

二相系格子ボルツマン法の計算効率化の検討 (Building-Cube 法の適用)

Study of the efficiency of the lattice Boltzmann method for two-phase flows (application of Building-Cube method)

○福永剛史, 京大院, 京都市西京区京都大学桂 C3 棟, E-mail:fukunaga.masashi.73v@st.kyoto-u.ac.jp

稲室隆二, 京大院, 京都市西京区京都大学桂 C3 棟, E-mail:inamuro@kyoto-u.ac.jp

Masashi Fukunaga, Dept. Aeronautics and Astronautics, Kyoto University, Kyoto 615-8530, Japan

Takaji Inamuro, Dept. Aeronautics and Astronautics, Kyoto University, Kyoto 615-8530, Japan

We propose a method for applying the Building-Cube method (BCM) to the lattice Boltzmann method for two-phase flows in order to improve computation efficiency without lowering the computational accuracy. To verify the accuracy of the method, we simulate a stationary sphere droplet. The surface tension is linearly added, and we investigate the time evolution of the pressure inside the droplet. Consequently, we find that the proposed method is accurate and needs less computation time.

1. 緒言

気体と液体が入り混じった気液二相流は、空気中を落下する雨粒や牛乳が落下し跳ね返る際に観察されるミルククラウンのような身近な現象として存在する一方、液体燃料ロケットのエンジン内部で噴霧された燃焼液滴の挙動など、航空宇宙工学、機械工学、化学工学をはじめ、様々な理工学分野で重要な研究課題となっている。これらの現象の特徴には、気液界面が時々刻々複雑に変形すること、流動形式が多様であること、微小なスケールで高速な変形挙動をすることであるが、そのため、実験による解析が困難である場合が多く、数値解析の研究および手法の開発が盛んに行われている。

そのような気液二相流の計算手法の1つとして、近年、二相系格子ボルツマン法 (二相系 LBM) ⁽¹⁻⁴⁾ が注目されている。この手法は系の自由エネルギーを考慮することにより自律的に界面形状が求まるため、界面形状の時間変化を陽に追跡する必要がないこと、また、各相の質量保存性がよいこと、アルゴリズムが簡単であり並列計算に適しているといった利点を持っている。また昨年、当研究室の谷口ら ⁽⁴⁾ は、高密度比の二相流に対して精度よく計算できる二相系 LBM を提案した。しかしながら、今後より複雑な現象を精度良く計算していくためにより細かい格子を用いる必要がある。この時、全領域を等間隔に分ける格子では計算負荷が大きくなってしまふ。この問題を解決するために、様々な方法が提案されている。当研究室でも稲室ら ⁽⁵⁾ が格子ボルツマン法にマルチブロック格子を適用し、大幅に計算時間を短縮した。しかし、マルチブロック格子では複雑な形状に対して効率よく格子生成ができないなどの問題がある。

一方、等間隔直交格子を使った Building-Cube 法 (BCM) と呼ばれる新たな解適合格子作成方法が注目されている。⁽⁶⁾ BCM は計算領域を Cube と呼ばれる様々な大きさの立方体に分け、その Cube を Cell と呼ばれる等間隔かつ同じノード数の直交格子に分ける。この様々な大きさの Cube を使うことで物体近傍は細かい格子で物体から離れると粗い格子で計算が可能となる。1つの Cube 内でのノード数が等しいので計算負荷はすべての Cube で等しい。そのため、並列計算にも適している。また、Cube の組み合わせは自由に変更することが可能なので、様々な状況に適応することが可能である。

本研究では、アルゴリズムが簡単で並列計算に適している、高密度比でも精度よく計算できる谷口らの二相系 LBM⁽⁴⁾ に BCM を適用することで計算精度を低下させずに計算効率を向上させることを目的とする。

2. 数値計算手法

以下の物理量はすべて代表長さ L 、粒子の代表速さ c 、時間スケール $t_0 = L/U$ (U :流れの代表速さ) および代表密度 ρ_0 を用いて無次元化したものとする。本研究では谷口らの二相系 LBM⁽⁴⁾ を用いる。

