

界面に適合するAMR法を用いた非圧縮性気液二相流の完全陽解法計算とGPU実装 - 液膜・泡沫への適用 -



研究背景と目的

水と空気が入り混じるような気液二相流は、流体力学において未解決の問題を多く含む分野として認識されている。その数値解析は、同じ物理条件において計算格子を細かくすると新たな水滴や気泡が発生し、数値計算の解の取束性が十分に満たされていない。しかし、格子幅を1/2にすると16倍の計算資源が必要になる。これまで非圧縮性流体解析では、一般に非圧縮性条件を満足させるために圧力ポアソン方程式を線形行列法で解き、その圧力により速度を修正する半陰解法が用いられてきた。気液二相流では密度比が1000倍近くになり、大規模計算になるとマルチグリッド法などの前処理を用いても疎行列計算の取束性が非常に悪化するため、100億点以上の高解像度気液二相流解析は絶望的と言える。それにも関わらず、液体燃料の噴射、オイル攪拌、燃料電池内の排水など、さまざまな分野で高解像度の気液二相流解析は必要とされている。

2018年度は完全陽解法の弱圧縮性気液二相流計算手法を開発し、気液界面に細分化格子を適合させることができた。2019年度は、気液二相流に粘弾性を考慮することで液膜・泡沫の解析を試みる。

研究計画

高解像度の気液二相流計算をエクスプロッソのスパコンの候補であるNVIDIAのGPUを用いたスパコンで実装し、検証を行う。GPUはメモリ構造がCPUの場合と大きく異なりメモリ階層が多く、アドレスが固定されているためにAMR法の実装は困難とされているが、アプリ側でGPUのメモリの管理まで行うことにより、これまで計算されることがない液膜等の大規模な気液二相流計算を実現する。

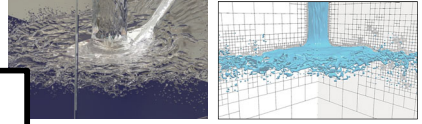
- 弱圧縮性近似に基づく完全陽解法による3次元GPU気液二相流計算を実行する。
- 気液界面を高解像度で計算するために、8分木による適合格子細分化法を導入したGPU実装を行い、デフラグメンテーションまでアプリ内で行う。
- 粘弾性モデルとしてFENE-CRモデルやマランゴニ効果、ギブス弾性をモデル化したものを気液界面に適用し、液膜の安定性や崩壊過程を明らかにする。

研究グループ

代表者	青木 尊之	(東京工業大学)
副代表者	白崎 実	(横浜国立大学)
課題参加者	胡長洪	(九州大学)
課題参加者	小野寺 直幸	(日本原子力研究開発機構)
課題参加者	杉原 健太	(東京工業大学)
課題参加者	額田 彰	(東京工業大学)
課題参加者	渡辺 勢也	(東京工業大学)
課題参加者	Kai Yang	(東京工業大学)
課題参加者	松下 真太郎	(東京工業大学)
課題参加者	Eric Souza	(東京工業大学)
課題参加者	Yos Sitompul	(東京工業大学)
課題参加者	河原 淳	(東京工業大学)
課題参加者	前久保 格也	(東京工業大学)

特性線解法の問題点

連立一次方程式となるポアソン方程式を解かない特性線解法を用いた完全陽解法の開発し、大規模計算にスケールする見通しを得た。さらに、セミ・ラグランジュ法の適用によって演算密度を上げ、高い計算効率を達成した。しかし、補間関数内で密度が変わらないという仮定があり、密度変化を補間関数内で考慮することが困難であるということがわかってきた。これに付随する問題として、①音速をパラメータとして与えることが難しく、理想気体の音速の式を用いなければ高CFL数下で安定に計算することは困難である。②非保存形流体方程式を解いていることに起因する気相相間の運動量交換が正しく評価されていない問題に対して密度差を考慮した移流項評価の適用が困難である。

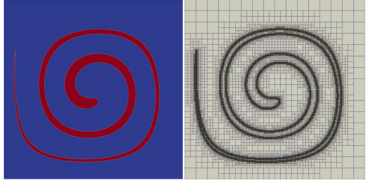
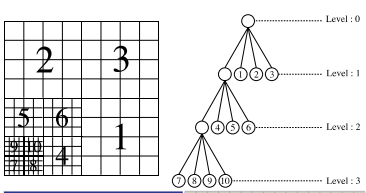


