

## 格子ボルツマン法を用いた高濃度微粒子流れの解析

### Analysis of particle-laden flow at high mass loading through Lattice Boltzmann Method

- 高柳 哲也, パナソニック, 大阪府守口市八雲中町 3-1-1, takayanagi.tetsuya@jp.panasonic.com
- 松本 貴也, パナソニック, 大阪府守口市八雲中町 3-1-1, matsumoto.takaya@jp.panasonic.com
- 三木 慎一郎, パナソニック, 大阪府守口市八雲中町 3-1-1, miki.shinichiro@jp.panasonic.com
- Tetsuya Takayanagi, Panasonic Co, 3-1-1 Yagumo-nakamachi, Moriguchi, Osaka
- Takaya Matsumoto, Panasonic Co, 3-1-1 Yagumo-nakamachi, Moriguchi, Osaka
- Shinichiro Miki, Panasonic Co, 3-1-1 Yagumo-nakamachi, Moriguchi, Osaka

Recently, a high-precision analysis technology of IAQ (Indoor Air Quality) has attracted considerable attention in order to create a new value in buildings. In the conventional computational fluid dynamics, One-way model which only considers the effect of fluid on particles is one of the most popular method. But, for volume fraction greater than about 1ppm, the effect of particles on fluid can't be ignored, and the collision between particles also has to be considered for further higher volume fraction. In this present study, we have investigated four-way model which consider the effect of particles on fluid as well as collision between particles, using Lattice Boltzmann Method(LBM). This paper describes the overview of this simulation model and the comparison between One-way model and Four-way model in 2D.

#### 1. 序

IAQ(Indoor Air Quality)において、室内中のPM2.5や埃・花粉といった微粒子の振る舞いを見える化する事へのニーズは非常に高く、中でもCFD(Computational Fluid Dynamics)による数値解析は最も重要な技術の1つである。CFDによる微粒子の挙動解析には一般に One-way モデルと呼ばれる流体場を予め計算しておいて、その流れ場から微粒子に働く力を計算する片側連成がよく使われる。

One-way モデルは流体に対する微粒子の体積分率が十分低ければ精度は良く、また計算負荷の観点からも効率的なモデルであるが、微粒子の体積分率が1[ppm]を超えてくる場合には、微粒子の存在による流体への影響が無視できなくなってくる<sup>(1)</sup>。この場合には、粒子-流体間相互作用をモデル化した強連成モデル(以下、Two-way モデル)が必要となってくる。また体積分率が更に高くなり、サブパーセントオーダーになると微粒子間の衝突が無視できなくなってくるため、微粒子間衝突をモデル化した Four-way モデルが必要となってくる。この様子を Fig. 1 に示した。

格子ボルツマン法は近年、注目されている流体計算手法であり、データの局所性が高く、並列計算に適した手法である。また粒子-流体間相互作用の導入も自然にモデル化する事ができ、これからの微粒子解析手法として重要な技術となると考えられる。本研究では、粒子-流体間相互作用には Noble et al. が提案した PSC(Partially Saturated Cells)<sup>(2)</sup>を、微粒子間相互作用には個別要素法(Discrete Element Method)<sup>(3)</sup>を適用し、2次元の格子ボルツマン法(Lattice Boltzmann Method; 以下、LBM)による Four-way モデルを構築し、One-way モデルとの比較を行った。

これに加え、粒子-流体間相互作用モデル化の妥当性検証を行う為に、ダクト実験系を構築し、PIV(Particle Imaging Velocimetry)による風速分布測定を行ったので、併せて報告する。

#### 2. 格子ボルツマン法(LBM)

LBM は従来の CFD のように Navier-Stokes 方程式(以下、N-S 方程式)を直接解き、流速や圧力を求めるのではなく、流体を仮想的な粒子の分布関数で表現する。その際に、空間・時間・速度方向が離散化された格子ボルツマン方程式を解くことによって、結果として N-S 方程式を満足した流体の振る舞いが得られる。

格子ボルツマン法を解く際には、次式のように、分布関数の衝突と並進という 2 つのプロセスから行われ、衝突によって場所毎に定義される局所平衡分布関数に単一の時間で緩和していく

