

# 正方形ダクト乱流の直接数値シミュレーション

関本 敦, 河原 源太

大阪大学 基礎工学研究科

Markus Uhlmann, Alfredo Pinelli

スペイン国立エネルギー環境技術研究センター (CIEMAT)

## 1 はじめに

矩形管路(ダクト)内乱流にはプラントルの第二種二次流れと呼ばれる管軸に垂直な速度を持つ平均流が存在し,物質や熱,運動量の平均的な輸送に影響を及ぼすため,工学的関心がもたれている。これまでのダクト乱流中の二次流れに関する研究<sup>1)</sup>では,主に二次流れと各レイノルズ応力成分や平均渦度成分などの統計量との関係について調べられているが,二次流れの生成機構は未だ十分に明らかにされていない。近年の乱流研究の結果,壁面乱流の自己生成維持サイクルに重要な役割を果たす縦渦やストリーク<sup>2,3)</sup>といった秩序構造の存在が明らかになっている。矩形ダクト中の乱流現象によって生成する二次流れには,これらの秩序構造が大きく関与していると考えられるが,時々刻々の秩序構造の挙動は複雑で,二次流れとの直接的な対応付けには大きな困難が伴う。

本稿では,2章で擬スペクトル法を用いた正方形ダクト乱流の直接数値シミュレーションの方法を紹介する。ここで言う「直接」とは乱流をモデル化せずに流体の支配方程式である Navier-Stokes 方程式を直接数値的に解くという意味である。乱流中の最小スケールの渦までを十分な格子分解能で解像する必要があるため,極めて高負荷な数値計算方法であるが,乱流現象の解明のツールとして広く用いられている。3章では,分散メモリ環境における正方形ダクト乱流のシミュレーションコードの並列化の方法を簡単に説明し,SR11000での並列性能評価を最大64ノード(1024コア)を用いて行う。4章では,乱流中の秩序構造に立脚した二次流れの生成機構解明の試みを紹介し,5章で本研究の今後の展望を述べる。

スーパーコンピュータ若手利用者推薦制度(試行)により,大規模な計算環境で本研究を遂行できた。ここに記して謝意を表す。

## 2 数値計算方法

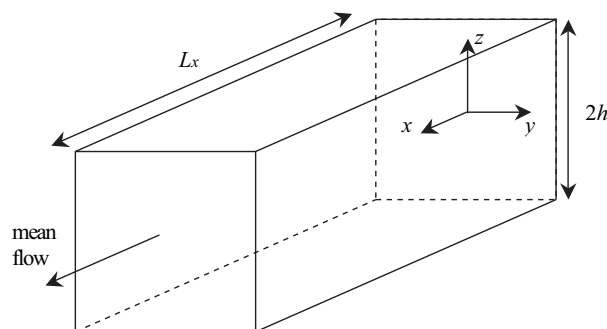


図 1: Geometry

無限の長さの真っ直ぐな正方形ダクト内を流れる非圧縮性流体の運動を考える (図 1 参照)。その支配方程式は Navier-Stokes 方程式と連続の式で、

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

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (2)$$

のように表わされる。ここで、 $\mathbf{u} = (u, v, w)$  で、 $(u, v, w)$  は  $(x, y, z)$  方向の流速、 $p$  は密度で割った圧力、 $\nu$  は動粘性係数である。これらを、標準的な圧力修正法をもとにして、粘性項にクランク・ニコルソン法を適用して半陰的に離散化し、非線形項には 3 段のルンゲ・クッタ法を用いて陽的に解く。これを離散的に表わすと次のようになる。

$$\frac{u^* - u^{k-1}}{\Delta t} = -2\alpha_k \nabla p^{k-1} - \gamma_k [(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u}]^{k-1} - \zeta_k [(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u}]^{k-2} + \alpha_k \nu \nabla^2 (\mathbf{u}^* + \mathbf{u}^{k-1}) \quad (3)$$

$$\nabla^2 \phi^k = \frac{\nabla \cdot \mathbf{u}^*}{2\alpha_k \Delta t} \quad (4)$$

$$\mathbf{u}^k = \mathbf{u}^* - 2\alpha_k \Delta t \nabla \phi^k \quad (5)$$

$$p^k = p^{k-1} + \phi^k - \alpha_k \Delta t \nu \nabla^2 \phi^k \quad (6)$$

ここで、 $k = 1, 2, 3$  はルンゲ・クッタのステップ数で  $k = 3$  は次の時刻の値に相当する。また、 $\mathbf{u}^*$  は推定中間流速、 $\phi$  は擬圧力である。ルンゲ・クッタ法のステップ数に関する係数は、 $\alpha_k = [\frac{4}{15}, \frac{1}{15}, \frac{1}{6}]$ 、 $\gamma_k = [\frac{8}{15}, \frac{5}{12}, \frac{3}{4}]$ 、 $\zeta_k = [0, -\frac{17}{60}, -\frac{5}{12}]$  であり、流速と圧力に関して二次精度である<sup>4)</sup>。

