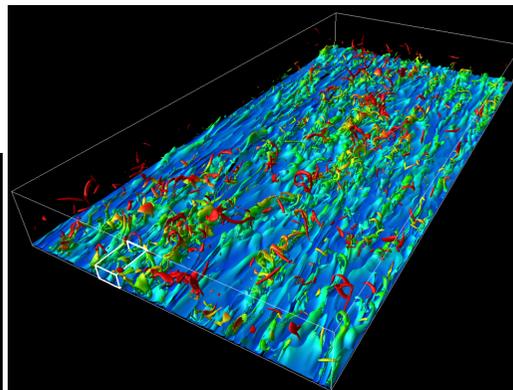
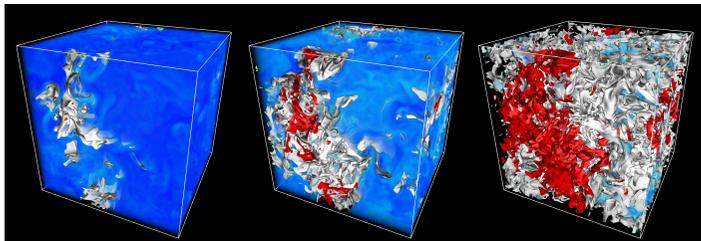
乱流の果たす役割(？)

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)



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、乱流燃焼、雨滴生成過程、熱対流などの複雑流動現象の大規模計算を実現するため、以下の問題について、手法の検討、コード開発、結果の検証を実施した。
 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乱流燃焼の直接数値計算
 2. 乱流中の高効率粒子追跡
 3. 熱対流乱流の直接数値計算
 4. 一様磁場下における平行平板間電磁流体乱流の直接数値計算
 5. Volume Penalization(VP)法を用いた平行平板間乱流の直接数値計算

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乱流燃焼の直接数値計算(DNS)

- 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24年度
 - nヘプタンの簡略化学反応メカニズム(33化学種)を用いた乱流燃焼の直接数値シミュレーション
 - 自己着火過程の3次元DNSに基づく、流れと反応の相互作用の理解(三木)
 - 等温壁のある場合の自己着火過程の2次元DNS(浅田, 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

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

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

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

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

ρ : 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

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

C_v : 定積比熱

初期条件

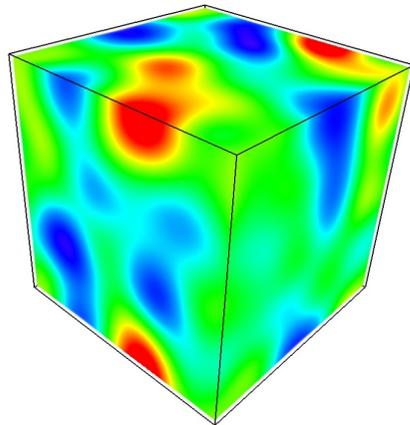
初期燃料濃度と温度と圧力の条件

等量比	圧力	平均温度	温度揺らぎのRMS	積分長
0.5	4.0[MPa]	781[K]	9.4[K]	2.7[mm]

初期乱流場の条件

Re_L	速度揺らぎのRMS	積分長	計算領域	格子点
27.9	4.0[m/s]	1.0[mm]	4.0 × 4.0 × 4.0 [mm]	256 × 256 × 256

