乱流熱物質輸送現象の超大規模直接数値計算

店橋 護, 佐藤 允, 宮内 敏雄

東京工業大学 大学院理工学研究科 機械宇宙システム専攻

1. はじめに

工学的に観察される多くの流れは乱流状態にあり、流体運動だけでなく温度や物質の輸送、粒子 輸送、燃焼等を伴う。これらの乱流熱物質輸送現象を解明するには、流体運動、熱・物質の輸送、 粒子輸送、燃焼反応等を支配する非線形な偏微分方程式群を解析する必要がある。ここでは、一切 のモデルを導入せず支配方程式を高精度離散化手法により直接解く、直接数値計算(Direct Numerical Simulation: DNS)と呼ばれる方法を用いた乱流熱物質輸送現象のスーパーコンピューテ ィングについて解説する。

2. 乱流の大規模直接数値計算

流体運動のみの場合,支配方程式は次のような連続の式とナビエ・ストークス方程式である。 ∇·**u**=0

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

ここで、*u* は流体の速度ベクトルを、*p* は圧力を示しているが、最も重要なパラメータは流れの非 線形性の度合いを決定するレイノルズ数 *Re* である。レイノルズ数がある臨界値を超えると流れは 乱流状態となる。レイノルズ数が高い場合、上述の方程式中の非線形項(*u*·∇)*u* が流れの状態を支配 し、流れはさらに複雑となる。複雑な乱流現象を特徴付ける長さスケールとして、積分スケール(*l*)と呼ばれる 大規模な流体塊の運動を表現するスケールとコルモゴロフ・スケール(*η*)と呼ばれる粘性作用により運動エ ネルギーから熱エネルギーへと変換される最小スケールがある。乱流現象を正確に解析するには、この二 つのスケールを分解できるだけの計算領域の大きさと計算格子の細かさが必要とされるが、これらのスケー ルの比は次のように見積もられている。

$$\frac{l}{\eta} = \frac{Re_{\lambda}^{3/2}}{15^{3/4}}$$

ここで, *Re*_Aは乱流としての特性を最も良く表現するレイノルズ数であり,工学的に観察される流れの多くは *Re*_A>100 である。このため,工学的に重要となるレイノルズ数の乱流場の解析には極めて 多くの格子点が必要とされ,

$$N^3 \propto \left(\frac{Re_{\lambda}^{3/2}}{15^{3/4}}\right)^3$$

と見積もられる。

3. 基本的乱流場の大規模直接数値計算

一般に,複雑な乱流場であっても部分的には,一様等方性乱流,自由せん断乱流及び壁面せん断 乱流に分類できると考えられている。ここでは,これらの基本的乱流場の大規模 DNS について紹介 する。表1は代表的な大規模 DNS の計算条件を示している。一様等方性乱流は最も基本的な乱流場 であり,離散化には三次元複素フーリエ級数展開を用いた高精度のスペクトル法が用いられている。 乱流混合層は自由空間に平均的な速度勾配が形成された場合に生じる自由せん断乱流の一種であ

表1 大規模 DNS. HIT: 非圧縮性減衰一様等方性乱流,TML: 時間発展乱流混合層,SML: 空間発展乱流混合層,TCF: 平行平板間乱流,TTC:回転二重円筒間乱流,Re₂: テイラー· マイクロスケールに基づくレイノルズ数,Re₂₀:初期渦度厚さに基づくレイノルズ数,Re₅: 壁面摩擦速度に基づくレイノルズ数,Re₁:内円筒の回転速度と流路幅に基づくレイノルズ数

ID	Reynolds number	Grid points	Total grid points
HIT12	$\operatorname{Re}_{\lambda}$ = 288	$960\!\times\!960\!\times\!960$	884, 736, 000
TML9	$Re_{\omega,0} = 2800$	$648\!\times\!973\!\times\!432$	272, 377, 728
SML3	$Re_{\omega,0} = 1300$	$2700\!\times\!541\!\times\!240$	350, 568, 000
TCF5	$Re_{\tau} = 1270$	$864 \times 1239 \times 648$	693, 681, 408
TTC8	Re = 8000	$65 \times 864 \times 256$	14, 376, 960



図1 8億8千万点を用いた一様等方性乱流の DNS 結果.