次に、管軸 ( $x$ ) 方向に周期境界条件を課し、速度場  $\mathbf{u}$  と圧力  $p$  を、管軸 ( $x$ ) 方向に離散フーリエ級数展開を支配方程式の離散式に適用する。管軸 ( $x$ ) 方向に関しては  $2/3$  則を用いてリアス誤差を完全に取り除き、非線形項を擬スペクトル的に計算する。すると、各変数のフーリエ係数に関して次のような Helmholtz 方程式が得られる。

$$\nabla_{2D}^2 \hat{\mathbf{u}}^* - \left( k_x^2 + \frac{1}{\alpha_k \nu \Delta t} \right) \hat{\mathbf{u}}^* = \hat{\mathbf{R}}, \quad \hat{\mathbf{u}}^* = 0 \quad \forall x \in \Gamma \quad (7)$$

$$\nabla_{2D}^2 \hat{\phi} - k_x^2 \hat{\phi} = \hat{S}, \quad \frac{\partial \hat{\phi}}{\partial \mathbf{n}} \quad \forall x \in \Gamma \quad (8)$$

ここで、 $k_x$  は管軸方向波数、 $(\hat{\cdot})$  は各変数のフーリエ係数を表わす。 $\nabla_{2D}^2 \equiv \frac{\partial}{\partial y^2} + \frac{\partial}{\partial z^2}$ 、 $\mathbf{n}$  は境界  $\Gamma$  上の外向き法線ベクトルである。それぞれの右辺は、

$$\hat{\mathbf{R}} = \frac{1}{\alpha_k \nu} \left( +2\alpha_k \nabla \hat{p}^{k-1} + \gamma_k [(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u}]^{k-1} + \zeta_k [(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u}]^{k-2} - \alpha_k \nu \nabla^2 \hat{\mathbf{u}}^{k-1} - \frac{\hat{\mathbf{u}}^{k-1}}{\Delta t} \right)$$

$$\hat{S} = \frac{\nabla \cdot \hat{\mathbf{u}}^*}{2\alpha_k \Delta t}$$

であり、管壁面に垂直な方向 ( $y, z$ ) にはチェビシエフ多項式展開を適用して、微分係数を計算する。その後、式 (7), (8) を高速対角法<sup>5)</sup> によって解く。この Helmholtz 方程式の解法は、4 回の行列積を伴う直接解法であり、全計算時間の 7 割程度が式 (7), (8) を解くための行列積の計算に費やされる。この行列積はそれぞれの環境にチューニングされた行列演算ライブラリ (Level 3 Blas, MSL2, MPP など) を使用することによって、容易に高速化することができる。

### 3 並列化と並列性能評価

高レイノルズ数における大規模な直接数値シミュレーション (DNS) を実用的な時間内で行うためには、スーパーコンピュータを用いた並列計算が必要不可欠である。ここで、本研究のシミュレーションコードの並列化の方法について説明する。今回の数値計算アルゴリズムは、各フーリエモードについて 2 次元 Helmholtz 方程式 (7), (8) を解くので、各プロセス (Rank) にフーリエモードを割り当てるだけでよい (以下の擬似コード参照)。

(sequential)	(parallel)
<pre> Initialize ! time loop do istep=1, nstep ! Runge-Kutta step do krk=1, 3 compute r.s.h of eq.(7) ! loop for Fourier modes do ikx=0, nx solve eq.(7) for <math>\hat{u}^*</math>, <math>\hat{v}^*</math>, <math>\hat{w}^*</math> enddo compute r.s.h of eq.(8) ! loop for Fourier modes do ikx=0, nx solve eq.(8) enddo update <math>\hat{u}</math>, <math>\hat{v}</math>, <math>\hat{w}</math>, <math>\hat{p}</math> by eq.(5),(6) enddo enddo </pre>	<pre> MPI_Initialize  do istep=1, nstep  do krk=1, 3 compute r.s.h of eq.(7)  do ikx=ibeg(myRank), iend(myRank) solve eq.(7) for <math>\hat{u}^*</math>, <math>\hat{v}^*</math>, <math>\hat{w}^*</math> enddo compute r.s.h of eq.(8)  do ikx=ibeg(myRank), iend(myRank) solve eq.(8) enddo update <math>\hat{u}</math>, <math>\hat{v}</math>, <math>\hat{w}</math>, <math>\hat{p}</math> by eq.(5),(6) enddo enddo MPI_Finalize </pre>