2.1 二相系格子ボルツマン法

本手法では2つの局所平衡分布関数 f_i^{eq} および g_i^{eq} を用いて、界面を識別する関数であるオーダーパラメータ ϕ 、圧力 p および流速 \mathbf{u} を求める。時刻 t で格子点 \mathbf{x} 上の粒子速度 \mathbf{c}_i をもつオーダーパラメータ ϕ 、圧力 p 、流速 \mathbf{u} の時間発展を次式で計算する。ここでは密度 ρ 、粘性係数 μ を計算する方法についての説明は省略する。なお、密度 ρ 、粘性係数 μ の詳細な求め方は文献を参照されたい。⁽⁷⁾

$$\phi(\mathbf{x}, t + \Delta t) = \phi(\mathbf{x}, t) + \sum_{i=1}^{15} f_i^{\text{eq}}(\mathbf{x} - \mathbf{c}_i \Delta x, t), \quad (1)$$

$$p(\mathbf{x}, t + \Delta t) = p(\mathbf{x}, t) + \frac{\omega(\mathbf{x}, t)}{3} \times \sum_{i=1}^{15} [g_i^{\text{eq}}(\mathbf{x} - \mathbf{c}_i \Delta x, t) + \Delta P_i(\mathbf{x}, t)], \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{u}(\mathbf{x}, t + \Delta t) = & \sum_{i=1}^{15} \mathbf{c}_i [g_i^{\text{eq}}(\mathbf{x} - \mathbf{c}_i \Delta x, t) + \Delta P_i(\mathbf{x}, t + \Delta t)] \\ & + 3A_u E_i \mathbf{c}_i \cdot \{\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) - \mathbf{u}(\mathbf{x} - \mathbf{c}_i \Delta x, t)\} \\ & - \frac{1}{6} (1 - A_u) \varepsilon (\Delta x)^4 \nabla^2 (\nabla^2 \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)) \\ & + \frac{1}{\rho(\mathbf{x}, t)} \mathbf{F}_{sv}(\mathbf{x}, t), \end{aligned} \quad (3)$$

まず、2つの局所平衡分布関数は次のように表される。

$$\begin{aligned} f_i^{\text{eq}} = & E_i \left[p_0 - \kappa_f \phi \nabla^2 \phi - \frac{\kappa_f}{6} |\nabla \phi|^2 \right] \\ & + 3E_i \phi u_\alpha c_{i\alpha} + E_i \kappa_f G_{\alpha\beta}(\phi) c_{i\alpha} c_{i\beta}, \end{aligned} \quad (4)$$

$$g_i^{\text{eq}} = E_i \left[3u_\alpha c_{i\alpha} - \frac{3}{2} u_\alpha u_\alpha + \frac{9}{2} u_\alpha u_\beta c_{i\alpha} c_{i\beta} \right], \quad (5)$$

ここで、密度が異なる二相流に対する圧力の微分項 ΔP_i は以下のように表される。

$$\Delta P_i(\mathbf{x}, t) = \frac{3}{2} E_i \left[\frac{1}{\rho(\mathbf{x} - \mathbf{c}_i \Delta x, t)} + \frac{1}{\rho(\mathbf{x}, t)} \right] \times [p(\mathbf{x} - \mathbf{c}_i \Delta x, t) - p(\mathbf{x}, t)], \quad (6)$$

$$\left. \begin{aligned} E_1 &= 2/9, E_2 = E_3 = E_4 = \dots = E_7 = 1/9, \\ E_8 &= E_9 = E_{10} = \dots = E_{15} = 1/72, \\ F_1 &= -7/3, F_i = 3E_i (i = 2, 3, 4, \dots, 15), \end{aligned} \right\} \quad (7)$$

また,

$$p_0 = \phi T \frac{1}{1 - b\phi} - a\phi^2, \quad (8)$$

である。\$p_0\$ は二相を分離するための関数である。\$T, a, b\$ は \$\phi\$ の最小および最大値を決める任意の定数であり、\$\kappa_f\$ は界面厚さに関する定数である。

また、(3) 式中の \$A_u\$ は、動粘性係数を調整するパラメータであり、動粘度 \$\nu\$ と \$A_u\$ の関係は、

$$\nu = \frac{1}{6} (1 - A_u) \Delta x, \quad (9)$$

(2) 式中の \$\omega\$ は音速を調整するパラメータであり、次式より求められる。

$$\omega = 1 + \frac{\rho - \rho_G}{\rho_L - \rho_G} (\omega_{\max} - 1), \quad (10)$$

