

LBM-DEM 固液二相流の GPU 計算

A LBM-DEM Coupled Simulation for Solid-liquid Two-phase Flow using GPU Computing

- 渡辺 勢也, 東工大, 東京都目黒区大岡山 2-12-1-i7-3, watanabe@sim.gsic.titech.ac.jp
青木 尊之, 東工大, 東京都目黒区大岡山 2-12-1-i7-3, taoki@gsic.titech.ac.jp
長谷川 雄太, 東工大, 東京都目黒区大岡山 2-12-1-i7-3, hasegawa@sim.gsic.titech.ac.jp
Seiya Watanabe, Tokyo Institute of Technology, 2-12-1 i7-3 O-okayama, Meguro-ku, Tokyo
Takayuki Aoki, Tokyo Institute of Technology, 2-12-1 i7-3 O-okayama, Meguro-ku, Tokyo
Yuta Hasegawa, Tokyo Institute of Technology, 2-12-1 i7-3 O-okayama, Meguro-ku, Tokyo

A direct numerical simulation of fluid and granular materials requires huge computational cost. We develop an efficient GPU code of coupled Lattice Boltzmann Method and Discrete Element Method for solid-liquid two-phase flow. An Immersed Moving Boundary method is easily coupled LBM and DEM with low computational cost. Our GPU code of LBM-DEM is 45-24% of performance compared with the performance of LBM. We conduct a sedimentation simulation of 68,921 particles using 48 million lattices for validation. A sedimentation form is similar to result of previous studies. We demonstrate a fluidized bed simulation at $Re=200$ using 20,000 particles and 50 million lattices.

1. 緒言

流体と粉体が混在する流れは液状化や土石流などの様々な現象で現れ, その振る舞いが明らかにされていない現象も多く, 数値シミュレーションが必要とされている. 密集した固体粒子の間隙を流れる複雑な流れを解析するためには, 粉体の形状を十分に表現できるほどの流体計算の格子解像度が必要となる. 粉体シミュレーションにおいて粉体粒子は数万個から数百万個必要とされており, 直接計算により粉体の間隙の流れまで計算しようとする, 流体計算の格子点数は膨大となり, 計算コストが極めて高くなる.

本研究では, 画像処理に特化した演算加速器である GPU(Graphics Processing Unit) を利用することにより, 演算コストの高い固液二相流の直接計算を実現する. 粉体の数値計算手法として, 粉体間の接触をバネとダンパによりモデル化する個別要素法 (DEM: Discrete Element Method) を用い, 流体の計算には格子ボルツマン法 (LBM: Lattice Boltzmann Method) を用いる.

2. 計算手法

2.1 LBM(Lattice Boltzmann Method)

格子ボルツマン法は格子計算に基づく流体計算手法の一つであり, 流体を格子点上で並進・衝突する多数の仮想粒子で仮定し, 格子点での仮想粒子の速度分布関数の時間発展を計算する手法である. 仮想粒子は並進運動により 1 タイムステップで隣接する格子点に移動するような速度を持つ. 本研究では, 現在の格子点に留まるものと隣接する 18 個の格子点に移動する合計 19 種類の速度方向を持つ, D3Q19 速度モデルを用いる. 流体の拡散過程などに対応する仮想粒子の衝突は, BGK モデルを用いて速度分布が局所平衡状態へと緩和すると仮定する.

$$f_{\alpha}(\mathbf{x} + \mathbf{c}_{\alpha}\Delta t, t + \Delta t) = f_{\alpha}(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{\tau}(f_{\alpha}(\mathbf{x}, t) - f_{\alpha}^{\text{eq}}(\rho, \mathbf{u})) + G_{\alpha} \quad (1)$$

ここで, f_{α} は速度分布関数, \mathbf{c}_{α} は速度方向, τ は緩和時間係数, f_{α}^{eq} は局所平衡状態における速度分布関数, G_{α} は外力項である. D3Q19 モデルでは, 速度方向 \mathbf{c}_{α} は次のようになる.