擬スペクトル法を用いたコードを MPI を用いて並列化する際に特徴的なのは、非線形項の計算に伴う高速フーリエ変換 (FFT) のためのデータ通信である。逐次コードでは、非線形項 (例えば、式 (7) の右辺の  $(u \cdot \nabla)u$ ) は図 2(a) で示すように、FFT を介して物理空間での格子上で  $(u \cdot \nabla)u$  等の非線形項を計算し、再び FFT を用いてこれらのフーリエ係数を求める。並列コードでは、各プロセスは割り当てられた波数空間のフーリエ係数しか保持していないため、それら単独では FFT ができない。そのため、図 3 に示すように各プロセスが保持するデータ配列を入れ替える必要がある。今回は、各フーリエモードで分割されていたデータ配列 ( $x$  方向分割なので 'x-cut' データ) を  $z$  方向に分割されたデータ配列 ('z-cut' データ) へ移す。ここでは、このデータ入れ替えの操作を 'shuffling' と呼ぶことにする。並列コードでの非線形項の計算は、図 2(b) のように 'shuffling' 操作後に FFT を行い、'z-cut' データを用いて物理空間での格子上で非線形項を計算し、次は逆順に FFT, shuffling を行い非線形項の 'x-cut' フーリエ係数データを得る。

次に、SR11000 (最大 64 ノード, 1024 コア) において、MPI で並列化したプログラムコードの並列性能テストの結果を図 4(a),(b) に示す。以下の 3 通りの計算格子で評価を行った。

- (case1)  $512(x) \times 325(y) \times 325(z)$  (標準)
- (case2)  $3072(x) \times 257(y) \times 257(z)$  (流れ方向 ( $x$ ) に高分解能)
- (case3)  $3072(x) \times 1025(y) \times 1025(z)$  (3 方向 ( $x, y, z$ ) に高分解能)

(case1) では 4 コアでの計算時間を基準 (4 コアの計算時間を 4 倍して 1 コアの計算時間に換算) として、8, 16, 32, 64, 128 コアの場合の計算速度の向上率を示した。4 コアから 64 コアで約 15 倍の速度向上 (並列化性能は約 90%) となっている。また、図 4(b) の (case2) では 1 ノードの計算時間を基準として、(case3) では 8 ノードの計算時間を 1 ノードに換算した時間を基準とし

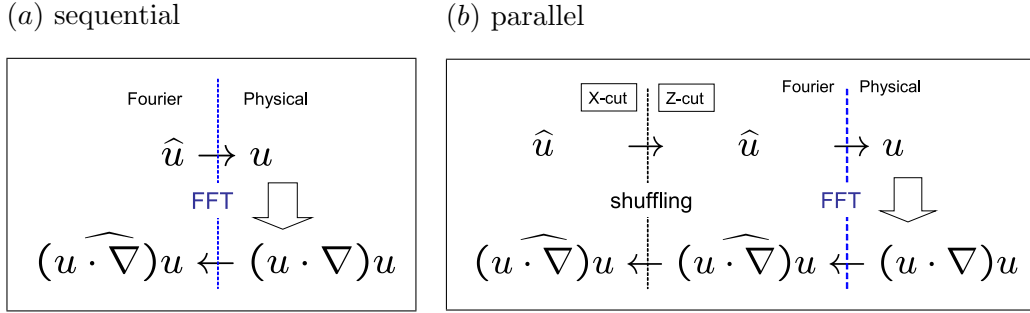


図 2: An example of computing non-linear terms.

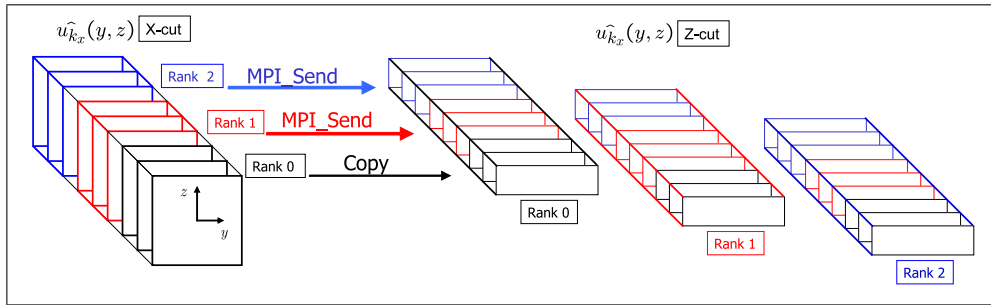


図 3: An example of shuffling data before Fourier transformations. In this case (3 processes) each 'Rank' sends their z-cut data to 'Rank 0' before backward FFT, and the same with the other Ranks (all to all communication).