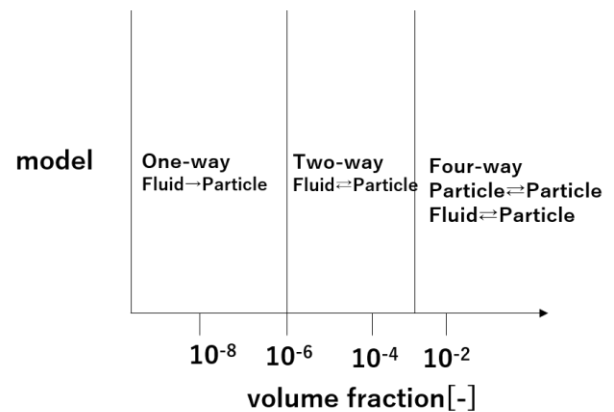


Fig. 1 Relationship between volume fraction and simulation model<sup>(1)</sup>

BGK(Bhatnagar-Gross-Krook)近似が適用されるのが一般的である。

$$f_i^*(x, t) = f_i(x, t) - \frac{1}{\tau} (f_i(x, t) - f_i^{eq}(x, t))$$

$$f_i(x + c_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i^*(x, t)$$

ここで、 $x$ は場所、 $t$ は時刻、 $\Delta t$ は時間刻み、 $c_i$ は離散化された速度方向  $i$  の速度、 $f(x, t)$  は分布関数、 $\tau$  は緩和時間、 $f_i^*(x, t)$  は衝突後の分布関数、 $f_i^{eq}(x, t)$  は局所平衡分布関数であり、次式のような Maxwell 型の関数である。

$$f_i^{eq} = w_i \rho \left( 1 + \frac{3u \cdot c_i}{c^2} + \frac{9(u \cdot c_i)^2}{2c^4} - \frac{3|u|^2}{2c^2} \right)$$

速度の離散化については、次元毎にいくつかの速度セットがあり、本研究では Fig. 2 に示すように D2Q9 モデルを用いた。

ここから分かる通り、LBM は陽解法であり、更新に必要なデータの局所性から並列計算との親和性が高い。

そして、分布関数から流体の密度や速度を計算するには、次式のように速度インデックスについて和を取ればよい。

$$\rho(x, t) = \sum_i f_i(x, t), u(x, t) = \sum_i c_i f_i(x, t)$$

#### 3. PSC (Partially Saturated Cells)

粒子-流体間相互作用のモデル化にはいくつかのモデルが提案さ

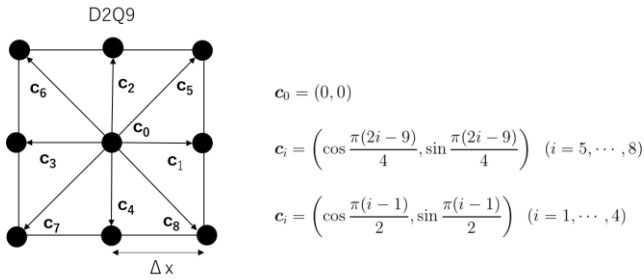


Fig. 2 D2Q9 model

れているが<sup>(2),(4),(9)</sup>、本研究では Noble et al.<sup>(3)</sup>が提案した PSC<sup>(2)</sup>を用いた。PSC では Fig. 3 に示すように各格子点を中心とした長さ  $\Delta x$  のコントロール・セルを導入し、コントロール・セル中を固体領域が占める体積分率  $\gamma$  の関数である  $\beta$  を用いて、衝突の式を次式のように修正する。

$$f_i^*(x, t) = f_i(x, t) - \frac{1}{\tau} (f_i(x, t) - f_i^{eq}(x, t)) + \beta f_i^m(x, t)$$

$$f_i^m(x, t) = f_{-i}(x, t) - f_{-i}^{eq}(\rho, u) - (f_i(x, t) - f_i^{eq}(\rho, v_b))$$

ここで、 $v_b$  は次式で求まる粒子表面の速度である。

$$v_b = v_p + \omega_p \times \left( x + \frac{c_i \Delta t}{2} - x_p \right)$$

ここで、 $v_p$  は粒子の速度、 $\omega_p$  は粒子の角加速度、 $x_p$  は粒子の位置である。

$\beta$  の取りうる値の範囲は  $[0, 1]$  であり、 $\beta$  が 0 の場合には通常の流体の衝突式に帰着する一方で、 $\beta$  が 1 の場合には、非平衡成分の Bounce Back を表す式に切り替わる。 $0 < \beta < 1$  においては、2 つ式が接続されており、 $\beta$  によって流体の領域と固体の領域が滑らかに切り替わる。 $\beta$  にはいくつかの式が提案されているが、本研究では次式を用いた。

$$\beta = \frac{\gamma(\tau/\Delta t - 1/2)}{(1 - \gamma) + (\tau/\Delta t - 1/2)}$$