$$\mathbf{c}_{\alpha} = \begin{cases} (0, 0, 0) & \alpha = 0 \\ (\pm c, 0, 0), (0, \pm c, 0), (0, 0, \pm c) & \alpha = 1-6 \\ (\pm c, \pm c, 0), (\pm c, 0, \pm c), (0, \pm c, \pm c) & \alpha = 7-18 \end{cases} \quad (2)$$

ここで c は隣接の格子点に移動する速度であり, 格子サイズを h とすると $c = h/\Delta t$ となる. 局所平衡状態における速度分布関数 f_{α}^{eq} は, 格子点での流体の速度 \mathbf{u} と密度 ρ を用いて

$$f_{\alpha}^{\text{eq}} = w_{\alpha}\rho \left(1 + \frac{3\mathbf{c}_{\alpha} \cdot \mathbf{u}}{c^2} + \frac{9(\mathbf{c}_{\alpha} \cdot \mathbf{u})^2}{2c^4} - \frac{3|\mathbf{u}|^2}{2c^2} \right) \quad (3)$$

$$w_{\alpha} = \begin{cases} 1/3 & \alpha = 0 \\ 1/18 & \alpha = 1-6 \\ 1/36 & \alpha = 7-18 \end{cases}$$

となる. 衝突過程における緩和時間係数 τ は流体の動粘性係数 ν より

$$\tau = \frac{1}{2} + \frac{3\nu}{c^2\Delta t} \quad (4)$$

と設定する. 流体の密度と速度は速度分布関数から以下のようにして求める.

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \sum_{\alpha} f_{\alpha}(\mathbf{x}, t) \quad (5)$$

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\rho(\mathbf{x}, t)} \sum_{\alpha} \mathbf{c}_{\alpha} f_{\alpha}(\mathbf{x}, t) \quad (6)$$

2.2 Immersed Moving Boundary による移動境界条件

DEM と LBM を連成するためには, 移動する DEM 粒子の表面を移動境界として LBM の計算に組み込む必要がある. 移動境界条件として, 計算セルに含まれる DEM 粒子の体積率を用いて境界条件を入れる方法 (Immersed Moving Boundary) ⁽¹⁾ を用いる. 移動境界を含む場合の LBM の基礎式は

$$f_{\alpha}(\mathbf{x} + \mathbf{c}_{\alpha}\Delta t, t + \Delta t) = f_{\alpha}(\mathbf{x}, t) - (1 - \beta_n) \left(\frac{1}{\tau}(f_{\alpha}(\mathbf{x}, t) - f_{\alpha}^{\text{eq}}(\rho, \mathbf{u})) \right) + \beta_n \Omega_{\alpha} + (1 - \beta_n) G_{\alpha} \quad (7)$$

となる。ここで、 β_n は固体領域の割合に基づく重み係数であり、本研究では、固体の体積率をそのまま使用する。 Ω_α はセル内の移動境界の影響を加えるための追加項である。

$$\Omega_\alpha = (f_{-\alpha}(\mathbf{x}, t) - f_{-\alpha}^{\text{eq}}(\rho, \mathbf{u})) - (f_\alpha(\mathbf{x}, t) - f_\alpha^{\text{eq}}(\rho, \mathbf{v}_b)) \quad (8)$$

ここで、 $f_{-\alpha}$ は f_α と反対方向の速度分布関数である。 \mathbf{v}_b は粒子表面での速度であり、

$$\mathbf{v}_b = \mathbf{v}_p + \boldsymbol{\omega}_p \times \left(\mathbf{x} + \frac{c_\alpha \Delta t}{2} - \mathbf{x}_p \right) \quad (9)$$