た。(case2) では 32 ノード以上から速度向上率は完全に飽和する。これは、各プロセス(ランク)に割り当てられた Fourier モードが少なくなり、通信にかかる時間の比率が大きくなるためである。(case3) では各プロセスに (case2) と同じ Fourier モード数を割り当てられているが、2次元 helmholtz 方程式を解く時間の比率が大きくなるため、64 ノード (1024 コア) を使用しても速度向上率は飽和していない。このように、採用する計算格子とプロセス数は通信時間とのバランスを考慮して選択する必要がある。

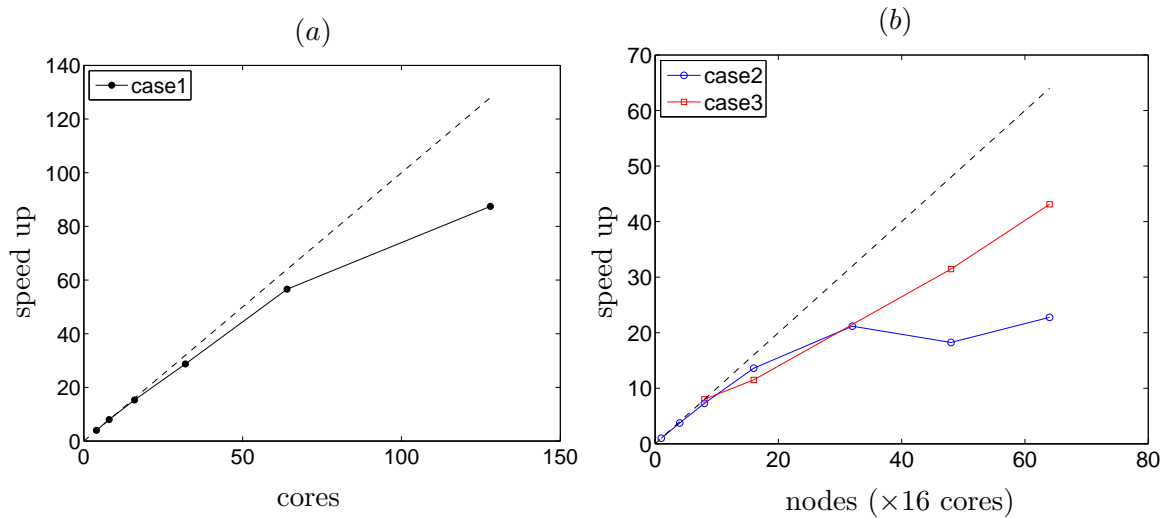


図 4: (a) parallel efficiency (case 1) using  $512(x) \times 325(y) \times 325(z)$  mesh. (b) parallel efficiency (case 2) using  $3072 \times 257 \times 257$  mesh , (case 3) using  $3072 \times 1024 \times 1024$  mesh.

