

# 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 -

東京工業大学 学術国際情報センター

青木 尊之

# 共同研究体制

青木 尊之	東工大（研究代表者）	研究総括および計算手法からGPU実装に至る詳細な指示
白崎 実	横国大（副代表者）	気液界面における表面張力項の離散化と液膜安定性
小野寺 直幸	日本原子力研究開発機構	ノード間通信の最適化、Temporal Blocking
杉原 健太	東工大	固体衝突の物性パラメータ設定
松下 真太郎	東工大	弱圧縮性流体計算手法の改良、音速低減とAMR実装
渡辺 勢也	九大	GPUカーネルのチューニング
長谷川 雄太	日本原子力研究開発機構	階層的メモリ管理の実装

# 研究背景

非圧縮性気液二相流は日常的にも頻繁に現れるが、流体力学的に十分に理解されていない。現状の数値解析は、格子解像度が全く不足しており、学術的にも産業利用の観点でも、高解像度解析が求められている。

従来法の欠点：

- 大規模計算では非圧縮性条件を満足させるためのPoisson方程式（疎行列の反復計算）の収束性が大きく低下。
- 計算領域全域を均一に高解像度にすると、計算コストが膨大。

共同研究を実施した拠点名：[九州大学・情報基盤研究開発センター](#)  
[ITO サブシステムB](#)

# 弱圧縮性解法による完全陽解法

変数の説明

$\rho$  : 密度  
 $\mathbf{u}$  : 流速ベクトル  
 $p$  : 圧力  
 $\boldsymbol{\tau}$  : 粘性応力テンソル  
 $\mathbf{g}$  : 重力加速度  
 $F_{sf}$  : 表面張力  
 $C_s$  : 音速

流体の支配方程式

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \rho \mathbf{g} + \mathbf{F}_{sf} \quad : \text{運動量保存の式}$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \rho C_s^2 \nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad : \text{圧力発展方程式}$$