で与える。 \mathbf{x}_p と \mathbf{v}_p 、 $\boldsymbol{\omega}_p$ は粒子の位置と速度、角速度のベクトルである。流体が DEM 粒子に加える力とトルクは、次式のように粒子に覆われているセルでの運動量変化の総和を計算することで求める。

$$\mathbf{F}_{\text{fluid}} = \frac{\Delta x^3}{\Delta t} \sum_n \beta_n \sum_\alpha \Omega_\alpha \mathbf{c}_\alpha \quad (10)$$

$$\mathbf{T}_{\text{fluid}} = \frac{\Delta x^3}{\Delta t} \sum_n \left((\mathbf{x} - \mathbf{x}_p) \times \beta_n \sum_\alpha \Omega_\alpha \mathbf{c}_\alpha \right) \quad (11)$$

2.3 DEM(Discrete Element Method)

DEM は個々の粉体粒子の運動を計算することで、粉体全体の挙動をシミュレートする手法である。重力や流体から受ける力と粒子間の接触力の合力に対して、粒子の位置と速度を時間積分する。接触力はバネとダンパによりモデル化され、バネは粒子の食い込み深さに比例した反発力を、ダンパは粒子の相対速度に応じた減衰力を粒子に与える。粒子間の摩擦に相当する接線方向のモデルには、バネとダンパに加えて摩擦スライダーを導入し、クーロンの摩擦法則に従って接線方向の力に上限値を与える。

流体中の粉体粒子の並進と回転の運動方程式は

$$m_i \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = m_i \mathbf{g} + \sum_{col} \mathbf{f}_{ij}^{col} + \mathbf{F}_{\text{fluid}} \quad (12)$$

$$I_i \frac{d\boldsymbol{\omega}_i}{dt} = \sum_{col} (\mathbf{l}_{ij}^{col} \times \mathbf{f}_{ij}^{col}) + \mathbf{T}_{\text{fluid}} \quad (13)$$

となり、この式を時間積分することで粒子の位置や速度を計算する。なお、 \mathbf{v}_i と $\boldsymbol{\omega}_i$ は粒子 i の速度と角速度ベクトル、 m_i と I_i は粒子の質量および慣性モーメント、添字 col は接触している粒子を示し、 \mathbf{f}_{ij}^{col} は粒子 $i-j$ 間の接触力、 \mathbf{l}_{ij}^{col} は粒子 i の重心から粒子 $i-j$ の接触点へのベクトルである。

3. 検証計算

3.1 単一球形粒子の沈降速度

Immersed Moving Boundary を用いた LBM-DEM による流体と固体粒子の連成計算の妥当性を確認するため、1つの粒子が流体中を沈降する計算を行い、粒子の位置と沈降速度を既往研究⁽²⁾で行われた実験結果と比較する。計算領域の大きさは $100 \text{ mm} \times 100 \text{ mm} \times 160 \text{ mm}$ 、粒子の直径は 15 mm であり、粒子の初期高さは床から 120 mm である。流体の密度は 962 kg/m^3 、動粘度は $1.18 \times 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}$ 、粉体の密度は $1,230 \text{ kg/m}^3$ である。粒子の終端速度に対するレイノルズ数は 11.6 である。格子数は $200 \times 200 \times 320$ で、粒子直径に対して 30 格子を割り当てている。初期時刻で粒子は静止している。粒子が床に到達するまでの計算を行う。

粒子の位置の時間変化のグラフを Fig.1 に、速度の時間変化を Fig.2 に示す。赤の実線が本研究での計算結果

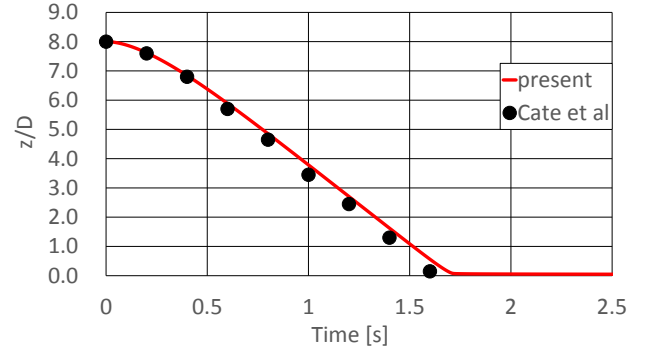


Fig. 1: Comparison of settling sphere's position.