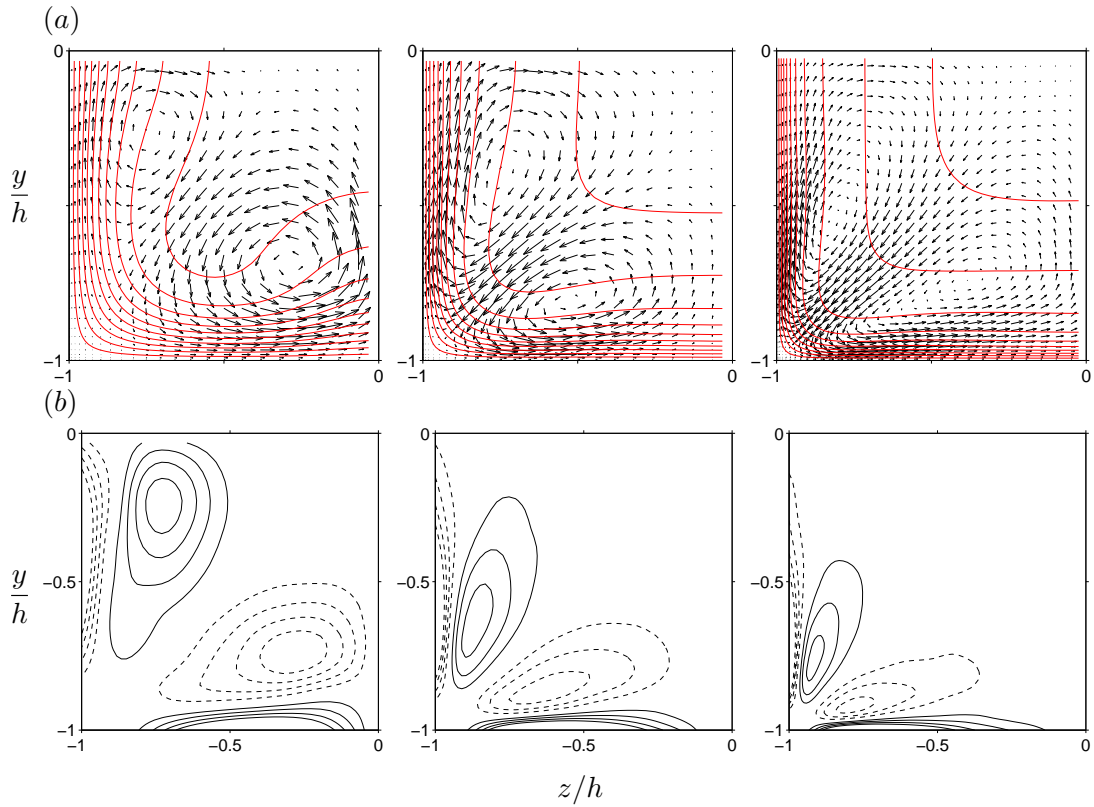


図 5: (a) Temporally averaged velocity field, for the streamwise-independent Fourier mode at (left),  $Re_b = 1500$ ; (center),  $Re_b = 2200$ ; (right)  $Re_b = 3500$  ( $L_x/h = 4\pi$ , quadrant average over longer interval  $O(10000h/u_b)$ ). The cross-streamwise component is shown by vectors and the streamwise component is represented by iso-contours: (b) streamwise vorticity field: —, iso-contours of positive vorticity; ----, negative vorticity.

#### 4 平均流のレイノルズ数依存性

今回の擬スペクトル法によって得られた平均流速分布や各乱流統計量は、過去の差分法を用いた直接シミュレーション<sup>1)</sup>や実験測定<sup>6)</sup>との良い一致が認められた。以下では  $Re_b \equiv u_b h / \nu \leq 3500$  ( $u_b$  は平均流速,  $h$  はダクトの半幅,  $\nu$  は動粘性係数) におけるシミュレーション結果を示す。流量一定の条件下で、管軸方向格子幅  $\Delta x^+$  は 15 以下、管壁に垂直方向格子幅  $\Delta y^+$ ,  $\Delta z^+$  の最大値は 6 より小さくなるように選んだ (ここで、 $\Delta x^+$ ,  $\Delta y^+$ ,  $\Delta z^+$  は平均摩擦速度  $u_\tau$  と  $\nu$  で規格化した格子間隔である)。

$Re_b = 1100, 1500, 2200, 3500$  での長時間平均流速場を図 5(a) から (c) に示す ( $L_x/h = 4\pi$ , 平均した時間は  $O(10000h/u_b)$ )。二次流れの影響により、平均管軸方向流速分布には円管内乱流にはみられない変形が観測できる。二次流れ渦はレイノルズ数が大きくなるにつれて平均流速分布は図 5(a), 平均管軸方向渦度分布は (b) のように変化し、二次流れの渦中心および、管軸方向渦度分布の極大 (小) 点は角へと近づく。次に、それぞれレイノルズ数において、平均壁面せん断応力  $\overline{\tau_w}$  で規格化された壁面せん断応力の分布を図 6 に示す。レイノルズ数が 1100, 1500 の場合は壁面中央付近で極小点をもち、角寄りの位置で極大点をとるが、2200, 3500 の場合は中央と角寄りの位置でも極大点をもつ。角付近の極大点の角からの距離は、どのレイノルズ数でも  $50\nu/u_\tau$  程度である。このことから、 $\overline{\tau_w}$  のレイノルズ数依存性は壁摩擦長  $\nu/u_\tau$  でスケールされる壁面近傍の秩序構造 (縦渦) と密接な関係があることがわかる。