微粒子に働く力とトルクは粒子に覆われている全ての領域の運動量変化の和を取る事で計算できる。

$$F_f = -\frac{\Delta x^2}{\Delta t} \sum_n \beta_n \left( \sum_i f_i^m c_i \right)$$

$$T_f = -\frac{\Delta x^2}{\Delta t} \sum_n (\mathbf{x}_n - \mathbf{x}_c) \times \beta_n \left( \sum_i f_i^m c_i \right)$$

上記のように PSC では微粒子の体積分率を計算する必要があるが、既往の文献中で体積分率の計算方法としてはいくつかの方法が比較されている<sup>(6)</sup>。本研究では、精度と計算負荷のバランスが良いとされる多角形近似による体積分率計算手法を採用している。

実際の計算時には Lattice Unit を採用し、物理量は無次元化した上で計算を行っている。

#### 4. 個別要素法(Discrete Element Method)

微粒子間の衝突のモデル化には個別要素法を用いた。個別要素法では接触力計算にバネとダッシュポッドを組み合わせた様々なモデルが提案されているが本研究では最も単純なバネモデルにより接触力を考慮した。

$$F_c = k\delta$$

ここで、 $k$  はばね定数、 $\delta$  は微粒子間のオーバーラップである。

また微粒子の接触候補探索のアルゴリズムには Nishiura et al. の提案しているペアリスト法<sup>(7)</sup>を用いた。

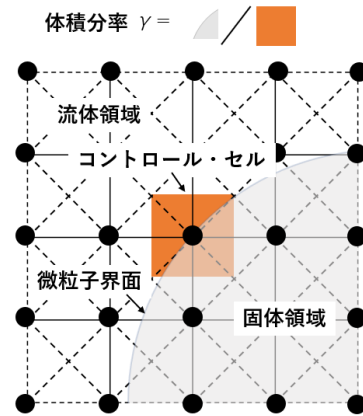


Fig. 3 concept of PSC and volume fraction

#### 5. One-way モデル

本研究では Four-way モデルと比較の為のモデルとして One-way モデルの計算も行った。One-way モデル計算時には流体計算と微粒子の計算が分離しており、まずは通常の LBM により流体計算のみを行い、それを背景場として与えて、微粒子の計算を行った。微粒子に働く抗力は、微粒子の位置に内挿した風速を用いて次式で計算を行った。

$$F_D = \frac{1}{2} C_D A_p \rho v^2$$

ここで、 $C_D$  は抗力係数、 $A_p$  は流れに対する投影面積、 $\rho$  は流体の密度、 $v$  は流体に対する粒子の相対速度である。 $C_D$  は 1.2 で計算を行った。

#### 6. 並列計算プログラミングの実際

Four-way モデルの計算に際しては、実行時間を現実的な時間とするため、並列化する事が望ましい。本研究では GPU (Graphic Processor Unit) による並列演算を行った。GPU は CPU (Central Processor Unit) と比較して、低速なコアを多数搭載したメニーコアプロセッサとして、近年注目を集めている。

また、本研究では使用言語として、今後のプログラムの大規模化や拡張性を見据え、メンテナンス性・可読性の高さやライブラリの充実性の観点から Python を使用した。Python は多くのライブラリを持つグルー言語であり、数値計算部分には numpy、cython、結果の可視化には matplotlib、seaborn、結果の入出力やデータ分析には h5py、pandas などの各種ライブラリが利用でき、一つのプログラムでプリ処理からポスト処理までを制御できるのが 1 つの特徴である。

プログラミングの手続きについても、モデルの段階的の高度化に対応できるよう関数型プログラミングではなく、オブジェクト指向でプログラムを作成した。オブジェクト指向で作成することで、変数へのアクセススピードなどは低下する為、最速のプログラムとはならないが、プログラムのメンテナンス性は良くなる。

本研究ではまず流体クラスを作成し、流体クラスを継承した微粒子クラスを作成することで、機能ごとにプログラムを分割し、メンテナンス性を重視した。プログラム作成時には、多くのエディタが利用できるが、本研究ではデバッグ機能やバージョン管理システム (Version Control System) との連携機能などが充実している PyCharm を使用した。