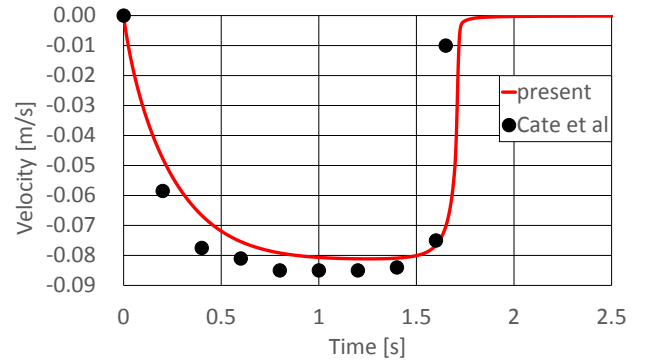


Fig. 2: Comparison of settling sphere's velocity.

であり、黒色のマーカーは既往研究⁽²⁾で得られた実験結果である。Fig.1の縦軸は粒子の表面の下端の位置 z を粒子直径 D で除した値である。計算結果のほうが沈降速度が少し遅いが、粒子の位置と速度は実験と概ね一致していることが確認できる。粒子の終端速度の誤差は10%以下である。

3.2 多粒子の沈降計算

複雑な流れにおける LBM-DEM の検証として、流体中を多数の固体粒子が沈降する計算を行う。LBMの格子幅は $8.3 \times 10^{-6} \text{ m}$ であり、格子点数は $288 \times 288 \times 576$ である。DEM 粒子の数は $68,921(41^3)$ で、粒子直径に対して4格子を割り当てている。流体の密度は $1,000 \text{ kg/m}^3$ 、動粘度は $1.0 \times 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$ 、粉体の密度は $2,650 \text{ kg/m}^3$ である。ストークスの定理から予測される終端速度は $9.9 \times 10^{-4} \text{ m/s}$ であり、終端速度に対するレイノルズ数は $Re = 0.033$ である。粒子の初期配置として、計算領域の上半分粒子を等間隔に並べている。

計算結果を Fig.3 に示す。壁から離れた中央付近の粒子が先行して沈降していき、壁付近の粒子は中央付近の粒子の沈降で発生した流れにより上に巻き上げられる様子が確認できる。流体のレイリー・テイラー不安定性に似た粒子群の沈降形態は、既往研究⁽³⁾⁽⁴⁾においても同様の傾向が確認されている。また、Fig.3(b)のように、中心付近の粒子群の先頭がキノコ状に発達しており、ケルビン・ヘルムホルツ不安定性に似た現象が起こっている。既往研究⁽³⁾⁽⁴⁾の1万個程度の粒子を用いた計算や Fig.4の2,744個の粒子を用いた低解像度の計算ではキノコ状に発達した粒子群は現れない。GPUを用いて高解像度の計算を実行したことで確認できたといえる。