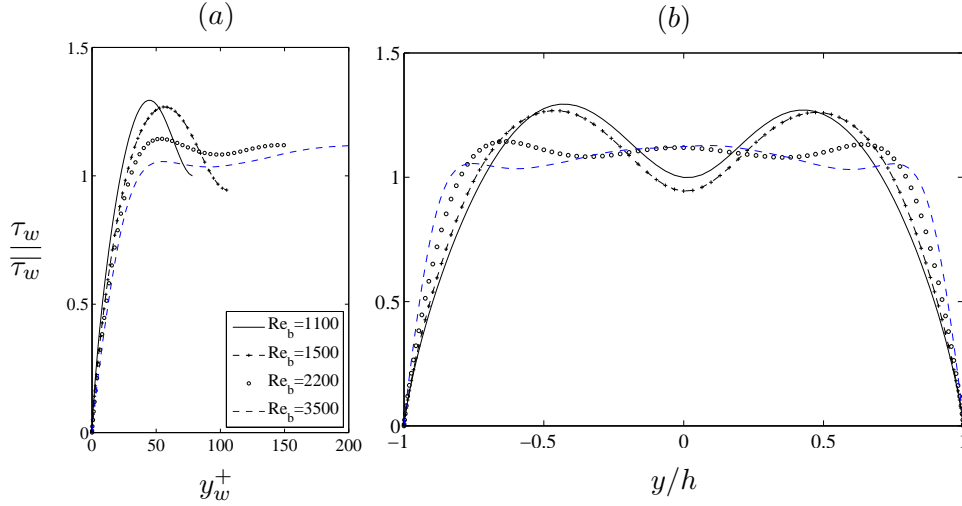


図 6: Mean local wall shear stress normalized by the average over the whole walls at four Reynolds numbers ( $L_x/h = 4\pi$ ), as a function of the distance (a) from the corner,  $y_w^+$  in wall units, (b) from the wall bisector,  $y/h$ .

## 5 秩序構造と二次流れ - 縦渦中心の PDF -

ここでは、二次流れと秩序構造の関連性を調べるために秩序構造を定義し定量的に議論を進める。縦渦の中心軸がある管断面を通る点を次の 2 つの条件、

- 速度勾配テンソルの第二不変量が管断面内で極大値をとる点、
- その極大点の周りで管断面上に射影された流線が螺旋形である条件<sup>7)</sup>を満足する点

として定義する。縦渦中心位置の確率密度分布 (PDF) を描くと図 7(a) ~ (d) のようになる。これらは  $Re_b = 1100, 2200$  の場合の長時間サンプリング ( $O(1000h/u_b)$ ) の結果で、(a), (c) は正 (時計回り) の渦度を持つ縦渦、(b), (d) は負 (反時計回り) の渦度を持つ縦渦中心の PDF を示しており、二次流れ渦の中心付近では PDF の値は大きくなっている。したがって、秩序構造 (縦渦) が側壁の影響を受けることによって、特定の領域に存在する頻度が大きくなり、縦渦の重ね合わせとして平均速度場に二次流れが生じていると考えられる<sup>8)</sup>。ここで、補足しておく、 $Re_b = 1100 (Re_\tau \approx 78, \text{ダクト幅 } H^+ \approx 155)$  のように一つの壁面上に縦渦対が 1 つ以上納まるような場合には乱流状態が持続するが、レイノルズ数がより低い場合には、壁面上に縦渦対が納まらずに乱流活動が維持できなくなり層流となる。実際、 $Re_b = 1100$  はほぼ臨界レイノルズ数 (層流になる限界のレイノルズ数) である<sup>8)</sup>。

レイノルズ数の増加に伴い  $50\nu/u_\tau$  程度の直径を持つ縦渦は、管路幅に対して小さくなるため、縦渦は図 7(c), (d) のように壁面に沿う方向に比較的広い範囲に存在するようになる。これは、縦渦構造が壁面に沿ってある程度自由に移動することができるようになるためである。また、 $Re_b = 2200 (Re_\tau \approx 220, \text{ダクト幅 } H^+ \approx 440)$  では、縦渦直径とダクト幅のスケール比を考えると一つの壁面上には 2 組の縦渦対が納まるように存在できる。そのため、図 7(c), (d) には、角寄りの位置だけでなく壁面中央付近にも PDF の極大点が存在している。

今回示したような低レイノルズ数領域では、壁面付近の秩序構造 (縦渦と低速ストリーク) は、隣接する壁面の影響を受けて特定のスパン方向位置に現れる。その位置は、ダクト幅と秩序構造の長さスケールとの比によって異なるため、レイノルズ数によって二次流れの様子や平均壁面せん断応力の分布が異なる。