ここで、\$\rho_L\$ および \$\rho_G\$ はそれぞれ液相および気相の密度、\$\omega\$ の最大値である \$\omega_{\max}\$ は \$\rho_G \leq \omega_{\max} \leq \rho_L\$ を満たす定数とする。

なお、圧力 \$p\$ を求める際に数回程度の反復を行うことで、数値安定性を高めることができる。以下で、その手順を示す。

- (1) \$p_0 = p(\mathbf{x}, t)\$ とする。
- (2) 反復 \$(l+1)\$ 回目の圧力を次のように求める。

$$p_{l+1}(\mathbf{x}) = p_l(\mathbf{x}) + \frac{\omega(\mathbf{x}, t)}{3} \times \sum_{i=1}^{15} [g_i^{eq}(\mathbf{x} - \mathbf{c}_i \Delta x, t) + \Delta P_{i,l}(\mathbf{x}, t)], \quad (11)$$

ここで

$$\Delta P_{i,l} = \frac{3}{2} E_i \left[\frac{1}{\rho(\mathbf{x} - \mathbf{c}_i \Delta x, t)} + \frac{1}{\rho(\mathbf{x}, t)} \right] \times [p_l(\mathbf{x} - \mathbf{c}_i \Delta x) - p_l(\mathbf{x})], \quad (12)$$

そして反復を \$n\$ 回行う。

- (3) 次の時刻の圧力を \$p(\mathbf{x}, t + \Delta t) = p_n(\mathbf{x})\$ で求める。

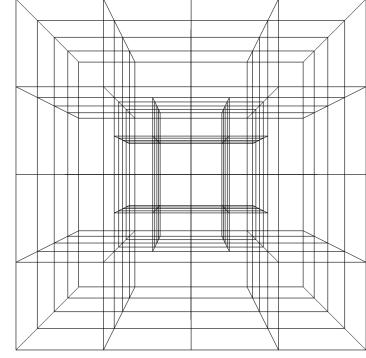
(3) 式中の \$\mathbf{F}_{sv}\$ は CSF モデルから導かれる界面張力 \$\sigma\$ に関する体積力である。

$$\mathbf{F}_{sv}(\mathbf{x}) = \sigma \kappa(\mathbf{x}) \frac{\nabla \rho(\mathbf{x})}{\Delta \rho}(\mathbf{x}) \frac{\rho(\mathbf{x})}{\bar{\rho}}. \quad (13)$$

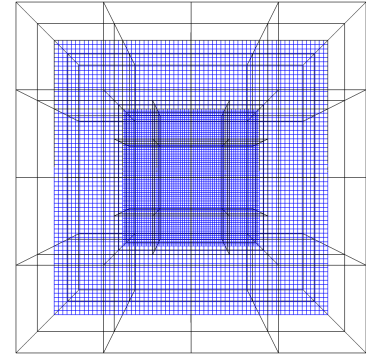
ここで、\$\bar{\rho} = (\rho_L + \rho_G)/2\$、\$\Delta \rho = \rho_L - \rho_G\$ である。また、\$\kappa\$ は曲率を表しており、次式で与えられる。

$$\kappa = -(\nabla \cdot \hat{\mathbf{n}}). \quad (14)$$

ここで、\$\hat{\mathbf{n}}\$ は法線方向の単位ベクトルを表しており、次式で与えられる。



(a) Cube allocation



(b) Cell distribution

Fig. 1 Mesh structure

$$\hat{\mathbf{n}} = \frac{\nabla \rho}{|\nabla \rho|}. \quad (15)$$

2.2 BCM を適用した二相系格子ボルツマン法

BCM は Fig.1 に表されるようにまず領域を異なる大きさの Cube に分ける。そして、その Cube 内を Cell に分けることで高解像度格子と低解像度格子を生成することができる。BCM の特徴⁽⁶⁾として

1. 複雑な形状に適用可能
2. 様々な大きさの格子を作成することが可能
3. 並列計算に使用可能
4. 後処理が簡単に行える

などがある。

ここで、BCM を二相系 LBM に適用するとき以下の 2 つの条件を満たす必要がある。高解像度格子 (fine) サイズと低解像度格子 (coarse) のサイズをそれぞれ \$\Delta x_f\$、\$\Delta x_c (= 2\Delta x_f)\$ とする。