4. GPUによる計算速度の測定

LBM-DEMのGPU計算において、固体粒子の数を変化させて計算を行い、固体粒子数の計算性能への影響を

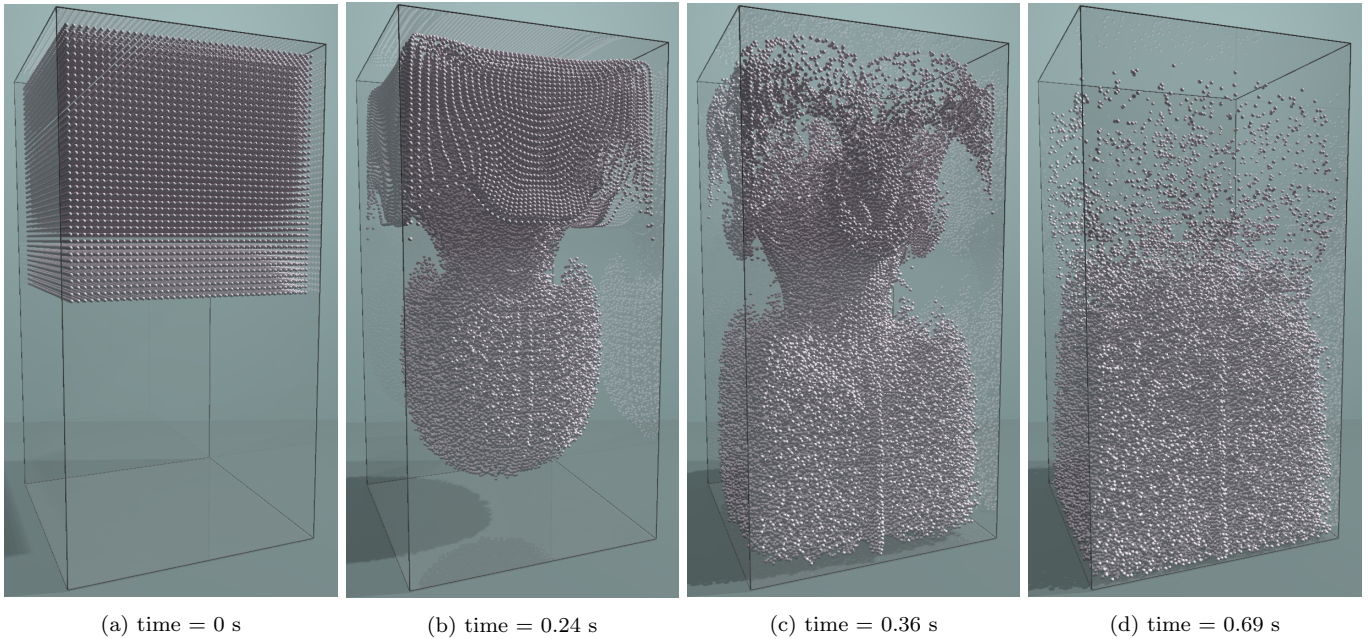


Fig. 3: A sedimentation of 68,921 particles.

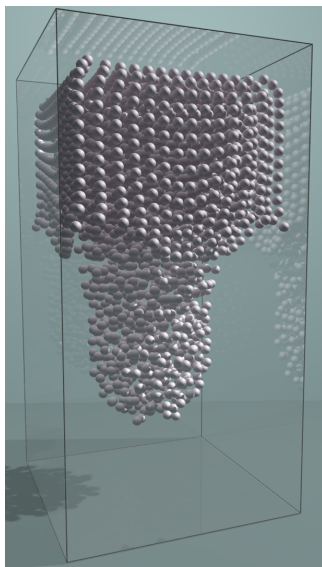


Fig. 4: A sedimentation of 2,744 particles.

評価する。LBMの格子数は $256 \times 256 \times 512$ とし、DEMの粒子数は $1^3, 2^3, 4^3, 8^3, 16^3, 32^3$ の6種類の条件で行う。粒子の直径には4格子を割り当てている。固液二相の連成計算による速度低下を確認するため、2.2節の移動境界条件を入れずに単相LBMの計算も行った。LBMとDEMの時間刻みは同じに設定している。計算には、NVIDIA Tesla K80のGPUを1基利用した。LBMの従属変数は単精度であり、DEMの従属変数は倍精度である。

1秒間に1タイムステップ更新できる格子点数であるLUPS (Lattices Update Per Second) による計算性能の評価の結果をFig.5に示す。横軸が粒子数であり、縦軸はMLUPS (10^6 LUPS) である。赤い実線はDEMとの連成計算を行っていないLBM単体の実行性能である。青いマーカーはDEMと連成計算を行った場合の実行性能で

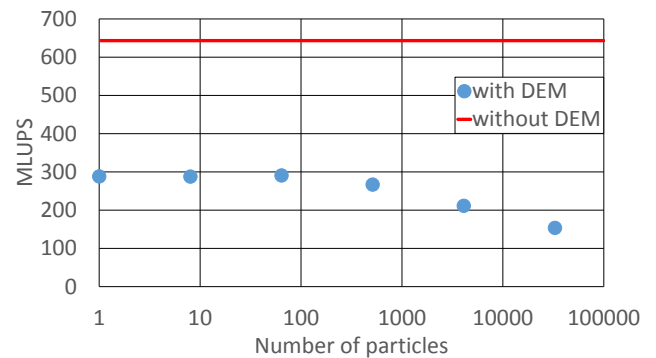


Fig. 5: Performances of LBM-DEM coupled simulation using GPU computing.