温度場
T



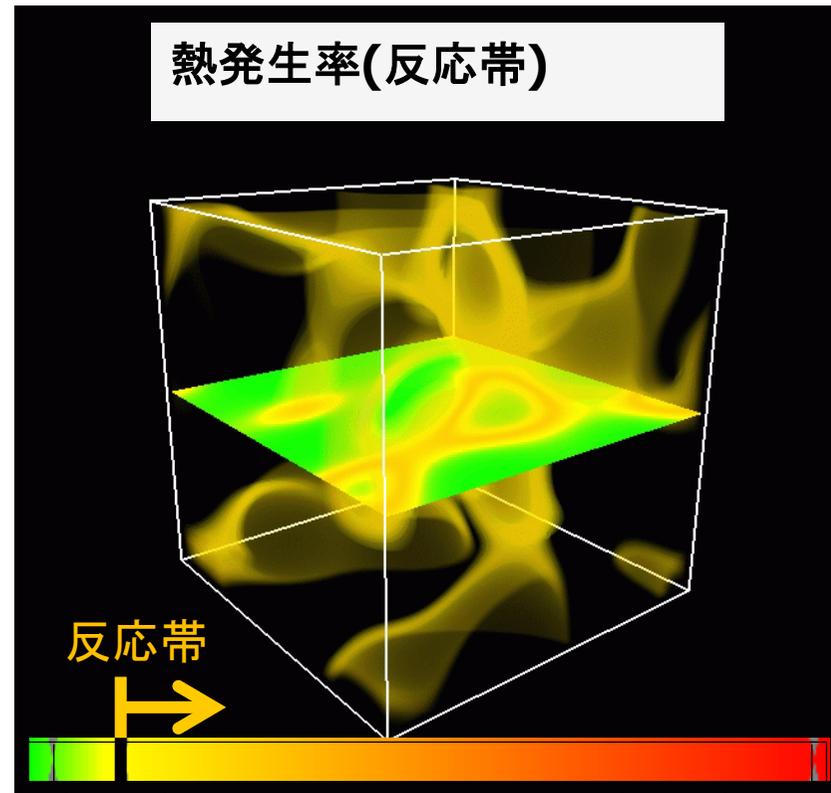
920

780K

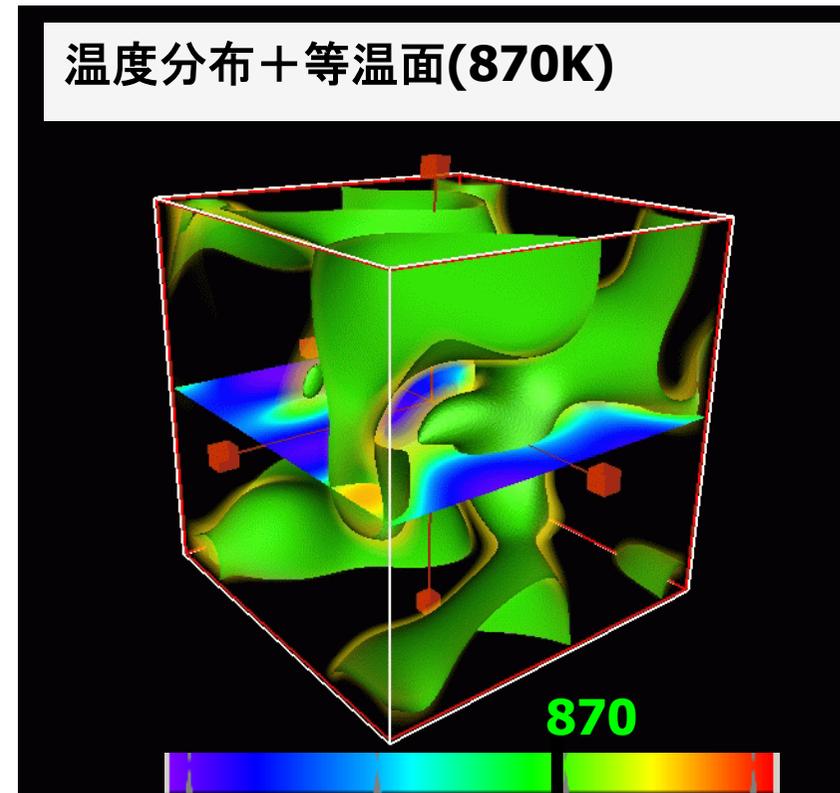
	乱流有	乱流無
反応有	○	○
反応無	○	—

0

熱発生率と温度 乱流無し



$$0 \left\langle \left\langle \frac{\partial \rho T}{\partial t} \right\rangle \right\rangle_R + 1.5 \sigma \left(\frac{\partial \rho T}{\partial t} \right)_R \text{ 熱発生率 } \left\langle \left\langle \frac{\partial \rho T}{\partial t} \right\rangle \right\rangle_R + 7.0 \sigma \left(\frac{\partial \rho T}{\partial t} \right)_R$$



