

jh180062

## 複雑流動場における物質移行過程の解明を目指した大規模数値計算 ：実験計測データとの比較による数値モデルの構築

恒吉 達矢 (名古屋大学)

概要 OpenFOAM を用いて、エルボ管流れを対象に、異なるプラントル数条件における温度場計算を含む large eddy simulation を行った。高プラントル数条件における温度場の解像のために、数億セルのメッシュを使用した。同一の流動場を対象に温度場計算を行うことで、熱伝達現象のプラントル数依存性が明確となった。

### 1. 共同研究に関する情報

#### (1) 共同研究を実施した拠点名

名古屋大学情報基盤センター

#### (2) 共同研究分野

□ 超大規模数値計算系応用分野

#### (3) 参加研究者の役割分担

恒吉達矢(名大) 大規模計算と研究総括  
辻義之(名大) 化学実験の遂行とデータ処理  
片桐孝洋(名大) 計算効率の高度化  
高橋一郎(名大) 大規模データの可視化  
Ali Mehrez(名大) 計算データの統計処理

### 2. 研究の目的と意義

本研究では、エルボ管流れ等の複雑流動場における、熱や物質のスカラ輸送の過程を解析するための数値計算を実施する。注目するパラメータはスカラ場の拡散係数である。同じ配管要素における同様の複雑流動であっても、拡散係数が異なると形成されるスカラ場や輸送過程には違いが生じるものと考えられる。本計算では、スカラ場の無次元拡散係数(プラントル数、シュミット数)をおおよそ  $10^{-2}$  から  $10^2$  の範囲で変化させ、スカラ場の拡散係数の違いが壁面の伝達現象に及ぼす影響を明らかにし、室内実験との比較を通じて工学的知見の充実を目的とする。

流体中の熱や物質の拡散係数は、作動流体や輸送される物質により大きく異なる。平行平板間乱流のように比較的単純な流路形状に関しては、スカラ輸送に対する拡散係数依存性が判明してい

る。しかし、複雑流動場を対象とした場合に、スカラ場の拡散係数をパラメータとして流動構造との間にどのような複合的效果が表れるかは未知である。本研究では、実験的手法では実現不可能な、完全に同一な複雑流動場を対象として、拡散係数の異なるスカラ場を同時に計算し解析を実施する。また、本研究では、スカラ場の無次元拡散係数が数値計算よりもさらに高い条件における測定実験を行う。本研究の特徴として、実験と数値計算を比較することで、相補的に結果を検証しながら、より広い範囲で拡散係数の影響について考察を深める。拡散係数による輸送過程の差異を明らかにすることは、乱流スカラ輸送の効率的な利用や制御といった工学応用にひろく寄与するものと期待される。

### 3. 当拠点公募型共同研究として実施した意義

流体運動で生じる最小渦スケール  $\eta$  に対して、高プラントル数条件における温度変動の最小スケール  $\eta_s$  はプラントル数  $Pr$  を用いて  $\eta_s = \eta / Pr^{1/2}$  と表わされる。そのため、高プラントル数条件の温度場計算において、高い計算精度を維持するためにはメッシュ数を相応に増加させる必要がある。プラントル数を  $10^2$  程度まで増加させた場合、温度場計算に十分な解像度を与えるためには、おおよそヘキサメッシュで数億セルが要求される。

本研究では、数億規模のメッシュを使用した大規模な流体計算を実施するために、オープンソースコードである OpenFOAM を用いる。名古屋大

学の Fujitsu PRIMERGY CX400 は OS が Red Hat Enterprise Linux であり、STAR-CCM+等のアプリケーションソフトの運用実績がある。汎用的なソフトの使用を前提としながら、高い計算能力を必要とした際に最適といえる。また、名古屋大学情報基盤センターは OpenFOAM の利用を推進しており、本研究の実施に適している。

流体の数値計算ではプリポスト処理において、大容量のメモリを必要とする。また、3次元空間において種々のスケールからなる複雑な流動構造を理解するためには、適切な可視化が必要となる。大規模共有メモリシステムの SGI UV2000 ならびに高精細 (8K 解像度) ディスプレイシステムを有し、高度な可視化技術をもつ名古屋大学情報基盤センターは本研究の実施に適している。