- 等温過程（温度が一定の圧縮過程）の導入 **2019年度**
- 弱圧縮性近似（流速が音速に比べて十分小さい）

ポアソン方程式の代わりに、音速 $C_s$ の音波伝播を含む圧力発展方程式を計算 **2019年度**

半陰解法から**完全陽解法**へ

人工的な音速の低減：Mach 数の制御（時間刻み $\Delta t$ を大きくし，計算の大幅な高速化）

現実よりも大きな圧縮：十分に非圧縮性流体と見なせる範囲内で制御

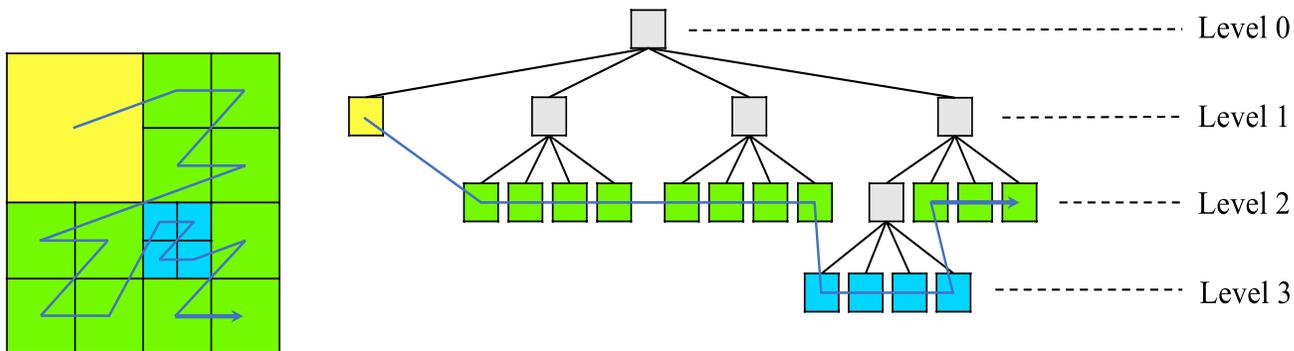
# AMR法のGPU実装

## 世界的に数少ない既往のAMRフレームワーク

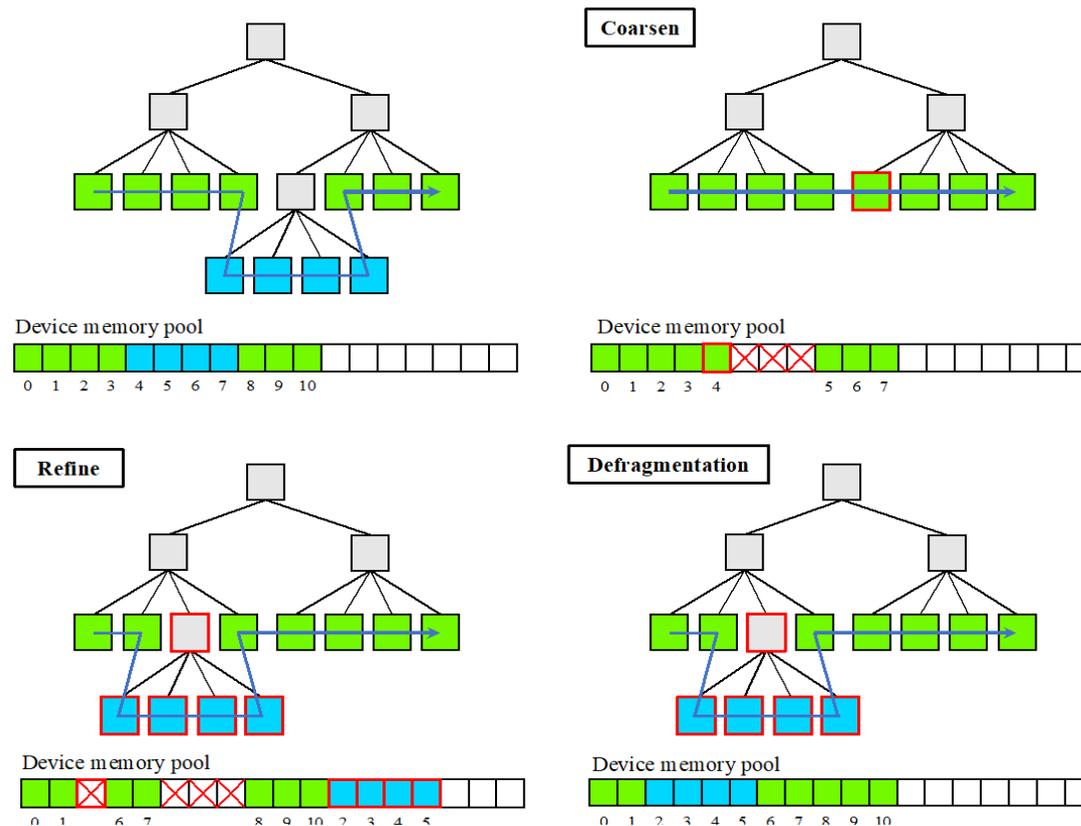
- ✓ WaLBerla: LBMの大規模並列計算が可能だがドイツのErlangen-Nuremberg大学で開発
- ✓ Basilisk: 気液二相流の半陰解法による並列計算が可能フランスのPopinetら研究者によって開発

- 気液二相流計算ができていない
- GPU実装ができていない
- 半陰解法の収束性悪化に縛られる

## 本研究のGPU実装



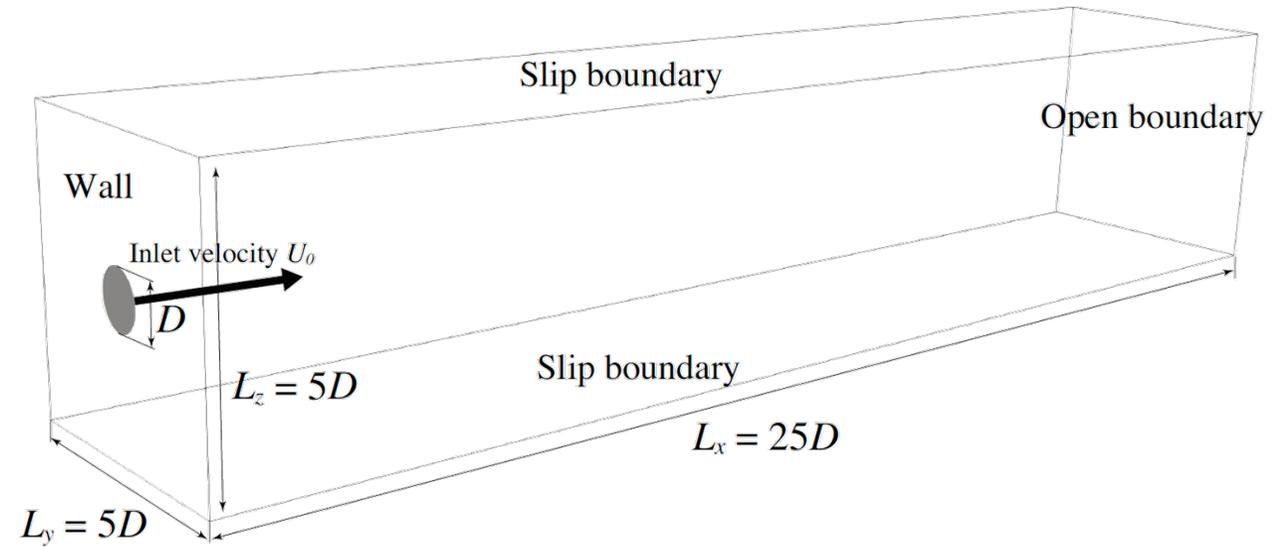
- ✓ リーフを空間充填曲線で結び、GPU上で並列計算を実行
- ✓ メモリ・プールを自分で用意し、動的にリーフの管理 (デ・フラグメンテーション)