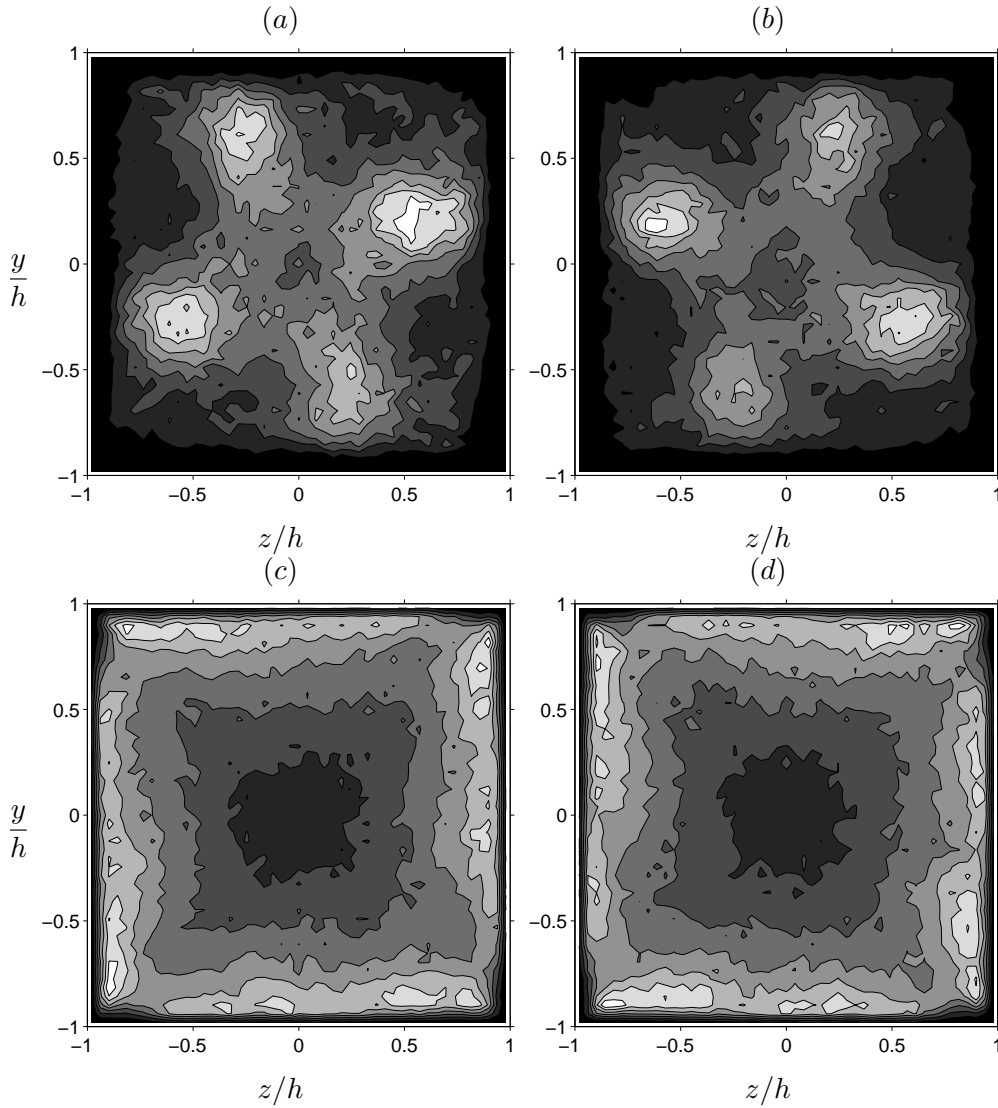


図 7: The PDF of the position of vortex centers: (a), (b)  $Re_b = 1100$ ; (c), (d)  $Re_b = 2200$  ( $L_x/h = 4\pi$ ). Vortices with (a), (c) positive streamwise vorticity; and with (b), (d) negative streamwise vorticity.

## 6 今後の展望

これまでに達成できた比較的高いレイノルズ数 ( $Re_b = 8300, Re_\tau \approx 480$ ) の乱流場の縦渦構造の可視化結果を図 8(b) 示す。速度勾配テンソルの第二不変量の正の値で等値面を描き、渦度の流れ方向成分の正負で色付けしたものを赤と青の等値面で示し、流れ方向流速を灰色等値面で示した。先に述べたように、高レイノルズ数の場合には、壁面近傍の縦渦構造は微細な構造となり、統計量に見られる二次流れ渦のスケールとは大きな隔りがある。統計量を得るためには長時間の平均操作が必要で、高レイノルズ数の流れ場の十分な統計量を得るためには数ヶ月の計算時間が必要とされる。高レイノルズ数における平均二次流れもダクト全体に渡る流れであるが、壁面近傍の微細な縦渦構造のみに着目するだけでは平均二次流れ渦の生成機構は説明できないため、より大きな乱流構造に着目する必要があるだろう。