#### 4. 前年度までに得られた研究成果の概要

特記事項なし

#### 5. 今年度の研究成果

##### 5.1 最新版 OpenFOAM を用いた並列計算

今年度の研究開始時に取得可能な OpenFOAM の最新版のソースコード (OpenFOAM-v1712<sup>1)</sup>) を用いてコンパイルを行った。コンパイラは gcc.4.8.5 を使用した。並列計算のためのライブラリは intel MPI (5.0.3.049, 後に 2018.5.274) を用いた。コンパイル時には、数億規模のメッシュに対応するために、メッシュのインデックスラベルを 64bit とするオプションを設定している。

著者らの既往研究では、OpenFOAM-2.2.1 と intel MPI 4.1 を用いた数値計算を実施している。計算機は名古屋大学の CX400/2550 を用いた。CX400/2550 は 1 ノードに 14 コアの CPU が 2 つ搭載されている。OpenFOAM-2.2.1 と intel MPI 4.1 を用いた計算では、1 ノードあたりの並列数が 1CPU 分の 14 を超えると並列化効率の著しい低下がみとめられた。OpenFOAM-v1712 とバージョンが 5.0 以降の intel MPI を用いることで、1 ノードあたりの並列数を 2CPU 分の 28 まで増やしても、並列化効率の極端な悪化がないことを確認

した。これは、OpenFOAM を用いて、並列数が 1000 を超える規模の大規模計算をするうえで有益である。

2018 年 10 月に Intel MPI 2018 が名大スパコンシステムに導入されたため、OpenFOAM-v1712 で使用する MPI ライブラリを intel MPI 5.0 から Intel MPI 2018 に切り替えた。その結果、並列化効率の向上はわずかであったが、並列計算時の安定性は大幅に改善された。intel MPI 5.0 を使用時は、幾度か計算エラーによるジョブの終了がみられた。メッシュを数百万セルから数千万・数億セル規模に増やした場合や、統計処理のための変数定義を追加した場合に、エラーが表れる頻度が増加した。エラーの発生は、並列計算時の通信コストの増加となんらかの関係が推測されるが詳細は不明である。Intel MPI のバージョンを 2018 に更新してからは、同様の計算エラーは発生していない。

##### 5.2 乱流モデルのカスタマイズと検証

本研究では、流動場中の大きな渦構造はメッシュで直接的に計算し、メッシュサイズ以下の渦の影響はモデル化して反映する large eddy simulation (LES) という計算手法を用いる。LES の乱流モデルは種々提案されているが、非一様な流動場を計算対象とする場合には、モデル係数が局所的な流動場の性状に応じて決定されるモデルが望ましい。

OpenFOAM-2.2.1 を用いた既往研究では、乱流モデルとして上記の要求を満たす動的 Smagorinsky モデル (Germano et al.<sup>2)</sup>) を適用した。本研究で用いる OpenFOAM-v1712 では、Germano らの動的 Smagorinsky モデルはソースコードから外れており、乱流モデルとして選択できなくなっている。そこで、Germano らのモデルを自作コードで作成し、OpenFOAM のユーザーライブラリに追加した。OpenFOAM-v1712 では、乱流モデルのオブジェクトの階層構造として、非圧縮性流体と圧縮性流体の区別なく乱流モデルのコードが書かれているが、追加した動的

Smagorinsky モデルは非圧縮性流体のみでの使用を前提として作成した。典型的な壁乱流である平行平板間のチャンネル流れを対象に、モデルのコーディングの検証を行った。

チャンネル乱流の LES の計算条件を表 1 に、計算領域の概要を図 1 に示す。摩擦レイノルズ数は  $Re_\tau = 400$  とした。メッシュのセル幅  $L$  は、摩擦速度を用いた無次元数  $L^+$  で表した場合に、流れ方向が  $L_x^+ = 80$ 、壁垂直方向の  $L_y^+$  が 1~8、スパン方向が  $L_z^+ = 40$  とした。