# Jet flow計算による高速化の確認

## Liquid jet break up

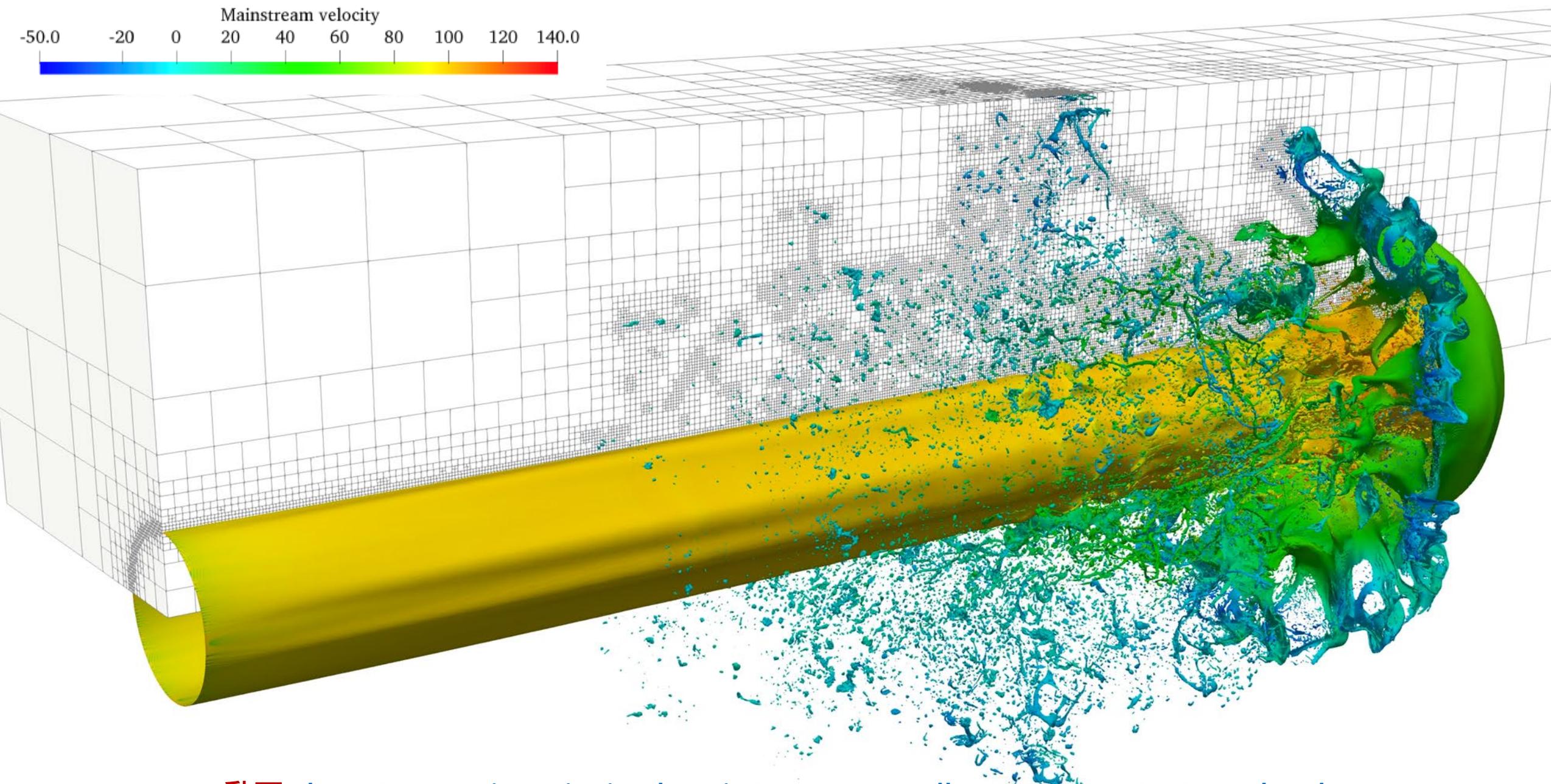
計算領域	25D x 2.5D x 2.5D ( for Quarter domain )
格子数	6400 x 640 x 640 ( for Quarter domain )
流入液柱径	10 <sup>-4</sup> [m] ( 256 dx )
流入流速	100 [m/s]
液相 : 気相	燃料 : 圧縮された空気
密度	848 : 34.5 [kg/m <sup>3</sup> ]
粘性係数	2.87 x 10 <sup>-3</sup> : 1.97 x 10 <sup>-5</sup> [Pa · s]
表面張力係数	0.03 [N/m]