去年度実施した計算結果。AMR法と特性線解法を用いたスプーンに衝突する水の流れの単一計算。最も細かい格子を均一に割り当てた場合1024x1024x1024に相当する。

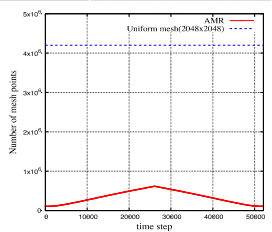
界面に適合する AMR法

木構造に基づく適合細分化格子

気液二相流計算では、計算領域中で気液界面などでは他の領域より圧倒的に高解像度で計算する必要がある。GPUで効率的に計算するために直交格子を木構造に基づき再帰的に細分化するAMR法を適用する。二次元の場合一つの葉(リーフ)に対応する領域が細分化される4つのリーフが生成される四分木のデータ構造となる。3次元の場合は八分木となる。GPU計算を効率的に行うために、リーフを8x8x8や16x16x16格子とし、メモリアクセスの局所的連続性を担保する。



界面移流のベンチマーク問題の一つであるSingle vortex問題をCPUで計算し、AMR法の効果を検証した。界面の符号付距離関数を元に格子細分化を行うことで時間と共に動く界面近傍に常に細かい格子を割り当てることが可能である。右中図のように、界面近傍に非常に細かい格子が集まっている。黒線はリーフ境界線を表しており、各リーフには4x4の格子が含まれている。最粗格子64x64均一格子相当、最細格子2,048x2,048均一格子相当となるような格子細分化を行い、均一2,048x2,048格子と比較して1/12.3の格子点数削減、9.26倍の計算時間短縮を達成した。



等温過程の解法

音速をパラメータとし、等温過程の圧縮性Navier-Stokes方程式を解く弱圧縮性流体解析手法を開発した。

$$\frac{\partial u}{\partial t} + (u \cdot \nabla) u = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \tau + F$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\rho C_s^2 \nabla \cdot u$$

音速 C_s は空間的に一律な値で、低マッハ数領域の計算となるように人工的に与える。移流項には安定性の高い3次精度WENOスキームを用い、その他の微分には2次精度中心差分法を用いた。時間積分には3次精度TVD-Runge Kutta法を用いる。界面捕捉手法には保存形Allen-Cahn方程式をLevelset法とカップリングして解く。格子配置はスタガード格子を用いることで、圧力と速度のカップリングを改善させ、安定性を向上させる。検証計算および高レイノルズ数流れに対する安定性、大規模計算に適用可能であるかの検討を行い、新規手法を用いた単一GPUによるAMR実装を行った。

粘弾性流体モデル

強い流体では薄い液膜の泡沫が長時間保持されるなど、泡沫崩壊のダイナミクスに強く影響を及ぼす要素である。ダンベルモデルの一種である以下のFENE-CRモデルを用いて粘弾性応力テンソルを解き、粘弾性を含めた泡沫崩壊のシミュレーションを行い、パラメータによる液膜形成過程の違いについて考察する。

FENE-CR model

$$\frac{\partial A}{\partial t} + u \cdot \nabla A = A \cdot \nabla u + \nabla u^T \cdot A - \frac{f(A)}{\lambda} (A - I)$$

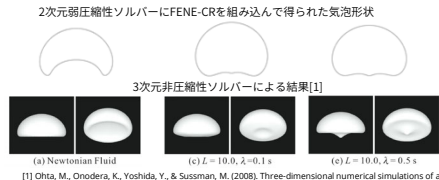
$$f(A) = \frac{1}{1 - \text{tr}(A)/L^2} \quad \tau_e = \frac{c\mu_s}{\lambda} f(A)A$$