図 2 に壁垂直方向の流れ方向平均流速分布を示す。OpenFOAM-v1712 において独自に追加した動的 Smagorinsky モデルを用いて、2.2.1 の場合とほとんど差異のない速度分布を得ることができている。図 3 に壁垂直方向の応力分布を示す。粘性応力  $\tau_{vis}$ 、グリッドスケールのレイノルズ応力  $\tau_{GS}$ 、サブグリッドスケールのレイノルズ応力  $\tau_{SGS}$ 、そして応力の和  $\tau_{total}$  の分布についてバージョンによる違いはみられない。乱流モデルで計算している成分  $\tau_{SGS}$  の応力に占める割合は最大でも数パーセント程度である。図 4 に  $\tau_{SGS}$  の分布を比較した図を示す。v1712 と 2.2.1 で計算した結果はよく一致している。コードの追加により、Germano らの動的 Smagorinsky モデルを v1712 においても使用可能であることが確認できた。

表 1 チャンネル流れの計算条件

Turbulent model (OpenFOAM version)	Dynamic Smagorinsky (v1712) Dynamic Smagorinsky (2.2.1)
Solver	pimpleFoam
Time integration	Implicit unsteady
Transient term	2nd-order backward
Convection term	2nd-order central
Diffusion term	2nd-order central