Basiliskのベンチマーク問題

無次元時間を次のように定義 :  $t^* = t \frac{U_0}{D}$ .

\*Shinjo, J., & Umemura, A. (2010). Simulation of liquid jet primary breakup: Dynamics of ligament and droplet formation. *International Journal of Multiphase Flow*, 36(7), 513-532.  
<https://doi.org/10.1016/j.ijmultiphaseflow.2010.03.008>



動画 <http://www.sim.gsic.titech.ac.jp/Japanese/Gallery/contents/2019-02.html>

Mainstream velocity

-50.0 -20 0 20 40 60 80 100 120 140.0

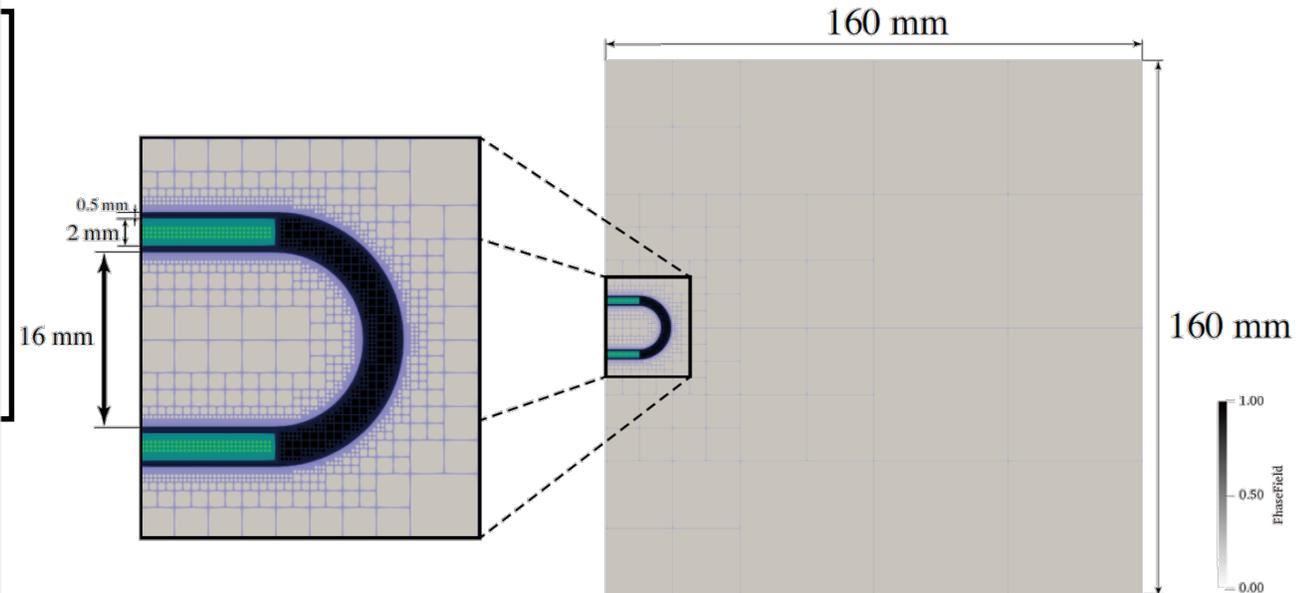
## 格子点数1/30以下に削減

非圧縮性ソルバー均一格子で解いた既往研究  
JSS (JAXAの1世代前のスパコン)の5760coreで  
 $410 \times 13.6 / 16 = 350$ 時間程度要する計算規模  
(TSUBAME 2.0 の1/3のシステムに相当)