Parameters

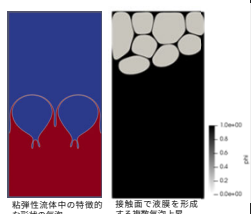
- $\mu_s = \mu_s + \mu_p = (1 + c)\mu_s$
- μ_s : viscosity of solvent (newtonian part)
- μ_p : viscosity of polymer
- C : parameter about concentration of polymer
- A : polymer configuration tensor
- L : extensibility parameter
- λ : relaxation time

$$\frac{\partial u}{\partial t} + (u \cdot \nabla) u = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \tau + F + \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \tau_e$$

2次元コードにFENE-CRモデルを組み込んで得られた試行計算の結果は、3次元の非圧縮性ソルバーを用いた参考文献の結果の特徴をよく捉える結果を得た。



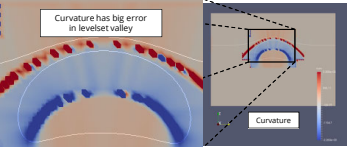
2次元弱圧縮性ソルバーにFENE-CRを組み込んで得られた気泡形状



粘弾性流体中の特徴的な形状の気泡。接触面で液膜を形成する複数の気泡上昇

表面張力項(曲率)計算法の改良

表面張力効果を見逃して液膜形成シミュレーションを実行すると、液膜は崩壊することなく拡散界面で解像できる限界の格子解像度まで薄く引き伸ばされる。表面張力は液膜の形成と崩壊に強い影響を及ぼし、CSF(Continuous Surface Force)モデルでは、密度スケーリングされたHeaviside関数の勾配と曲率を用いられるが、薄い液膜ではレベルセット関数の谷に当たる部分が界面近くに存在するため曲率計算の精度が著しく低下し、非物理的な液膜崩壊の一因となる。レベルセット関数が符号付き距離関数としての性質をどれほどよく保っているかを評価する指標関数 Q を導入する。



$$\text{Quality of Levelset: } Q(x) = |1 - |\nabla \psi(x)||$$

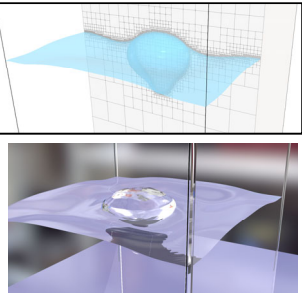
Q がある基準値(例えば0.05)より大きい場合、隣接点のうち Q が最小となる点の曲率を採用することで、深刻な誤差を含む曲率が計算に使われるのを防ぐ。



[2] Kim, B., Liu, Y., Llamas, L. & Rossgang, J. (2006). Simulation of Bubbles and Liquid Films. Retrieved from <http://arxiv.org/abs/physics/0605131>

界面で液膜を形成する気泡上昇

等温過程のナビエ-ストークス方程式を解く完全陽解法にAMR法を適用し、単一GPUコードを開発し、単一気泡が上昇して液面に衝突するシミュレーションを行なった。計算領域0.01x0.01x0.02 [m]に対してレベル差6をつけたAMR格子を適用し、最細格子を均一に割り当てた場合に1024x1024x2048に相当し、初期気泡直径に対して約307格子割り当てた計算となっている。液相にはシャボン玉水溶液を想定した20%グリセリン水溶液を用い、気相は空気とした。



気泡が液面に衝突後跳ね返って再び液面に衝突するという現象を再現することができた。また粘弾性モデルは導入されておらず、今後は粘弾性の液膜安定性への寄与とマランゴニ効果を考慮した計算を実行する。

界面活性剤の輸送及びマランゴニ効果の考慮

界面上での界面活性剤濃度輸送方程式

$$\frac{\partial}{\partial t} (f^* \delta_f + \nabla \cdot (f^* \delta_f u)) = D_f \nabla \cdot (\delta_f \nabla f^*) + \delta_f j^*$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\gamma f^* + \nabla \cdot (\gamma f^* u)) = D_\gamma \nabla \cdot (\gamma \nabla f^*) - \delta_f j^*$$

界面活性剤の吸着・脱離を含めた輸送によって界面上での濃度分布が変化し、濃度の濃い側から薄い側へ流動が起こる。この濃度によるマランゴニ効果を数値シミュレーションに組み込みことによって液膜を安定化させる。界面上の濃度及びバルク濃度の輸送方程式は拡散界面によって分布を持たせた式を解く。