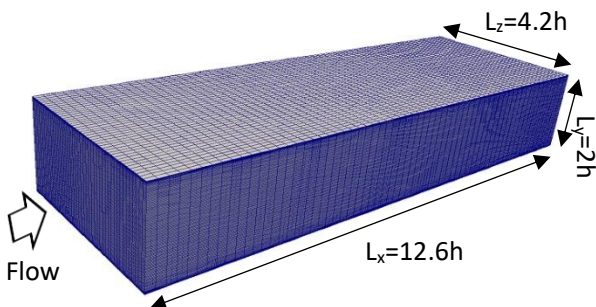


図 1 チャンネル流れの計算領域概要

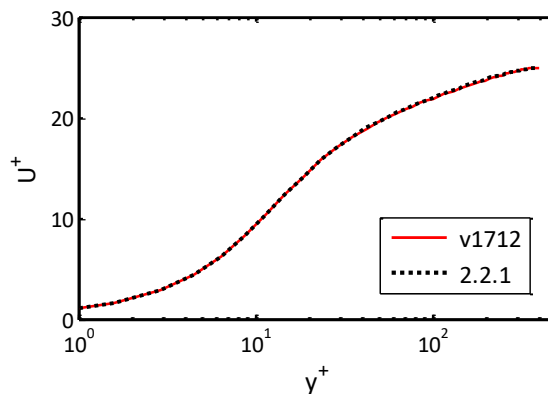


図 2 流れ方向流速分布

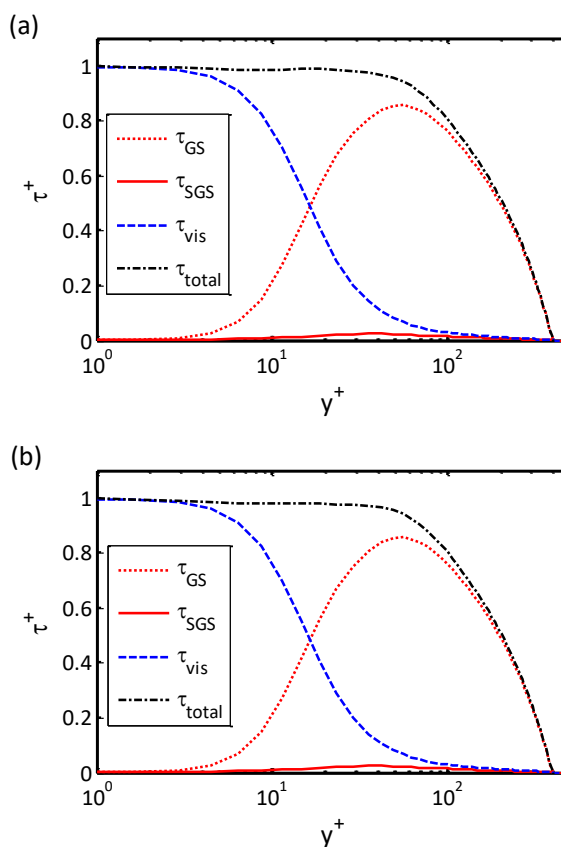


図 3 応力分布 (a)v1712 (b)2.2.1

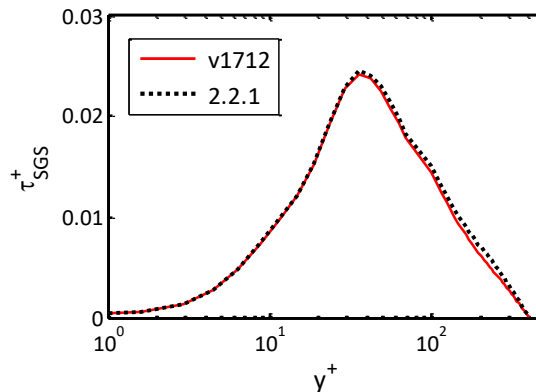


図 4 サブグリッドスケール応力分布

### 5.3 温度場計算ソルバの作成

OpenFOAM の標準的なソルバである `pimpleFoam` をベースとして、単一流動場を対象に、異なるプラントル数の温度場を同時に計算するソルバを作成した。ここで、温度場はパッシブスカラー場として定義している。温度場計算におけるサブグリッドスケールの渦拡散係数は、乱流プラントル数に基づく代数方程式モデルとした。ここで、計算の安定性のために、流体の熱伝導率と渦拡散係数の和として定義される実効拡散係数が負値をとらないように制限を設けた。

### 5.4 エルボ管流れの数値計算

エルボ管流れを対象に、流動場および異なるプラントル数の温度場の数値計算を実施した。エルボ管流れの LES の計算条件を表 2 に示す。LES の乱流モデルは上述の通り動的 Smagorinsky モデルを用いた。管直径  $D$  および断面平均流速  $V_{z0}$  を用いて定義されるレイノルズ数  $Re$  は 15000 とした。プラントル数は、最も低い条件で  $Pr = 1/64 = 0.015625$ 、最も高い条件で  $Pr = 64$  の範囲において 8 条件を設定した。

計算領域の概要を図 5 に示す。エルボ管の形状は、曲り中心から管軸中心までの距離で定義される曲率半径が  $R_c = 1.5D$  の 90 度エルボである。計算領域は、エルボの上流側および下流側に  $6D$  の長さを設定した。入口には `mappedPatch` という境界条件を用いて、下流方向長さ  $4D$  の位置の断面における物理量を参照して入口境界の値を定めている。これにより、入口から下流方向長さ  $4D$  の区間は発達乱流を生成するドライバーとして機能する。温度場計算の境界条件は、プラントル数の違いによらず、入り口での断面平均温度を 300 K、壁面を 310 K の等温加熱条件とした。

統計処理時間  $t$  は、乱流の初期発達を除いた 2 秒から 12 秒までの 10 秒間とした。これは、 $V_{z0}t/D = 66$  であり、計算領域を断面平均流速で 5 回程度流下するのに要する時間である。時間平均値に関しては、`functionObjects` の `fieldAverage` を用いて取得した。スカラー輸送の詳細な解析のため

表 2 エルボ管流れの計算条件

Turbulent model	Dynamic Smagorinsky
Solver	Modified pimpleFoam
Time integration	Implicit unsteady
Transient term	2nd-order backward
Convection term	2nd-order TVD
Diffusion term	2nd-order central
Kinematic viscosity	$\nu=1.0 \times 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$
Reynolds number	$Re=1.5 \times 10^4$
Prandtl number	$Pr=0.015625, 0.04, 0.2, 0.71, 1, 5, 25, 64$
Inlet	Fully developed
Outlet	Constant total pressure
Wall	Non slip