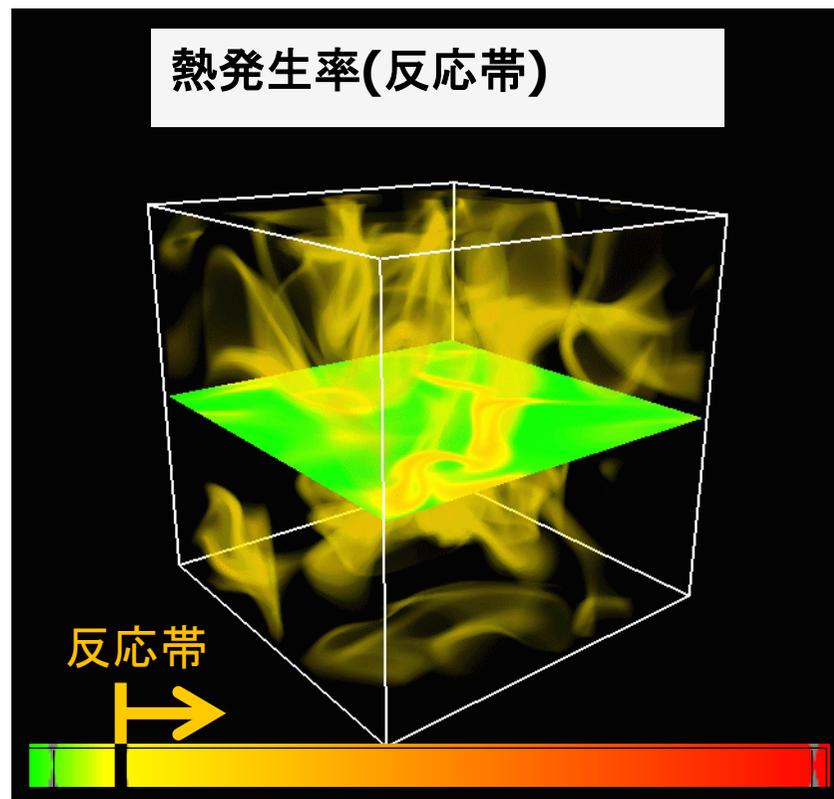
780

温度

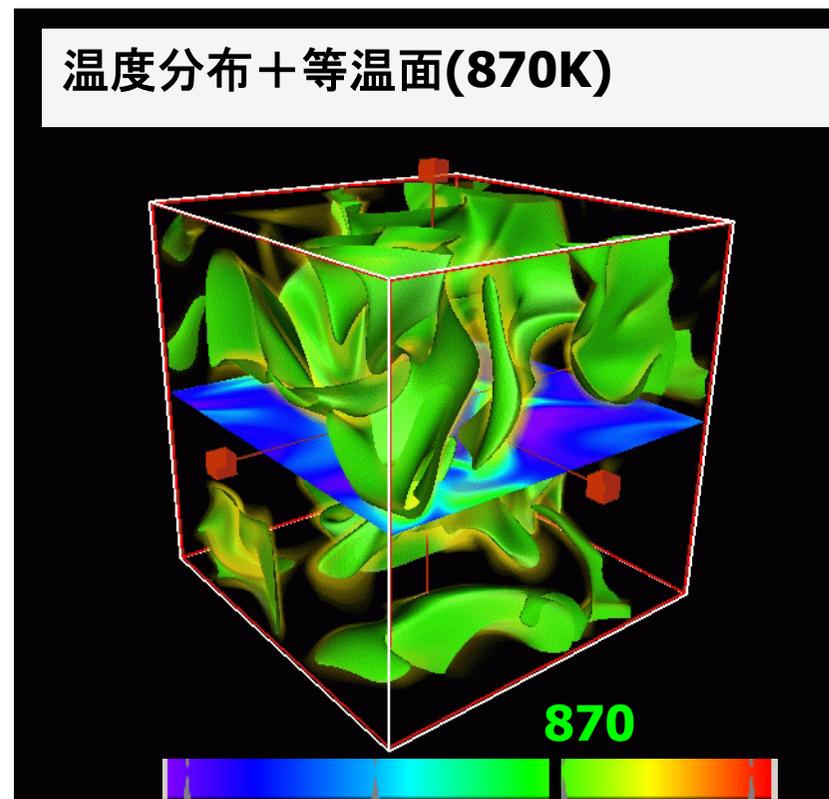
920

- 熱発生 の盛んな領域(反応帯)は**薄い膜状**となり伝播
- 反応帯と等温面がほぼ**重なる**
- 反応帯は高温領域から低温領域へ伝播

熱発生率と温度 乱流有り



$$0 \left\langle \left(\frac{\partial \rho T}{\partial t} \right)_R \right\rangle + 1.5 \sigma \left(\frac{\partial \rho T}{\partial t} \right)_R \text{ 熱発生率 } \left\langle \left(\frac{\partial \rho T}{\partial t} \right)_R \right\rangle + 7.0 \sigma \left(\frac{\partial \rho T}{\partial t} \right)_R$$