ある。粒子数が増加するに連れて実行性能が低下していく傾向がある。これは、LBMの各セルに固体境界が含まれるかの判定と、各セルの体積率の計算の時間が、粒子数が増えるに連れて増加するためである。DEMの接触相互作用の計算と時間積分に要する時間は粒子数に比例して増加するが、LBMの格子点数に比べてDEMの粒子数は少ないため、これらの計算時間の増加は実行性能にほとんど影響を与えない。また、LBM単体の実行性能である643 MLUPSと比較して、DEMの粒子数が少ない場合は45%、粒子数が 32^3 の場合でも24%の性能である。

5. 流動層の直接計算

LBM-DEMの連成計算により、流動層の直接計算を行う。粒子直径に対して10格子を割り当て、固体粒子数は20,000とした。格子点数は $512 \times 96 \times 1024$ である。境界条件として、床の一部に流入境界条件を、計算領域の上部は流出境界条件を、その他の境界は静止壁を設定した。流入速度は、代表長さを粒子直径とした場合に、レイノルズ数が200となるように設定した。流体と固体の密度比は2.65である。DEMの粒子が流入境界条件や流出境界条件が設定された壁に近づき過ぎると計算が不安定になるため、DEMの境界を流入と流出の境界から24

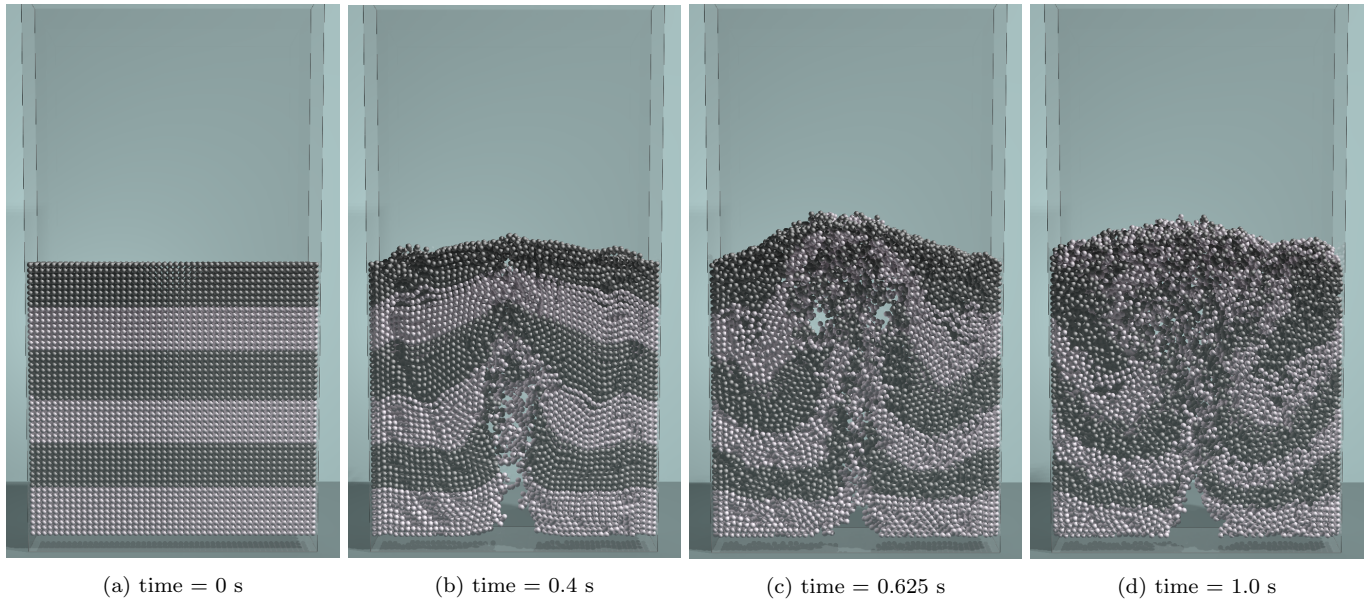


Fig. 6: A fluidized bed simulation.

格子に相当する距離だけ離して設定している。

計算結果を Fig.6 に示す。粒子の色は初期時刻での粒子の位置で設定している。流入した流体により、粉体群が吹き上げられて粉体中に気泡が生成されている。粒子群の表面では、白と黒の粒子が吹き上げられて混合している様子が確認できる。

レイノルズ数を 400 として計算を行った場合は、途中で計算が破綻してしまった。より高いレイノルズ数で計算を行うためには、LBM に MRT(Multiple Relaxation Time)⁽⁵⁾ を導入することで計算安定性を高める必要がある。

6. 結論

LBM と DEM による固液二相流の計算を GPU で実行することで、数万個の DEM 粒子を用いた計算を実現した。LBM-DEM の計算性能は、LBM 単体の場合と比較して 45% から 24% 程度であり、計算時間は LBM の計算に律速されることが確認できた。68,921 個の固体粒子の沈降計算を実行し、固体粒子と流体の場合においても、二相の流体の界面で起こるレイリー・テイラー不安定性やケルビン・ヘルムホルツ不安定性に似た現象が起こることがわかった。粒子直径を 10 格子で解像して流動層の直接計算をすることができたが、レイノルズ数が 200 よりも大きくなると計算が破綻してしまった。

今後は、より高いレイノルズ数で計算できるように LBM に MRT を導入し、計算安定性を向上する。単一 GPU では、メモリ容量の制約から、DEM の粒子数が数万個程度に制限されるため、MPI を用いた複数 GPU 計算に取り組む。また、球形の DEM 粒子を用いるのではなく、非球形粒子による粉体のモデル化を行い、より正確な粉体計算を行う。