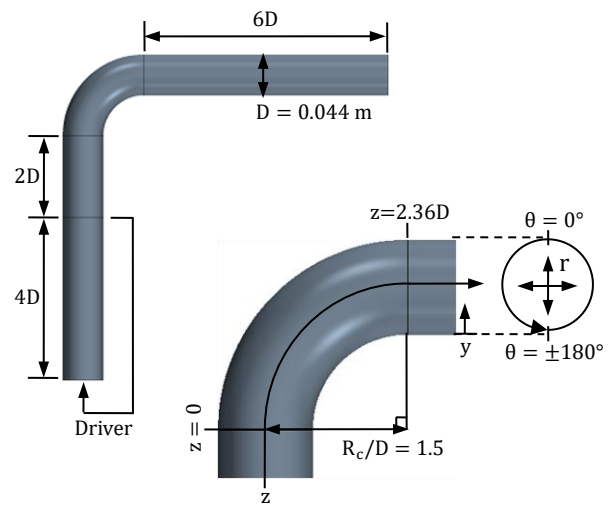


図 5 エルボ管流れの計算領域

には、時系列データの取得も必要である。計算領域全体の全セルを対象とすると膨大なデータ量となるため、管軸を含む垂直断面やエルボ出口等の円管断面、壁面隣接セルといった特定のセルを選別してデータの出力を行った。セルの指定は `cellZone` によって定義することで可能である。既往研究で使用した OpenFOAM-2.2.1 では、`functionObjects` の `cellSource` を用いることで、任意の時間に、特定セルのデータを出力することができた。 `cellSource` は体積平均値等を算出する処理系であるが、対象のセル群の値を直接的に出力する機能も含まれている。OpenFOAM-v1712 では `cellSource` の処理機能は `volFieldValue` に引き継がれているが、対象とするセル群の直接的な値の出力はできなくなっている。そこで、データ出力の形式を定めている `volFieldValueTemplates` の一部を

変更することで、旧来の `cellSource` と同様に対象セル群の値を出力する機能を設定した。本計算では、`cellZone` で定義したセルを対象に、時間間隔 0.001 秒毎に出力し、時系列データを構築した。

### 5.5 エルボ管 LES のメッシュと領域分割

メッシュはマルチブロック法を用いて全領域を 6 面体セルで切っている。円管断面におけるメッシュを図 6 に示す。熱伝達現象の計算精度を向上させるために、壁面近傍において周方向にメッシュの細分化を行っている。メッシュ数は、円管断面において約 14 万セル、計算領域全体で約 4.7 億セルである。はじめに、円管入り口において奥行 1 セルの疑似 2D メッシュを作成し、OpenFOAM のメッシュ操作の `extrudeMesh` を用いて流れ方向に 3 次元化した。セルサイズ  $L$  は円管発達乱流における摩擦速度  $u_\tau$  を用いた無次元数  $L^+$  で表した場合に、壁垂直方向が 0.12 から 1.1, 周方向が 1.2, 流れ方向が 3.7 である。これは、プラントル数が最も高い  $Pr = 64$  の温度場計算において、相対的なセルサイズ  $L^{++}(= \sqrt{Pr}L^+)$  で表した場合に、壁垂直方向が 1.0 から 8.8, 周方向が 10, 流れ方向が 30 となるようにしている。



図 6 円管断面におけるメッシュ

OpenFOAM では並列計算のために、計算領域を空間的に分割する必要がある。メッシュ数が数億セル、並列数が 1000 を超える規模になると、Scotch ライブラリ等を用いた自動領域分割では、分割された領域間のフェイス数や、1つの分割領域に接続する他の分割領域の数が増加し、並列化

効率が大幅に低下する。そこで、本研究では、`cellDecomposition` ファイルを用いて各セルの `processor` 番号を明示して領域分割を実行した。具体的には、図 7 に示すように、円管断面において 56 分割し、これを流れ方向に 32 分割することで全領域を 1792 分割とした。領域分割を手動で行うことにより、分割領域間のフェイス数や接続する分割領域の数を抑制し、並列化効率の向上を図った。メッシュ作成および領域分割には、200GB を超えるメモリが必要となったため、大規模共有メモリシステムの SGI UV2000 を使用した。