780

温度

920

- 乱流により, 反応帯が**複雑化**
- 反応帯が複雑化しているが, 反応帯と等温面はほぼ重なり推移
- 高温領域から低温領域へと伝播

等温壁のある場合の自己着火過程の2次元DNS

壁がある場合と壁がない場合の数値計算法と計算条件

空間微分

x方向

壁あり：6次精度コンパクト差分

壁なし：8次精度中心差分

y方向

8次精度中心差分

時間積分

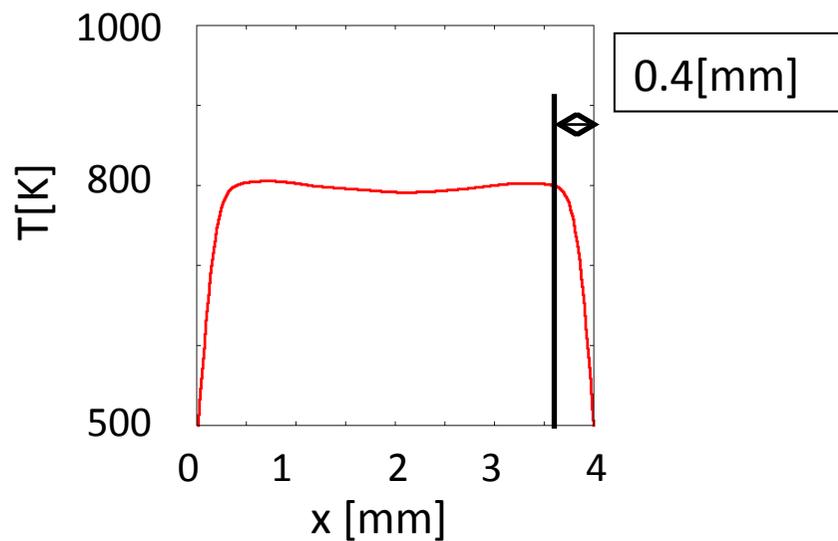
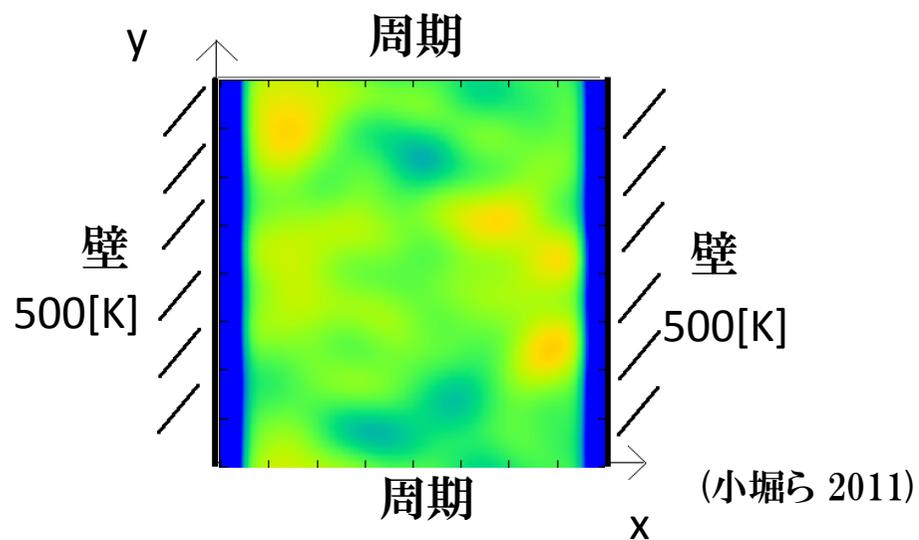
Explicit, Singly Diagonally Implicit
Runge-Kutta法(ESDIRK法 Kenedy 2003)