る。時間発展混合層の場合,計算には複素フーリエ級数と正弦・余弦級数に基づく混合型のスペク トル法が用いられている。空間発展混合層の場合,これらに加えて高次精度有限差分法が用いられ ている。平行平板乱流は壁面近傍に形成される強い平均的な速度勾配により生じる壁面せん断乱流 の一種であり,乱流混合層と同様にフーリエ・スペクトル法と高次精度有限差分法を組み合わせた 方法が離散化に用いられている。いずれの計算も数億点の格子点が使用されており,それぞれ世界 最大級の DNS である。これらの DNS に要した総記憶容量は,東京大学情報基盤センターの SR8000/MPP あるいは SR11000 において,一般ユーザが使用できる総記憶容量のほぼ上限である約 250GB である。 また,計算時間は,一様等方性乱流の場合で約3ヶ月,時間発展混合層で約4ヶ月,時間発展混合 層で約6ヶ月,平行平板乱流に至っては約1年を必要としている。回転二重円筒内流れはテイラー・ クエット流と呼ばれており,レイノルズ数の増加とともに段階的に乱流へと遷移することから,一 般的な教科書において乱流現象を導入する際に良く用いられる流れ場である。この流れ場の DNS に は、フーリエ級数とチェビィシェフ多項式を用いたスペクトル法が用いられており,この流れ場の DNS としては世界最大である。これらの DNS コードはすべて MPI を用いて並列化されている。ここ で,変数をフーリエ級数あるいはチェビィシェフ多項式に展開するために高速フーリエ変換が用い られている。DNS では多次元変換が必要となるため、MPI を用いて空間全体のデータ持ちかえが



(a) 空間発展混合層



 (b) 平行平板間乱流
 (c) テイラー・クエット乱流

 図2 各種大規模 DNS 結果の可視化.

行われており、比較的データ転送に対する比重の重い計算である。

乱流運動を実験的に計測することは容易ではないため、このような詳細な大規模 DNS の結果は乱 流モデルの構築や検証、乱流構造等の解明に盛んに用いられている。図1と図2は上述の DNS 結果 の可視化例を示している。雲のように描かれているのは、乱流を構成する最も基本的な構造であり、 すべての乱流場がこのような構造から構成されていることが明らかになりつつある。図2bとcは 流体が剛体的に回転している領域を表す物理量の等値面を示しているが、このような可視化にも 50GB 程度の記憶容量を有した可視化用コンピュータが必要とされる。これに対して、図1と図2a は、乱流を構成する微細な渦の中心軸を示しており、大規模 DNS によって得られたデータを計算に 要した時間と同程度の解析時間をかけて求めたものである。この解析では、各 CPU あるいは各 Node に担当する領域を分割した並列処理が行われている。

4. 乱流熱物質輸送の大規模直接数値計算

乱流現象には熱や物質の輸送を伴う場合が多く、それらの特性も大規模な DNS によって調査され ている。温度変化が小さく、流体の密度が大きく変化しない場合、流れは非圧縮性と仮定できる。 この場合、上述の連続の式とナビエ・ストークス方程式に加えて、次のようなスカラーの保存方程 式が同時に解析される。

$$\frac{\partial Y}{\partial t} + (\boldsymbol{u} \cdot \nabla)Y = \frac{1}{ScRe} \nabla^2 Y$$

ここで、Y は温度や物質濃度を示しており、Sc は熱伝導率や物質拡散係数の大きさを示す無次元数 である。この無次元数の大小によって熱物質輸送の状況は大きく変化し、例えば液体中の物質の混 合・拡散過程ではこの無次元数が数百以上になるため、極めて解析が困難になる。すなわち、解像 すべき最小スケールが、流体運動の最小するスケールから温度や物質濃度の最小スケール(通常, バチェラー・スケールと呼ばれる)になる。解析対象が温度の場合、この無次元数は Pr と表記さ れ、プラントル数と呼ばれる。物質濃度の場合は、シュミット数と呼ばれる。図3は時間発展乱流



(b) Re_{e0}-1 図3 乱流混合層における物質混合(*Sc*=0.7).





図4 平行平板間乱流における熱輸送(Re==400).