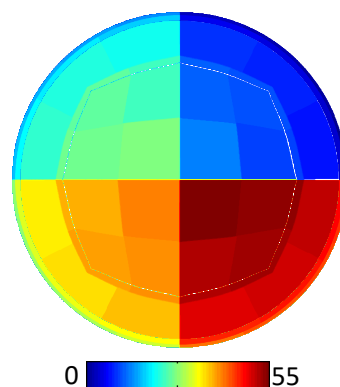


図 7 円管断面における領域分割番号

### 5.6 エルボ管流れにおける温度場

図 8 に管軸を含む垂直断面における瞬時の温度場を示す。瞬時温度  $\theta_t$  はバルク温度  $\theta_{tb}$  との差を取り、壁面とバルクの温度差  $(\theta_{tw} - \theta_{tb})$  により無次元化している。ここで、バルク温度  $\theta_{tb}$  は、流れ方向位置  $z$  が同一の円管断面内における時間平均温度の最低値として定義している。図 3 には、本計算において最も低プラントル数条件である  $Pr = 1/64 = 0.015625$ , および、最も高プラントル数条件である  $Pr = 64$ , そして  $Pr = 1$  の場合の結果を示している。プラントル数の違いにより、形成される温度場は大きく異なることがわかる。低プラントル数条件では、速度境界層よりも温度境界層が厚くなる関係から、エルボの背側と腹側の両側から大きな温度変化が生じている。エルボ内で腹側から剥離した流れは、エルボ出口付近では背側への強い偏流となる。この偏流により、低プラントル数条件の温度場においても低温のバルク流体が

壁面近傍まで及び、温度境界層が薄くなっていることがわかる。  $Pr = 1$  の場合は、低プラントル数条件よりも温度境界層が薄くなり、バルク温度の変化も小さい。ただし、エルボ腹側の剥離流れの後流においては、温度が大きく上昇している。また、エルボ出口から下流にかけて腹側の広い範囲で温度の上昇が確認できる。高プラントル数条件になると、温度変化はさらに小さくなる。  $Pr = 64$  の場合は、剥離点の下流側の比較的剥離点に近い範囲では温度の上昇が確認できるが、エルボ出口周辺の温度変化はわずかである。ただし、(d) の上限値を  $1/Pr^{1/2} = 0.125$  に制限した場合のコンターをみると、高プラントル数条件では温度上昇は減少するが、温度変化の分布傾向は  $Pr = 1$  の場合とほとんど同一であることがわかる。温度の変化量はプラントル数に依存するが、温度の分布傾向は流動場によって一意に定まっている。

### 5.7 エルボ管における熱伝達率の $Pr$ 数依存性

図 9 に時間平均した壁面の熱伝達率  $h$  を示す。壁面は展開図で示しており、横軸が流れ方向位置、縦軸が周方向位置である。図 10 にはエルボの背側と腹側における熱伝達率の分布を示す。流れ方向位置は、エルボ入り口を  $z = 0$  としており、  $z/D = 2.36$  がエルボ出口である。熱伝達率  $h$  の値は、ドライバー部の円管発達乱流における熱伝達率  $h_0$  で無次元化しており、ここでは  $h/h_0$  を形状係数と呼ぶことにする。エルボ管壁面における形状係数の分布は、プラントル数により大きく異なることがわかる。低プラントル数条件においては、エルボの背側で顕著に形状係数が大きくなっている。低プラントル数条件では本来は厚く温度境界層が形成されるが、エルボ背側出口周辺においては強い偏流が生じており、温度境界層が非常に薄くなった結果、形状係数が増加したと考えられる。プラントル数が大きくなると、背側の形状係数は減少する傾向を示している。背側とは反対に、腹側ではプラントル数が高くなるとともに、形状係数の増加が確認できる。エルボ腹側出口周辺は、剥離した流れの後流にあたり、エルボ管内で生じた巡回