1. 全ての Cube において粒子速度が等しくならなければならない。そのため、fine および coarse における時間刻みをそれぞれ \$\Delta t_f\$、\$\Delta t_c\$ とするとそれぞれの格子サイズと時間刻みは以下の関係を満たさなければならない。

$$\frac{\Delta x_f}{\Delta t_f} = \frac{\Delta x_c}{\Delta t_c}. \quad (16)$$

2. 全ての Cube におけるレイノルズ数が等しくならなければならないので、動粘性係数 \$\nu\$ を一定にしなければならない。(9) 式より、fine および coarse における \$A_u\$ をそれぞれ \$A_u^f\$、\$A_u^c\$ とすると、これらは以下の関係式を満たさなければならない。

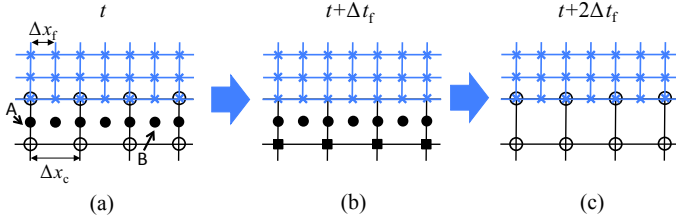


Fig. 2 Calculation method in the case of different cube size.

$$\frac{1}{6} (1 - A_u^f) \Delta x_f = \frac{1}{6} (1 - A_u^c) \Delta x_c. \quad (17)$$

次に、Cube 間の巨視量の受け渡しについて説明する。(1)-(3)式からわかるように、次の時刻の巨視量の値は周囲の格子点の値から求まる。そのため、各 Cube の境界上の格子点では、次の時刻の巨視量の値を全て求めることはできない。そこで、各 Cube の境界上の巨視量を求めるために、隣りの Cube で求められる値を受け渡す。

受け渡し方法は以下の3つである。(1) 同じ解像度の場合、受け渡すべき格子が存在するので、存在する格子から受け渡す。解像度が異なる場合、(2) fine から coarse は、受け渡す格子が存在するので、存在する格子から受け渡す。(3) coarse から fine は、時刻 t において coarse の巨視量の値から内挿して受け渡す巨視量の値を準備する。内挿の方法は2種類ある。1つ目は Fig.2 の (a) の ● の A のように coarse が存在するグリッド上の場合、● の A を挟む2点の平均から求める。2つ目は Fig.2 の (a) の ● の B のように coarse が存在しないグリッド上の場合、● の B を囲む4点の平均から求める。次に、時刻 $t + \Delta t_f$ において fine の周りの点を準備する。時刻 t , $t + 2\Delta t_f$ における coarse の巨視量の値の平均から Fig.2 の (b) の ■ の値を求める。そして、時刻 $t + \Delta t_f$ における coarse の巨視量の値を内挿して Fig.2 の (b) の ● の点の値を準備し受け渡す。

2.3 計算手順

提案手法による計算手順を以下に示す。計算は Cube ごとに行い、必要に応じて巨視量の値の受け渡しを行う。ここでは Cube の大きさが Fig.1 のように2段階の場合を説明する。各巨視量の上付き文字はそれぞれ f は fine を c は coarse の値を表す。

1. 時刻 t において Cube 境界で Fig.2 の (a) のように巨視量の値を受け渡す。
2. (1) 式から $\phi^f(\mathbf{x}, t + \Delta t_f)$, $\phi^c(\mathbf{x}, t + \Delta t_c)$ を求める。
3. (11) 式と (12) 式から圧力 $p^f(\mathbf{x}, t + \Delta t_f)$, $p^c(\mathbf{x}, t + \Delta t_c)$ を求める。
4. (3) 式から $\mathbf{u}^f(\mathbf{x}, t + \Delta t_f)$, $\mathbf{u}^c(\mathbf{x}, t + \Delta t_c)$ を求める。
5. Fig.2 の (b) のように fine について情報の受け渡しを行う。
6. 時刻 $t + 2\Delta t_f$ において fine の巨視量を手順 2 から 4 までの作業を行い求める。
7. $t = t + 2\Delta t_f$ として、Step1 に戻る。

Cube の段階を増やしても、以上の組み合わせを増やしていくことで計算可能である。なお、手順 3 の圧力計算における反復は数回程度 (以下の数値計算例では $n = 2$ である) で済むことに注意されたい。

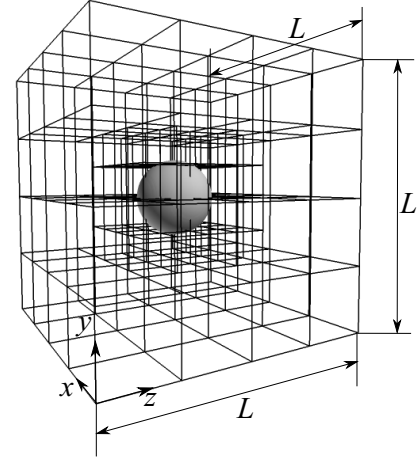


Fig. 3 Computational domain for a stationary droplet.