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

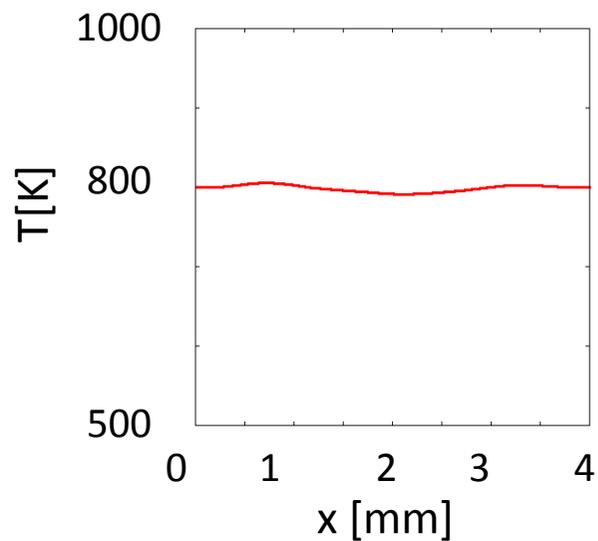
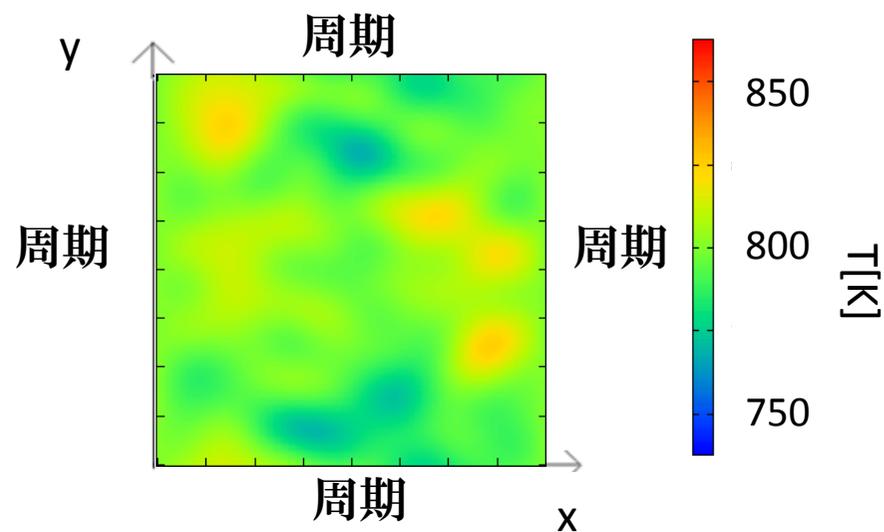
格子点数	計算領域	初期圧力	等量比
257 × 256	4[mm] × 4[mm]	40[atm]	0.5

計算条件(温度場)