混合層における物質混合の大規模 DNS 結果の一例を示している。シュミット数が約1 であるため, 格子点数は流体運動のみの解析と同様であり, *Re_{a,0}=1900* の場合には約1億1千万点の格子点が用 いられている。物質の混合はレイノルズ数の増加と共に複雑になることがわかるが,このような乱 流混合の特性を解明するためにフラクタル解析等が行われている。図4は熱輸送を伴う平行平板間 乱流の DNS 例を示している。図には壁面極近傍の温度パターンが示されている。乱流場のレイノル ズ数が同一であったとしても,プラントル数が大きくなると温度変動のスケールは小さくなる。こ のため,この DNS 例では, *Pr*=0.7 の約 1900 万点から *Pr*=2.0 の約 6400 万点へと格子点が増やされ ている。

このように温度や物質が流体運動によって運ばれるだけの場合(通常,パッシブ・スカラー輸送 と言う)の解析は比較的容易である。これに対して,温度によって密度や物性値が大きく変化する 超臨界流体や後述する大きな発熱反応により密度と温度が激しく変化する乱流燃焼等では,さらに



図5 擬臨界点近傍での CO2の密度, エンタルピー, 動粘性係数及びプラントル数の温度依存性.



図6 超臨界 CO₂の乱流熱伝達の DNS 例 (上:渦構造と壁面近傍の動粘性係数分布,下:壁面近傍の変動速度分布).

解析は困難になる。ここでは、超臨界 CO₂の乱流熱伝達と乱流中での液滴分散・蒸発及び混合の DNS について簡単に紹介する。超臨界状態の CO₂ は近年高効率熱交換器の冷媒として使用されているが、その乱流状態での熱輸送特性の詳細は未だ不明な点が多く残されている。蒸発噴霧の特性は、ディーゼルエンジン、直噴ガソリンエンジン、ガスタービンエンジン等の素過程として極めて重要である。図5は擬臨界点近傍での CO₂の密度、エンタルピー、動粘性係数及びプラントル数の温度依存性を示している。臨界点近傍では、これらの物性値は温度によって大きく変化するため、これまでのように非圧縮性を仮定した支配方程式では現象を記述できない。また、計算に必要となる格子数に大きな影響を与える動粘性係数(レイノルズ数)とプラントル数が時間・空間的に変化するため、上述の DNS よりも格子点の要求は厳しくなる。乱流中での噴霧の分散、蒸発及び混合過程の DNS では、噴霧粒子の運動を追跡し、それらが徐々に流体と熱交換しながら蒸発してゆく過程を、蒸発した物質濃度の乱流運動による混合過程も含めて解析が行われている。超臨界 CO₂の場合と同様に、この場合ももはや非圧縮の仮定は成立しない。これらの例の支配方程式は、以下のような質量、運動量及びエネルギーの方程式となる。

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



図7 一様等方性乱流中の 100 万液滴粒子の DNS

$$\rho \frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t} + \rho \boldsymbol{u} \cdot \nabla \boldsymbol{u} = -\nabla \cdot \boldsymbol{P}$$
$$\rho \frac{\partial \boldsymbol{e}_i}{\partial t} + \rho \boldsymbol{u} \cdot \nabla \boldsymbol{e}_i = -\nabla \cdot \boldsymbol{q} - \boldsymbol{P} : (\nabla \boldsymbol{u})$$

これらの方程式に加えて、超臨界 CO₂の場合は van der Waals 型の複雑な状態方程式を補助方程式 として用いて、蒸発噴霧の場合には粒子の運動方程式と蒸発した化学種の濃度の輸送方程式を同時 に解析する。これらの支配方程式の詳細な説明は省略するが、上記の支配方程式を解析する場合、 音波の伝播までを考慮に入れる必要があり、流体運動に対して極めて速い音速まで時間的に解像す る。したがって、音速を無限大と近似する非圧縮性流体の解析に比べて、100倍程度の計算時間 を必要とする。