Python で GPU 並列を行うにはいくつかの方法があるが、本研究では PyCUDA という CUDA C のラッパーライブラリを使用している。計算に際しては、GeForce 1070Ti (2432 CUDA Core) 1 基を使用した。

### 7. 計算結果

本研究では2次元ポアズイユ流れ中に約 800[ppm]の濃度で微粒子を分散させ、One-way モデルと Four-way モデルの2つのモデルで計算を行った。計算系のジオメトリを Fig 4, 計算条件を Table 1 に示す。シミュレーションの際にはまず流れの計算のみを行い、十分発達した流れを初期条件として与えた。また微粒子の初期座標には一定のランダムネスが入るように配置している。微粒子の初速度は平衡状態に近い状態を想定し、流速の 90%程度を与えている。

One-way モデルと Four-way モデルにおける微粒子位置及び流速分布のコンター図を Fig 5 に示す。微粒子側の相対速度があまり大きな領域ではなく、微粒子位置についてはまだ大きな差は無い。しかし、流速分布については体積分率が 1ppm より十分大きいため、粒子-流体間相互作用が無視できず、Four-way モデルでは流速分布がポアズイユ流れから変化している事が分かる。

より詳細な比較を行う為に、それぞれのモデルについて微粒子が存在する種々の断面で1次元流速分布を重ねてプロットした比較結果を Fig 6 に示す。微粒子による流体の遮りにより、圧力損失が上昇し、流路中央部分では流速が 5-10%程度低下し、逆に流路壁付近では流速が僅かに上昇するという流速の平均化が起きている事が分かる。

### 8. 実験による妥当性検証

次に構築したシミュレーションモデルの妥当性検証を行う為に、類似実験系の構築を行った。実験系の構成図を Fig 7 に示す。実験ではまずチャンバー内に微粒子を噴霧し、所定の流量でポンプにより、微粒子を流路内へ導入した。本実験系では主流と副流の2種類の流量調節部があるが、主流に空気を導入すると微粒子分布に偏りが生じた為、今回は主流の流量を 0[L/min]とし、副流のみで実験を行った。この流路に対して、PIV(Particle Imaging Velocimetry)での風速分布の評価を行った。流路上部よりシートレーザー

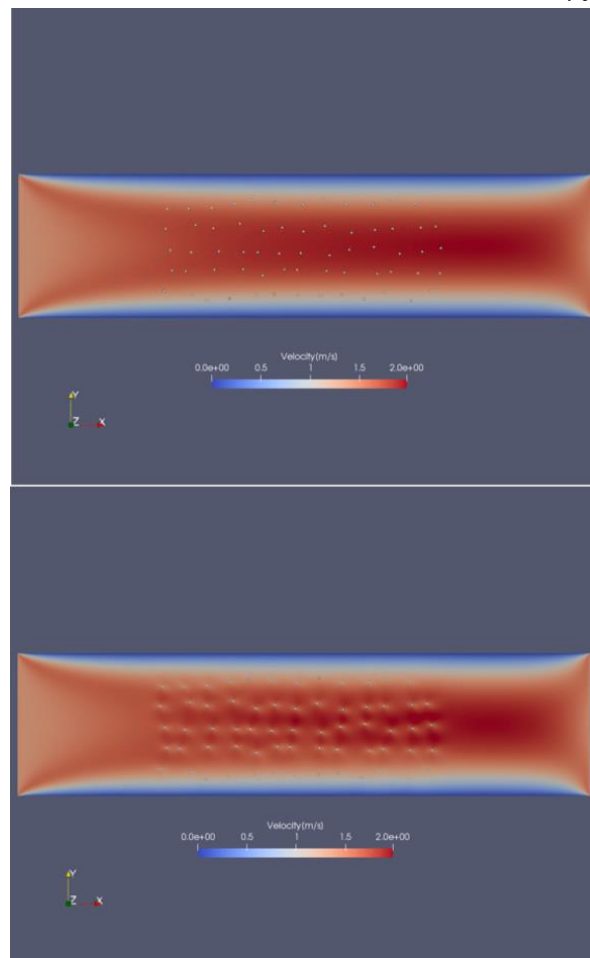


Fig. 5 Particle position and flow velocity distribution (top) one-way model (bottom) four-way model

