

平成22年度名古屋大学 HPC 計算科学連携 研究プロジェクト成果報告書

研究課題名：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

研究代表者：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）

燃焼，プラズマ，熱対流，雲物理などの複雑流動現象において，乱流の果たす役割の定性的および定量的理解が必要となってきた。それら複雑流動現象の解明には，近年発展が著しいスーパーコンピュータを駆使した大規模な直接的数値計算が非常に有効である。そこで本研究では，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した。特に，周期境界条件下の乱流や平行平板間乱流など，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，プラズマ，熱対流，雲物理などの大規模計算を実現するための FX1 用コードの開発を実施した。具体的には，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二次元及び三次元乱流燃焼用コード，2. 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，3. 熱対流乱流の直接数値計算コード，の開発および計算結果の検証を行った。

1については，既に関済済みの N へプタンの簡略化学反応メカニズムを用いた二次元乱流燃焼用コードをベースに，（1）水素やメタンなど様々な燃料に対する化学反応メカニズムの市販ソフト（CHEMKIN）用入力ファイルを用いて，化学反応部分のコード生成が自動で行えるようにし，市販ソフト（CHEMKIN-PRO）を用いて，生成したプログラムの化学反応部分の結果検証を行った。（2）化学反応の部分の時間発展スキームを陽的なものから半陰的なものに変更し，化学反応が急激に進行する着火過程の計算を可能にすると同時に並列計算の効率化を実現した。（3）二次元計算結果の検証を様々な視点から行うとともに，温度場と渦度場の相関についての数値解析を実施した。また，（4）三次元乱流燃焼用コードを作成し，現在その計算結果を検証中である。

2については，ベクトル並列計算機（VPP5000）用に関済済みの，周期境界条件下の乱流中の流体粒子追跡コードをベースにし，（1）流体粒子のみならず，ストークス数（流れに対する追従性を表す無次元数）の異なる粒子追跡を可能にし，計算結果の検証といくつかの数値実験を実施した。（2）また，現在コードの MPI 化と高効率化を実施中である。

3については，フーリエ・チェビシェフタウ法を用いた平行平板間乱流のコードをベースにして，温度場の組み込みを行い，現在その計算結果を検証中である。