Table. 1 Cell distribution per 1 cube and Cube number.

	Fine	Coarse
Cell distribution	$(16 \times \Delta x)^3$	$(16 \times 2\Delta x)^3$
Cube number	64	56

3. 数値計算例

本手法の精度検証および効率化検証として、静止液滴の計算を行った。まず、谷口らの二相系 LBM に計算領域を全て細かい (Uniform) 格子で計算した結果と Fig.3 に示すような BCM 格子で計算した結果を示す。また、最後に計算時間の比較を行う。

3.1 計算条件

今回用いる BCM 格子は Fig.3 に表すような2段階の格子を用いる。fine の格子サイズを Δx , coarse の格子サイズを $2\Delta x$ とする。一辺 $L = 128\Delta x$ の立方体領域の中心に、直径 $D = 40\Delta x$ の静止液滴を配置する (Fig.3)。計算領域の外側の境界条件は全て鏡面境界とする。液滴および気体の密度は、それぞれ $\rho_L = 800$, $\rho_G = 1$ とし、液滴および気体の粘性係数は、それぞれ $\mu_L = 8.0 \times 10^{-1}\Delta x$, $\mu_G = 1.6 \times 10^{-2}\Delta x$ とする。界面識別関数の計算におけるパラメータは $T = 2.93 \times 10^{-1}$, $a = 1$, $b = 1$, $\kappa_f = 0.06(\Delta x)^2$ とし、このとき、界面識別関数 ϕ の最大値および最小値はそれぞれ $\phi_{\max} = 4.031 \times 10^{-1}$, $\phi_{\min} = 2.638 \times 10^{-1}$ となる。界面張力を $\sigma = 1.20 \times 10^{-2}\Delta x$ として、5000 から 15000 ステップにかけて線形的に印加した。また、計算では反復回数は $n = 2$ かつ $\omega_{\max} = 200$, 計算の安定性に関するパラメータは $\epsilon = 1.0(\Delta x)^4$ とした。

BCM での立方体領域、直径の大きさは Uniform の格子と同じ寸法である。BCM 格子情報の詳細を Tab.1 にまとめる。

3.2 結果および考察

Uniform 格子と BCM 格子を用いて計算した圧力分布を Fig.4 に示す。圧力分布は液滴中心を通る軸のうち $(x, y, z) = (1, 0, 0)$ 方向の軸上で求めた圧力分布を示している。この図から、Uniform 格子と BCM 格子の結果で良好な一致がみられる。

次に、Uniform 格子と BCM 格子で計算した結果とラプラス則から求められる結果を比較する。静止している液滴の内部と外部では、界面張力により圧力差 Δp_0 が生じる。 Δp_0 は、界面張力の大きさ σ および液滴半径 R と次式の関係にある (ラプラス則)。

$$\Delta p_0 = 2 \frac{\sigma}{R}. \quad (18)$$

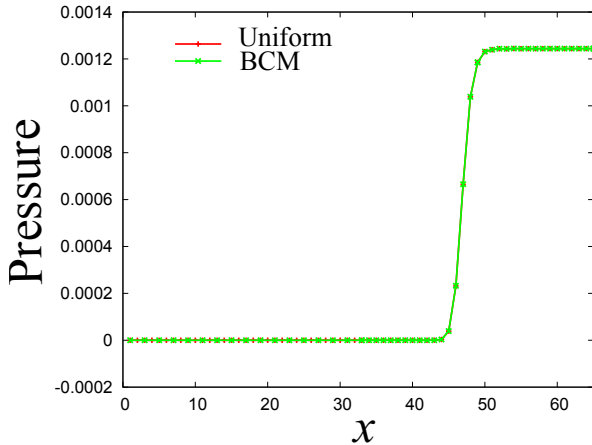


Fig. 4 Pressure distribution in (1,0,0) direction through the droplet center at 20000 step by uniform grid and BCM grid.