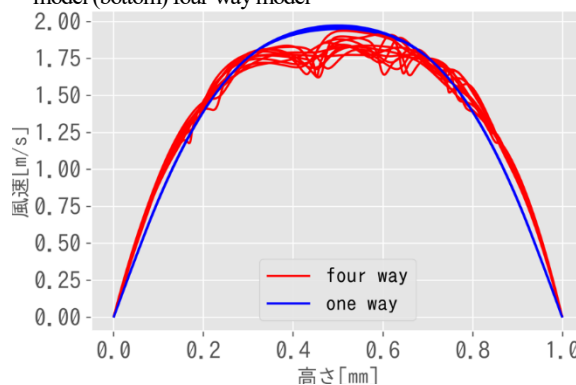


Fig. 6 Comparison of one-way model and four-way model

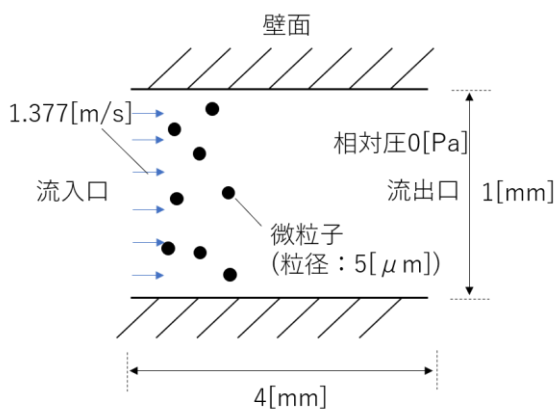


Fig. 4 Geometry and boundary condition  
Table 1 Simulation condition

粒子径[ $\mu\text{m}$ ]	5
粒子数[-]	64
流路幅[mm]	1
流速[m/s]	1.377
レイノルズ数[-]	91.1
体積分率[ppm]	800
格子解像度	1000 x 4000

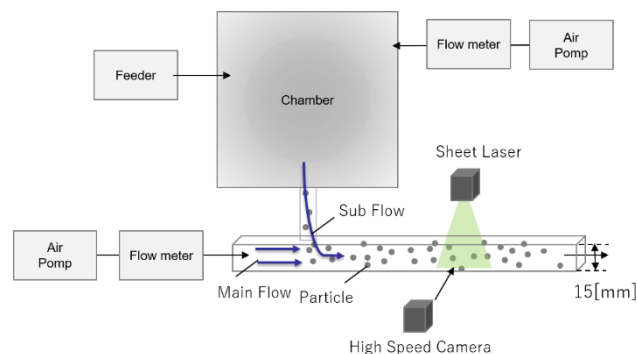


Fig. 7 Experimental set up of PIV system

Table 2 Experimental condition

体積分率[ppm]	< 1	> 1
粒子径[ $\mu\text{m}$ ]	1	2-4
粒子	PSL	煙粒子
流路幅[mm]	15	15
レイノルズ数[-]	91.9	91.9

(532nm)を照射し、流路の側面より高速度カメラで撮像を行っている。本実験系では上述のシミュレーション結果と類似の傾向が確認できるかを定性的に確認する為に、体積分率が 1 [ppm] より十分小さい濃度と 1[ppm]より十分大きな濃度の 2 種類の条件で PIV を行った。噴霧粒子としては PSL(polystyrene latex)と煙粒子を使用した。実験条件を Table 2 に纏めた。シミュレーションと流路幅が異なる為、レイノルズ数を両者で共通にするように流量を設定している。

体積分率が 1[ppm]より十分に大きな条件での PIV による風速分布の算出例を Fig. 8 に示す。風速分布の中心が少しずれているが、副流のみで実験している為、流路の曲がりによる影響だと思われる。Fig 9 にシミュレーションと同様の種々の断面で 2 つの濃度域での風速分布の比較結果を示した。シミュレーションと同様に流路中心付近が 5-10%程度低下している傾向が確認できる。この事から、PSC による粒子-流体間相互作用の定性的な妥当性検証を行う事ができた。

ただし、今回実施したシミュレーションは 2 次元系であり、実際に定量的な比較を行うには、3 次元系で計算する必要がある。また実験サイドでは高濃度微粒子フィーダーによる微粒子濃度の制御や高濃度微粒子の濃度計測プロトコルが必要など課題は残っている。

## 9. 結論

LBM で PSC-DEM による One-way モデル、Four-way モデルを構築し、高濃度領域における粒子-流体間相互作用の影響を調査した。体積分率 800 [ppm] では粒子-流体間相互作用により、流速分布の中央付近が 5-10%程度低下し、壁付近では僅かに流速が上がる流速の平均化の傾向が確認された。また、Four-way モデルの妥当性検証を行う為に類似のダクト実験系を構築し、PIV による風速分布の比較を行った。PIV での風速分布結果においても 1[ppm]よりも十分濃い濃度領域では、1[ppm]より十分小さな領域の流速分布と比較して、中央付近が 5-10%程度低下し、類似の傾向を確認できた。