謝辞

本研究の一部は、科学研究費補助金・基盤研究 (S) 課題番号 26220002 「ものづくり HPC アプリケーションのエクサスケールへの進化」、科学技術振興機構 CREST 「ポストベタスケール高性能計算に資するシステムソフトウェア技術の創出」、学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点、および革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラから支援を頂いた。記して謝意を表す。

参考文献

- (1) Owen, D., Leonardi, C. and Feng, Y.: "An efficient framework for fluid-structure interaction using the lattice Boltzmann method and immersed moving boundaries", *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 87, No. 1-5, pp. 66-95 (2011).
- (2) Ten Cate, A., Nieuwstad, C., Derksen, J. and Van den Akker, H.: "Particle imaging velocimetry experiments and lattice-Boltzmann simulations on a single sphere settling under gravity", *Physics of Fluids (1994-present)*, Vol. 14, No. 11, pp. 4012-4025 (2002).
- (3) Gallier, S., Lemaire, E., Lobry, L. and Peters, F.: "A fictitious domain approach for the simulation of dense suspensions", *Journal of Computational Physics*, Vol. 256, pp. 367-387 (2014).
- (4) 豊 福元, 章 村上: "PS-MRT Lattice Boltzmann モデルによる土粒子と間隙水の直接計算", 計算工学講演会論文集 Proceedings of the Conference on Computational Engineering and Science, Vol. 20, p. 3p (2015).
- (5) Suga, K., Kuwata, Y., Takashima, K. and Chikase, R.: "A D3Q27 multiple-relaxation-time lattice Boltzmann method for turbulent flows", *Computers & Mathematics with Applications*, Vol. 69, No. 6, pp. 518-529 (2015).