①壁あり



②壁なし

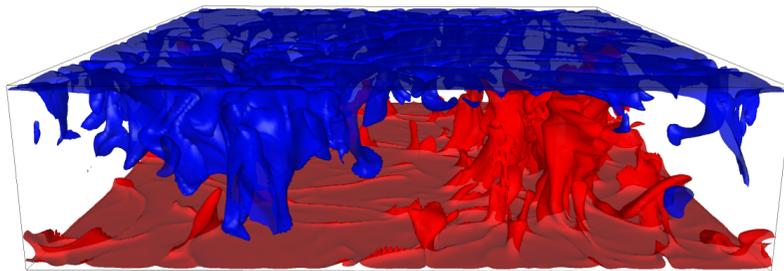


2. 乱流中の高効率粒子追跡

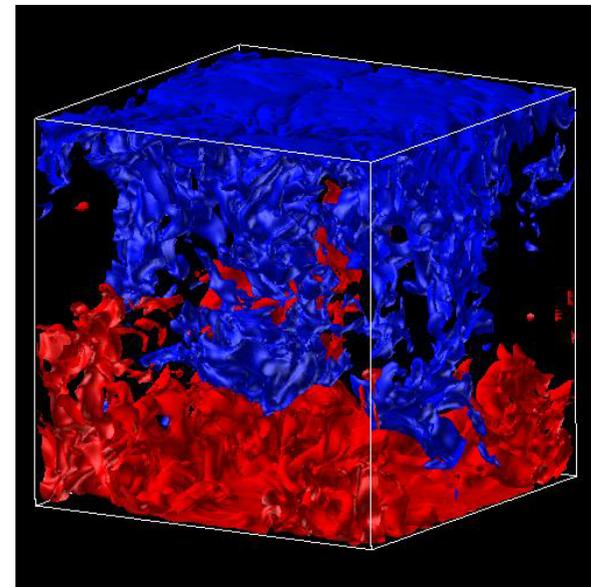
- 目的: 高レイノルズ数乱流中の物質(各種粒子、スカラー)の運動を理解する. そのための高効率な手法を開発する
 - 平成22年度
 - 一様等方性乱流中の流体粒子および慣性粒子の追跡
 - 平成23年度
 - 乱流混合層中の流体粒子および慣性粒子の追跡
 - 平成24年度
 - ターゲットとする乱流場(高Re一様等方性乱流, 乱流境界層)の性質の理解 (石原, 小笠原)
 - 粒子追跡の並列数値計算法の検討

3. 熱対流乱流の直接数値計算

- 目的: 高Ra熱対流乱流の小スケールにおける普遍統計法則の追求
 - 平成23年度
 - 熱対流乱流の直接数値計算($Ra=10^7$)とデータ解析(星野)
 - 平成24年度
 - 熱対流乱流コードの高効率化
 - 高Ra(10^9)の実現 (丹羽)



256 x 128 x 256, $Ra=10^7$



256 x 384 x 256, $Ra=10^9$

支配方程式

ブシネスク近似を用いた三次元非圧縮ナビエ・ストークス方程式と熱方程式

$$\begin{aligned} \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + (\vec{u} \cdot \nabla) \vec{u} &= -\frac{1}{\rho} \nabla p + \alpha g T \vec{e}_y + \nu \nabla^2 \vec{u} \\ \frac{\partial T}{\partial t} + (\vec{u} \cdot \nabla) T &= \kappa \nabla^2 T \\ \nabla \cdot \vec{u} &= 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \vec{u}'}{\partial t'} + (\vec{u}' \cdot \nabla) \vec{u}' &= -\frac{1}{\rho} \nabla p' + T' \vec{e}_y + \sqrt{\frac{\text{Pr}}{\text{Ra}}} \nabla^2 \vec{u}' \\ \frac{\partial T'}{\partial t'} + (\vec{u}' \cdot \nabla) T' &= \frac{1}{\sqrt{\text{Pr Ra}}} \nabla^2 T' \\ \nabla \cdot \vec{u}' &= 0 \end{aligned}$$

■'	無次元量	\vec{e}_y	y方向の単位ベクトル
----	------	-------------	------------

星野ら(修論、2012)の問題点

- 時間刻みが非常に小さい
- 鉛直方向のエリアスエラー

高Ra数の数値計算に
用いられる無次元化

$$\begin{aligned} \vec{u} &= (\sqrt{\alpha g d \Delta T}) \vec{u}' \\ t &= \frac{d}{\sqrt{\alpha g d \Delta T}} t' \\ \vec{x} &= d \vec{x}' \\ T &= (\Delta T) T' \end{aligned}$$

e.g.
Verzicco, and Camussi, (J. Fluid Mech., 2003)
Mishra, *et al.*, (J. Fluid Mech., 2011)

4. 一様磁場下における平行平板間 電磁流体乱流の直接数値計算

- 目的: 平行平板間電磁流体乱流において、抵抗低減が起きる場合とそうでない場合の流れ構造の違いを理解する.

– 平成24年度

- 平行平板間乱流のコードを基に, ローレンツ力の組み込みを行い, 結果の検証を実施 (大竹)

支配方程式

Quasi-static近似(QS近似)を用いた
3次元非圧縮ナビエ・ストークス方程式

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\nabla p + \frac{1}{Re} \nabla^2 \mathbf{u} + \frac{Ha^2}{Re} (\mathbf{j} \times \mathbf{e}_y)$$

$$\mathbf{j} = -\nabla \phi + \mathbf{u} \times \mathbf{e}_y$$

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

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

境界条件

x, z 軸方向 : 周期境界条件

y 軸方向 : $\mathbf{u} = \mathbf{0}$, $\mathbf{j} \cdot \mathbf{e}_y = 0$ at $y = \pm h$