今後はシミュレーションモデルについては現在の PSC モデルの計算精度を確認する為に、円柱周りの流れに PSC を適用し、抗力係数の実験値<sup>8)</sup>と比較することで、モデルの適用限界を明らかにするとともに、モデル精度の改善を試みる。

## 参考文献

- (1) Elghobashi S.: "On predicting particle-laden turbulent flows", *App. Sci. Res.* Vol. 52, p. 309(1994)
- (2) Noble, D., and Torczynski, J.: "A lattice Boltzmann method for partially saturated computational Cells", *J. Mod. Phys. C*, Vol. 9, No. 8, p. 1189-1201(1989)
- (3) Nishiura, D., Sakaguchi, H.: "Parallel-vector algorithms for particle simulations on shared-memory multiprocessors", *J. Comp. Phys.*, Vol. 230, p. 1923-1938 (2011)
- (4) Bouzidi, M., Firdaouss, M., Lallemand, P.: "Momentum transfer of a Boltzmann-lattice fluid with boundaries",

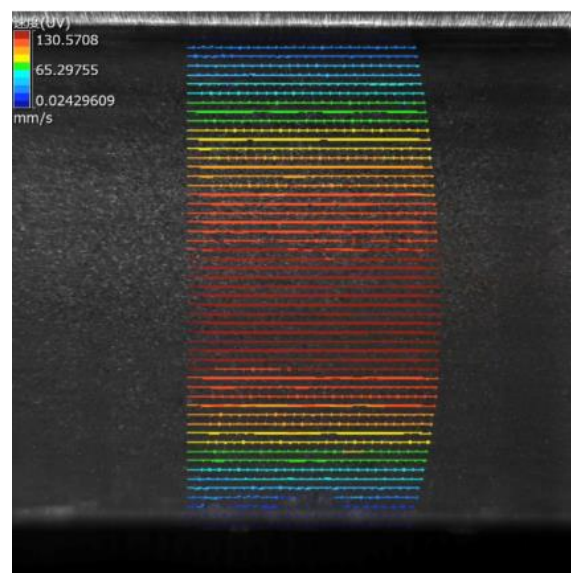


Fig. 8 Example of PIV result (1ppm <)

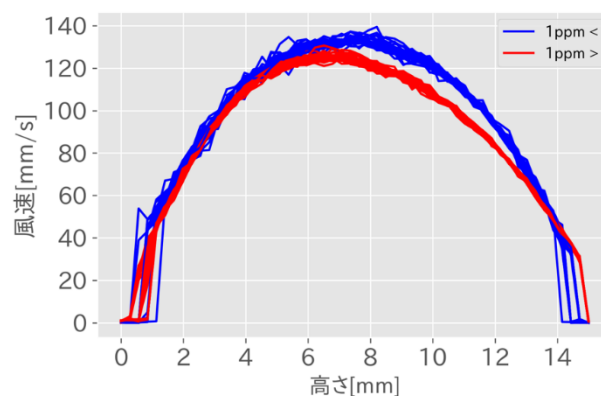


Fig. 9 Comparison of velocity distribution between dilute concentration and dense concentration in PIV system

*Phys. Fluids*, Vol. 13, p. 3452 (2001)

- (5) Feng, Z. G., Michaelides, E. E.: "The immersed boundary-lattice Boltzmann method for solving fluid-particles interaction problems", *J. Comp. Phys.*, Vol. 195(2), p. 602-628 (2004)
- (6) Owen D. R. J., Leonardi C. R., Feng Y. T.: "An efficient framework for fluid-structure interaction using the lattice Boltzmann method and immersed moving boundaries", *Int. J. Numer. Methods Engrg.*, Vol. 87, p. 66-95(2010)
- (7) Nishiura, D., Sakaguchi, H.: "Parallel-vector algorithms for particle simulations on shared-memory multiprocessors", *J. Comp. Phys.*, Vol. 230, p. 1923-1938 (2011)
- (8) Tritton, D. J.: "Experiments on the flow past a circular cylinder at low Reynolds numbers", *J. Fluid. Mech.*, Vol. 6, pp. 547-567 (1959)