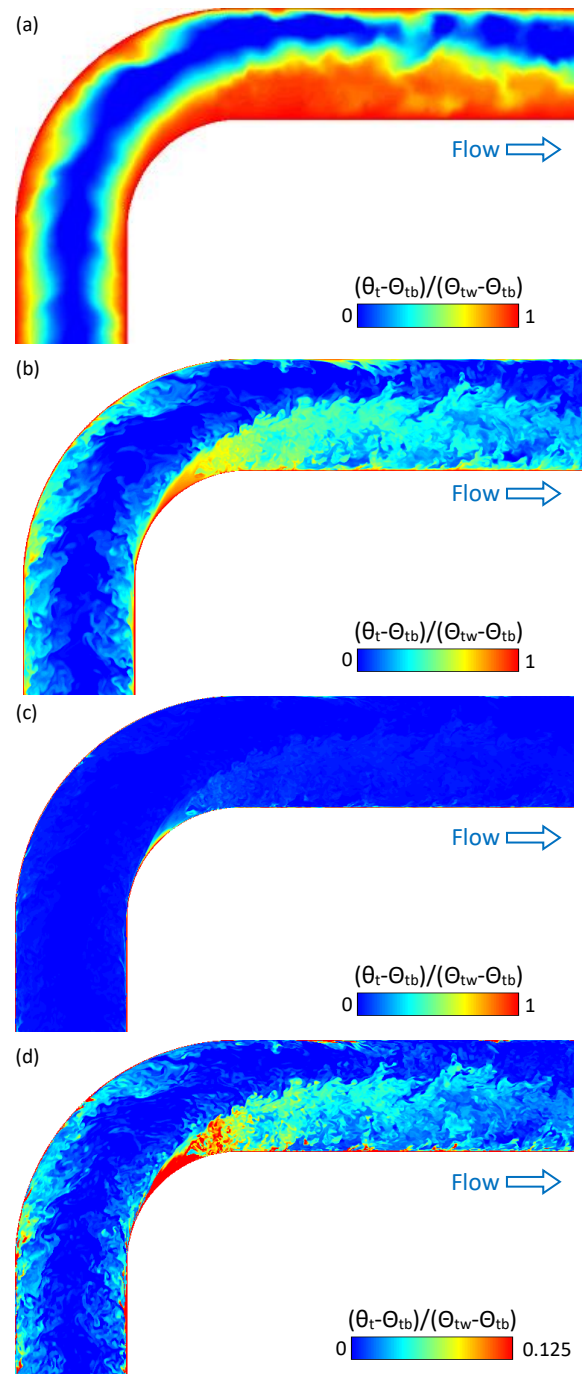


図 8 エルボ管流れにおける瞬時の温度場  
(a)  $Pr = 1/64$ , (b)  $Pr = 1$ , (c)  $Pr = 64$ ,  
(d)  $Pr = 64$  (コンター上限値:  $1/Pr^{1/2}$ )

流が壁面に沿って左右から流れ込む。そのため、平均流速は小さいが、非定常性が強い流れ場となっている。この流動場の変動が、乱流熱輸送を促進しており、形状係数増加の要因になっていると考えられる。