\mathbf{u} : 速度

p : 圧力

\mathbf{j} : 電流密度

ϕ : 静電ポテンシャル

B_0 : 印加磁場 $B_0 = (0, B_0, 0)$

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

ν : 動粘性係数

ρ : 密度

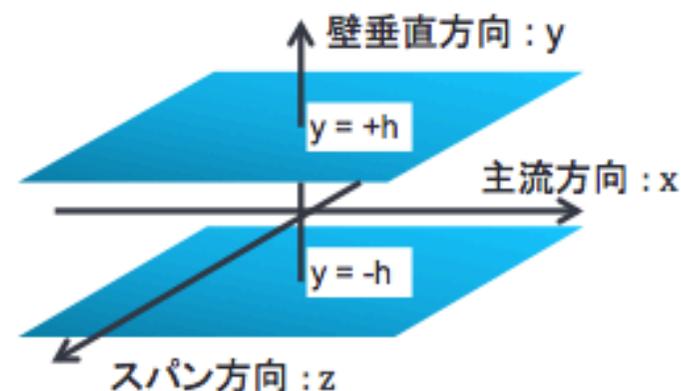
σ : 電気伝導率

h : チャンネル半幅

U_m : x 軸方向の平均流速

Re : レイノルズ数 $Re = \frac{U_m 2h}{\nu}$

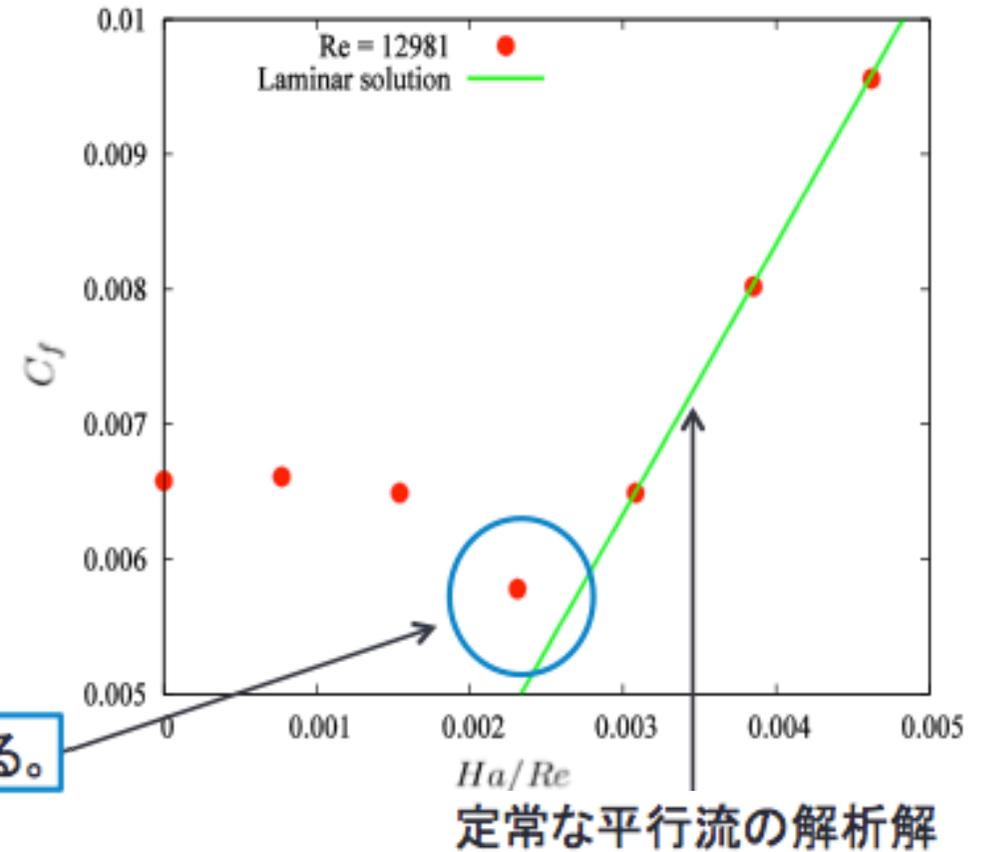
Ha : ハルトマン数 $Ha = B_0 2h \sqrt{\frac{\sigma}{\rho \nu}}$