超臨界 CO₂の乱流熱伝達に関する DNS 結果を図6に示す。この解析では、上流(図中の左側)か ら下流(図中の右側)に向かって流体は壁面から冷却される。冷却の過程で壁面近傍から流路内へ 冷たい流体が輸送され、局所的にレイノルズ数が増大する。このため、渦構造が次々と形成される ようになり、熱輸送が促進される。この DNS には、3500 万点程度の格子点が使用されているだけで あるが、計算には約4か月を要している。図7は蒸発液滴の輸送を伴う一様等方性乱流の DNS 結果 を示している。この DNS では、100 万個の粒子の輸送が解析されている。図中の断面分布は蒸発し た燃料化学種の分布を示しており、それらの特性は乱流→粒子分散→蒸発→乱流混合と複雑な過程 で決定される。このように形成された燃料が最終的に燃焼することとなる。

5. 乱流燃焼の大規模直接数値計算

大きな発熱反応を伴う乱流燃焼では、上述の圧縮性流体の支配方程式に加えて、次のような化学 種の保存方程式を同時に解析する。

$$\frac{\partial Y_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\boldsymbol{u} Y_i) = \frac{1}{\rho} \nabla \cdot (\rho Y_i V_i) + \frac{w_i}{\rho}, \quad i = 1, 2, \Lambda, N$$

ここで、下付添え字 i は燃焼反応に関与する化学種の種類を示しており、水素のような単純な燃料 に対しても 10 種類程度,メタンやプロパン等では 50 種類程度,ガソリンなどでは数百種類となる。



図9 世界最大の乱流燃焼の DNS 結果

また、wiは各化学種の反応速度を示しており、次のように与えられる。

$$w_{i} = W_{i} \sum_{k=1}^{M} \left(v_{i,k}'' - v_{i,k}' \right) B_{k} T^{ak} \exp \left(-\frac{E_{k}}{RT} \right) \prod_{j=1}^{N} \left(\frac{X_{j} p}{R^{0} T} \right)^{v_{j}'}$$

ここで,詳細な説明は省略するが,それぞれの化学種の反応速度を求めるには,素反応と呼ばれる 複雑な化学反応の組み合わせを考慮に入れる必要がある。解析に必要な素反応の数は,水素のよう な単純な燃料に対しても 30 程度,メタンやプロパン等では 300 程度であり,ガソリン等に至って は数千と考えられている。乱流燃焼の DNS では,数多くの化学種が燃焼反応に関与するため,数 10 本の化学種保存方程式を同時に解析する必要がある。また,燃焼反応を構成する素反応の中には極 めて速い反応速度を有するものが含まれており,時間積分間隔はナノ秒のオーダーに設定しなけれ ばならない。図8は、メタンと空気を混合した予混合気を層流状態で燃焼させた場合の主要な化学 種の濃度及び温度分布を示している。火炎厚さは通常 1mm 以下であり,この中で上述の複雑な化学 反応が生じている。極めて薄い火炎内で温度,密度及び化学種組成が急激に変化し,これに伴い輸 送係数と熱物性値も大きく変化するため,これらも考慮に入れる必要がある。このようなことから, 乱流燃焼の DNS は、乱流場のみの DNS に比べて極めて莫大な計算資源(簡単な見積では計算負荷は 10⁷倍)を必要とし、数年前までは不可能であると考えられていた。世界初の三次元 DNS は、東京大 学情報基盤センターにおいて著者らによって行われ、2000 年に発表された。この DNS は、当時の超 並列スーパーコンピュータ SR2201 を用いて約 2 年の歳月をかけて行われた。図9は現在行われて いる世界最大の水素・空気乱流予混合火炎の DNS 結果を示している。図中の等値面は燃焼反応に伴 い発生する熱の分布を示しており、乱流運動によって変形を受けた乱流火炎では、火炎面に沿って 大きな変動を有していることがわかる。図中に示した断面内には温度の分布が示されており、図中 の奥が 700K であり、前方が 2000K である。この急激な温度上昇により、雲のように描かれている 渦構造は即座に消滅する。この DNS は、約2 億 2 千万点の格子点、総主記憶約 250GB を用いて実行 されている。計算にはすでに1年以上を要している。

6. まとめ

本稿では,近年東京大学情報基盤センターの SR8000/MPP 及び SR11000 を用いて行われている乱 流熱物質輸送の超大規模 DNS について簡単に説明した。このような大規模 DNS で得られる詳細な結 果は実験では取得不可能であり,今後この分野の研究の進展に貢献するものと期待される。