背側と腹側の形状係数の極大値を比較すると、低プラントル数条件では背側の値の方が高く、

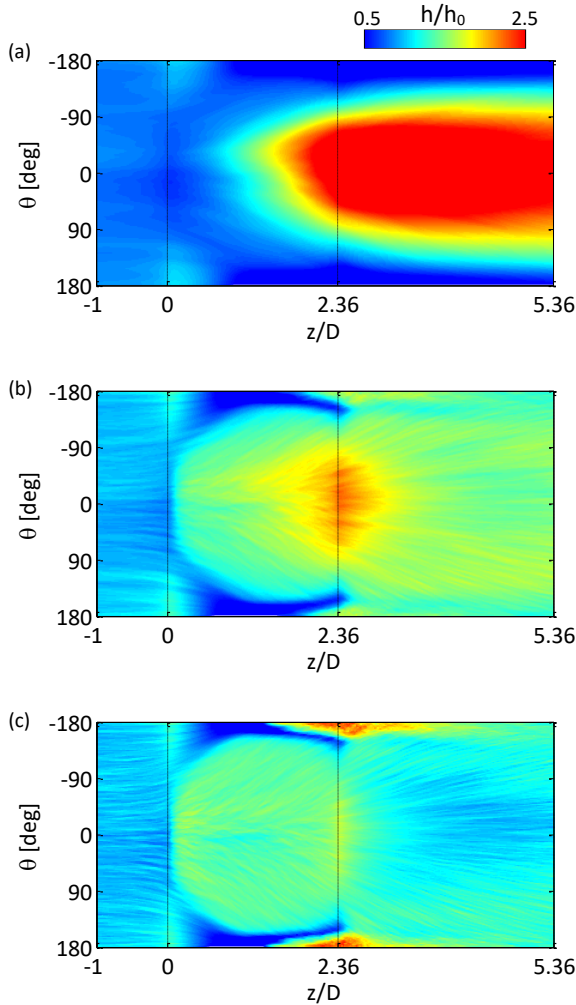


図9 エルボ管流れにおける壁面の熱伝達率  
(a)  $Pr = 1/64$ , (b)  $Pr = 1$ , (c)  $Pr = 64$

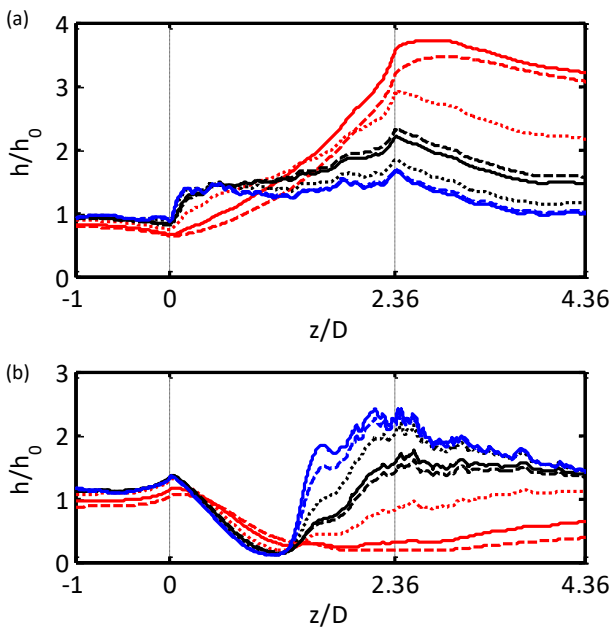


図10 (a)背側と(b)腹側における熱伝達率の分布  
---:  $Pr = 1/64$ , —:  $1/25$ , .....:  $1/5$ , ---:  $0.71$ , —:  $1$ ,  
.....:  $5$ , ---:  $25$ , —:  $64$

$Pr = 1$  の場合は同程度となり、高プラントル数条件では腹側の値の方が高くなる。低プラントル数条件では壁面近傍のせん断流の強さが熱伝達の増加に影響し、高プラントル数条件では流動場の乱れの強さが熱伝達を促進する働きをされると考えられる。

#### 参考文献

- 1) OpenCFD, OpenFOAM: The open source computational fluid dynamics(CFD) toolbox, available from <<http://www.openfoam.com>>, (参照日 2018 年 2 月 1 日).
- 2) Germano, M., Piomelli, U., Moin, P. and Cabot, W. H., A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model, Physics of Fluids A, Vol.3, No.7 (1991), pp.1760-1765.

#### 6. 今年度の進捗状況と今後の展望

OpenFOAM を用いた大規模な流体計算の環境構築を行い、エルボ管流れを対象とした LES を実施した。同一の流動場を対象に、異なるプラントル数条件で温度場計算を行うことにより、複雑流動場におけるプラントル数に依存した壁面の熱伝達の差異を明らかにした。OpenFOAM に備わるポスト処理機能に変更を加え、注目する特定セルの出力を行い、時系列データを構築した。今後、構築した時系列データを対象として、スカラー輸送過程の詳細な解析を行う予定である。また、時間長を限定して全領域のデータを出力して可視化を行うことにより、3 次元的な複雑流動とスカラー輸送の特性について考察する。

数値計算だけでなく、壁面の伝達現象を比較するための電気化学実験に関しても、測定データの解析を進めており、拡散係数がスカラー輸送に及ぼす影響の解明を目指す。

#### 7. 研究成果リスト

特記事項なし