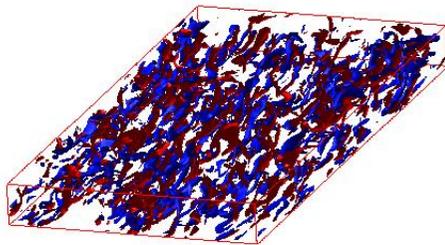
壁面摩擦係数のハルトマン数依存性

Ha	$Ha/Re \times 10^3$	$c_f \times 10^3$	c_f の変化率 [%]
0	0	6.58	
10	0.77	6.61	+0.46
20	1.54	6.49	-1.37
30	2.31	5.78	-12.16
40	3.08	6.49	-1.37
50	3.85	8.02	+21.88
60	4.62	9.56	+45.29

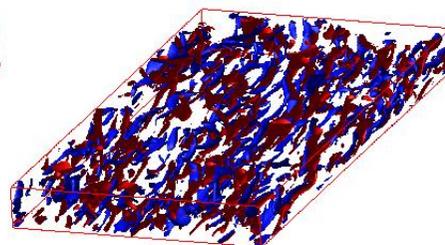
Drag reductionが大きく起こっている。



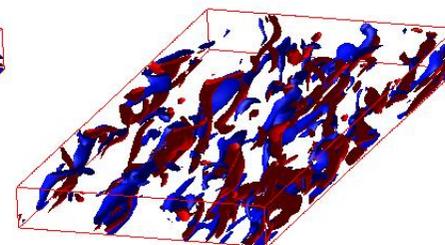
主流方向の渦度



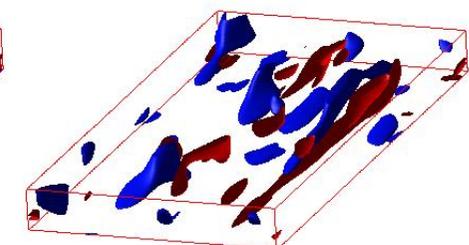
Ha = 0



Ha = 20



Ha = 30



Ha = 40

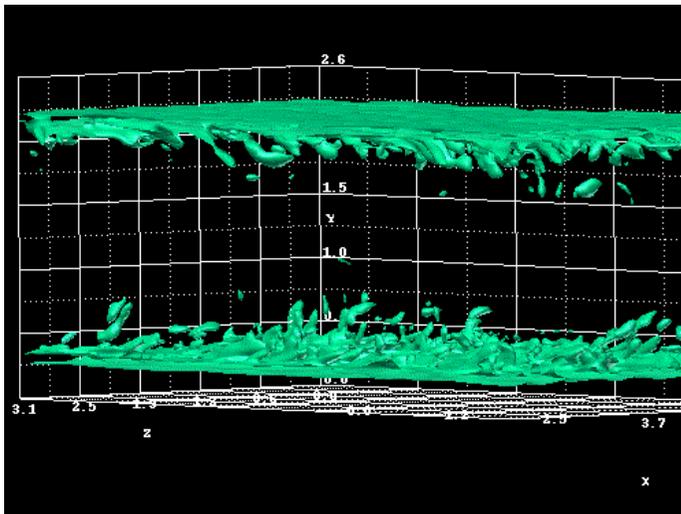
5. Volume Penalization(VP)法を用いた 平行平板間乱流の直接数値計算

- 目的: 複雑境界を有する高Re乱流の簡易な直接数値計算法の確立

– 平成24年度

- 一様等方性乱流のコードを基に, VP法を用いた平行平板間乱流の並列化コードを開発、計算結果を検証 (澤村)

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} - \nu \nabla^2 \mathbf{u} + \nabla p + \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{u} + \frac{\chi_{\Omega}}{\eta} \mathbf{u} + (1 - \chi_{\Omega}) G \mathbf{e}_x = 0$$



まとめ

1. 簡略化学反応メカニズムを用いた乱流燃焼の直接数値計算
 - ・乱流と化学反応の相互作用の理解, 等温壁の影響を考慮
2. 乱流中の高効率粒子追跡
 - ・ターゲットとなる乱流場の性質の理解, 並列化コードの検討
3. 熱対流乱流の直接数値計算
 - ・高Ra (10^9) の実現
4. 一様磁場下における平行平板間電磁流体乱流の直接数値計算
 - ・抵抗低減が起きる場合($Ha=30$)の流れ構造の理解
5. VP法を用いた平行平板間乱流の直接数値計算
 - ・コードを開発, 計算結果の妥当性を検討中