Table. 2 Computation time and node information about uniform grid and BCM grid.

	BCM	Uniform
Computation time[min]	186	301
Node number	589,560	2,146,689
Node number with buffer region	1,111,320	2,352,637

計算により求められる圧力差 Δp とラプラス則から求められる圧力差 Δp_0 との誤差 Error を求める.

$$\text{Error} = \frac{|\Delta p_0 - \Delta p|}{\Delta p_0}$$

計算により求められる圧力差は、界面識別関数 ϕ の最大値となる点の圧力と最小値となる点の圧力の差で表している。ここで、計算された圧力差 Δp と、(18) 式により理論圧力差 Δp_0 を求める際に用いる半径および界面張力は、15000 から 20000 ステップの平均をとっている。半径および界面張力は x 軸に平行な軸上で求めた値を用いる。ラプラス則との誤差 Error は Uniform 格子、BCM 格子のどちらでも約 1% 程度である。このことより、BCM 格子で計算を行った場合でも計算全領域で精度低下させることなく計算可能であることがわかる。

さらに、計算時間の比較を行った結果を Tab.2 に示す。計算時間は Uniform 格子、BCM 格子ともに並列計算をせずに同じ計算機により 20000 ステップまでの時間である。Tab. 2 から BCM を適用することで計算時間が約半分になっていることがわかる。これは、Tab.2 のノード数を比較すると、BCM を適用することで計算ノード数が減少したことが原因だと考えられる。しかし、ノード数が約 30% まで減少しているが、計算時間が約半分までしか短縮していない。この原因として、Tab.2 から BCM 格子において Cube 間の受け渡す領域を考えると、全ノード数は Uniform 格子の約半分となっていることが考えられる。

4. 結言

計算精度を低下させることなく、計算効率を上昇させるように、二相系 LBM に BCM を適用した手法を検討した。静止液滴の計算において、Uniform 格子と比較して、BCM 格子でも精度よく計算できることがわかった。また、計算時間を比較すると、BCM 格子で計算した方が計算時間が短くなることがわかった。今後、ミルククラウンに代表される複雑な気液二相流において適用する予定である。また、二相系 LBM と IBM を組み合わせた気液固の三相流⁽⁸⁾に BCM の適用範囲を広げていきたい。ま

た、計算の効率化のために並列計算を行い効率化の検討を行う必要がある。

謝辞

本研究で用いた BCM は、三菱重工(株)との共同研究で利用したものを流用した。また、本研究は、科研費・基盤研究(C)課題番号 26420108 の一部として実施した。

参考文献

- (1) T. Inamuro, T. Ogata, S. Tajima, and N. Konishi, "A lattice Boltzmann method for incompressible two-phase flows with large density differences," *J. Comput. Phys.* **198** (2004), 628-644.
- (2) T. Lee and C. L. Lin, "A stable discretization of the lattice Boltzmann equation for simulation of incompressible two-phase flows at high density ratio," *J. Comput. Phys.* **206** (2005), 16-47.
- (3) H. W. Zheng, C. Shu, and Y. Y. Chew, "A lattice Boltzmann model for multiphase flows with large density ratio," *J. Comput. Phys.* **218** (2006), 353-371.
- (4) 谷口源貴, 稲室隆二, "CSF を用いた高密度比 LBM の開発," 第 28 回数値流体力学シンポジウム 2014 (2014), D04-2.
- (5) T. Inamuro, "Lattice Boltzmann methods for moving boundary flows," *Fluid Dyn. Res.* **44** (2012), 024001.
- (6) D. Sasaki and K. Nakahashi, "Rapid Large-scale Cartesian Meshing for Aerodynamic Computations," ICAS2014-2.7.2 International Congress on Aeronautical Sciences 2014, St. Petersburg, Russia, 2014.
- (7) 横山崇朗, 田中健太郎, 稲室隆二, "大きな密度比の気液二相流に対する二相流格子ボルツマン法," 第 26 回数値流体力学シンポジウム 2013 (2013), D09-5.
- (8) M. Yano and T. Inamuro, "Gas-liquid-solid three-phase flow simulations using the two-phase lattice Boltzmann method combined with the immersed boundary method," DSFD2015 (2015).