現在、境界層乱流や平行平板間乱流、円管流れなどでも壁面近傍の秩序構造が各統計量に及ぼす影響が研究されており、本研究のような乱流中の瞬時構造に着目した研究が新しい乱流モデル開発へと応用されていくことが期待される。

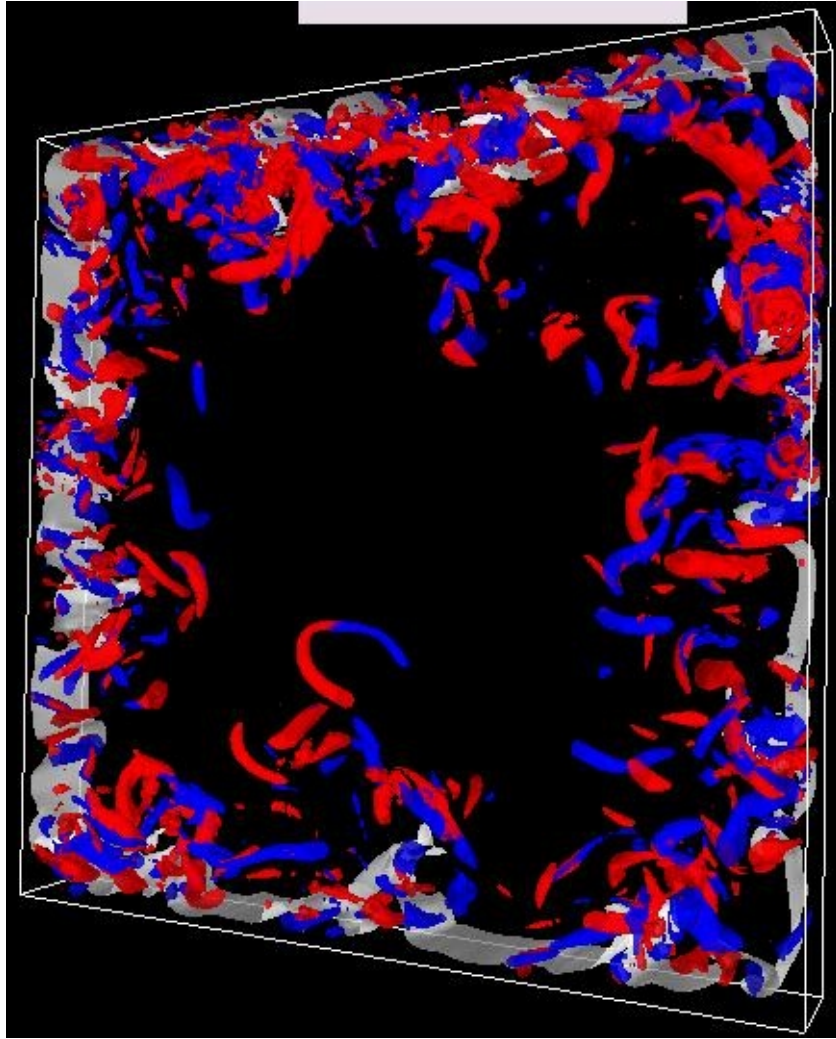


図 8: An instantaneous field (iso-contours of second invariant of velocity gradient tensor) with parameters  $Re_b = 8300 (Re_\tau \approx 480)$ ,  $L_x/h = 0.2\pi$  (short domain), using  $48(x) \times 257(y) \times 257(z)$  mesh. (gray), an iso-contour of streamwise velocity, (red), quasi-streamwise vortices with positive vorticity; (blue), vortices with negative vorticity.

## 文献

- (1) Gavrilakis, S., *J. Fluid Mech.*, **244** (1992), 101-129
- (2) Gessner, *J. Fluid Mech.*, **58** (1973), 1-25
- (3) Hamilton, J. M., Kim, J. and Waleffe, F., *J. Fluid Mech.*, **287** (1995), 317-348
- (4) Verzicco, R. and Orlandi, P., *J. Comput. Phys.*, **123** (1996), 402-414
- (5) Haldenwang, P., Labrosse, G., Abboudi, S. and Deville, M., *J. Comput. Phys.*, **55** (1984), 115-128
- (6) 河原源太・ほか 4 名, *機論*, **66-641**, B(2000), 95-102
- (7) Kida, S. and Miura, H., *J. Phys. Soc. Japan* (1998), **67**(7), 2166-2169
- (8) Uhlmann, M. Pinelli, A. Kawahara, G and Sekimoto, A., *J. Fluid Mech.*, **588**(2007), 153-162