➡ 1台のGPUで11時間で計算完了

# シャボン玉の形成過程

計算領域	0.16 x 0.16 [m]
格子数	均一な最細格子なら8192 x 8192相当
初期気泡内径 $D$	16 [mm] (819 dx)
液相 : 気相	20%グリセリン水溶液 : 空気
密度	1045.9 : 1.2 [kg/m <sup>3</sup> ]
粘性係数	$1.769 \times 10^{-3} : 1.8 \times 10^{-5}$ [Pa · s]
表面張力係数	0.02 [N/m]



流入条件は空間的にポアズイユ流れ，時間的には  
 $t=0.01$ sまで線形に加速

where :

$$u_{in}(y) = U \left( 1 - \frac{(y - y_c)^2}{R^2} \right), \quad U = 0.25 \text{ m/s}$$

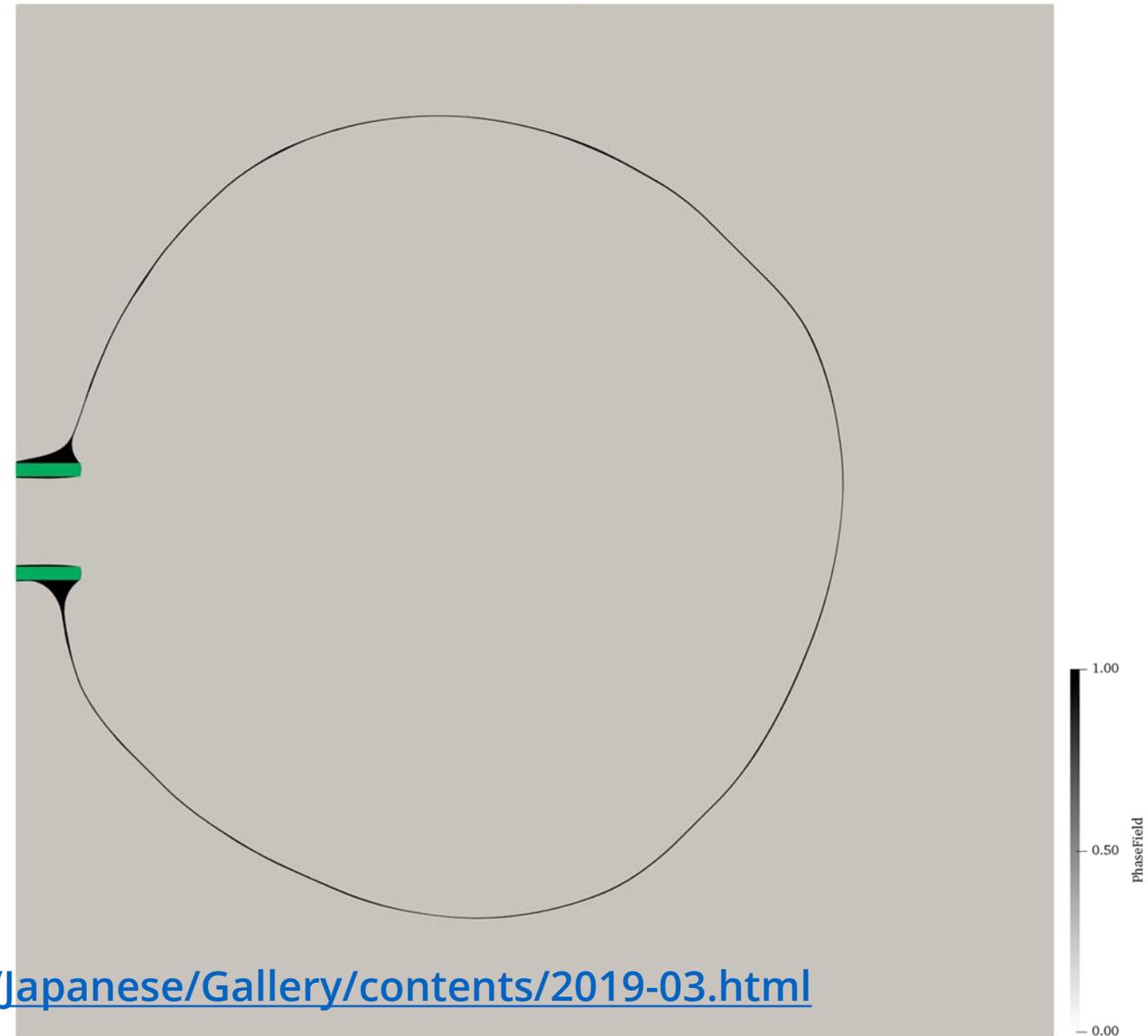
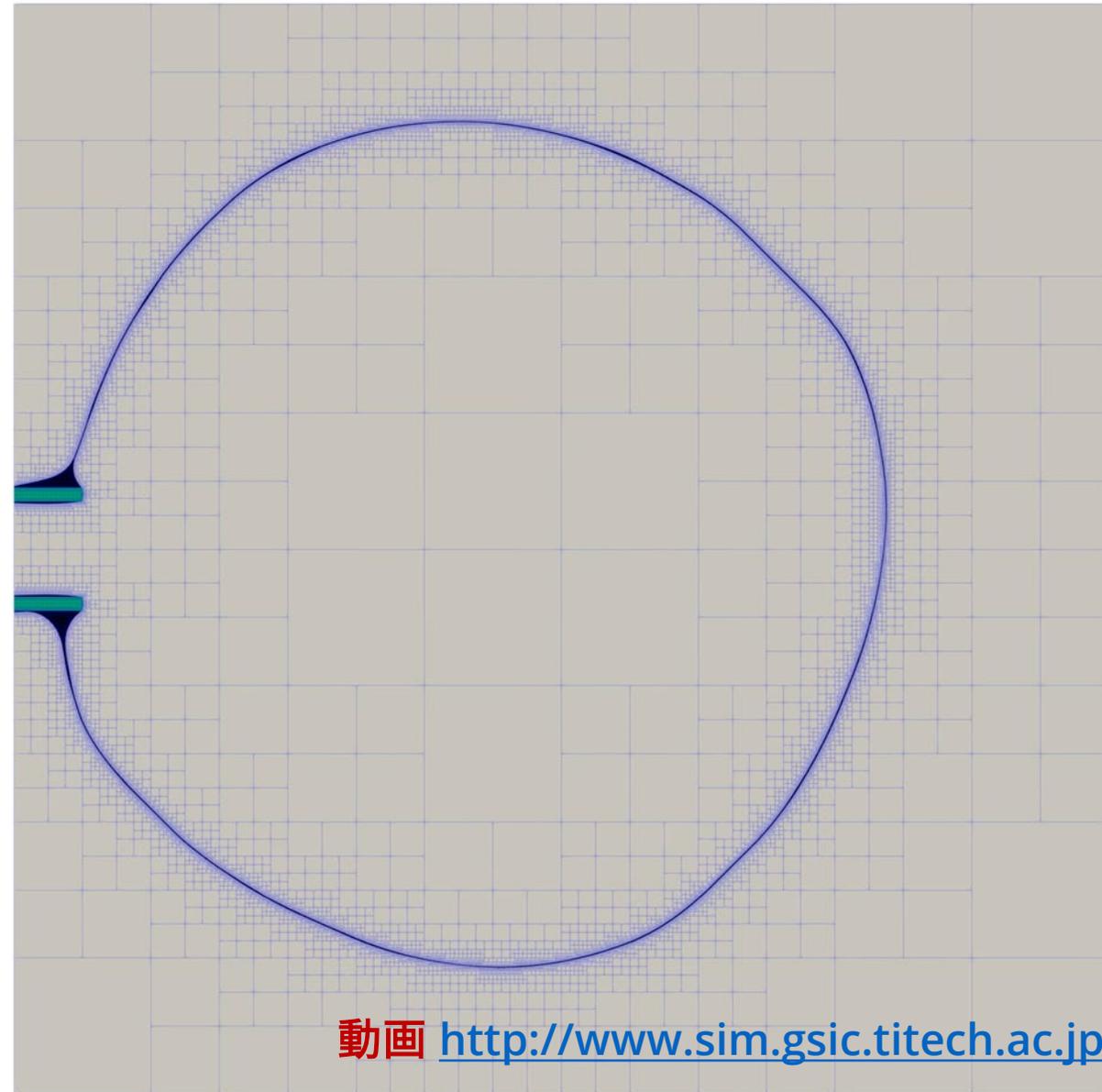
$$t_{ac} = 0.01 \text{ s}$$

$$u_{in}(y, t) = \min \left( u_{in}(y) \frac{t}{t_{ac}}, u_{in}(y) \right)$$

$$R = 0.5D$$

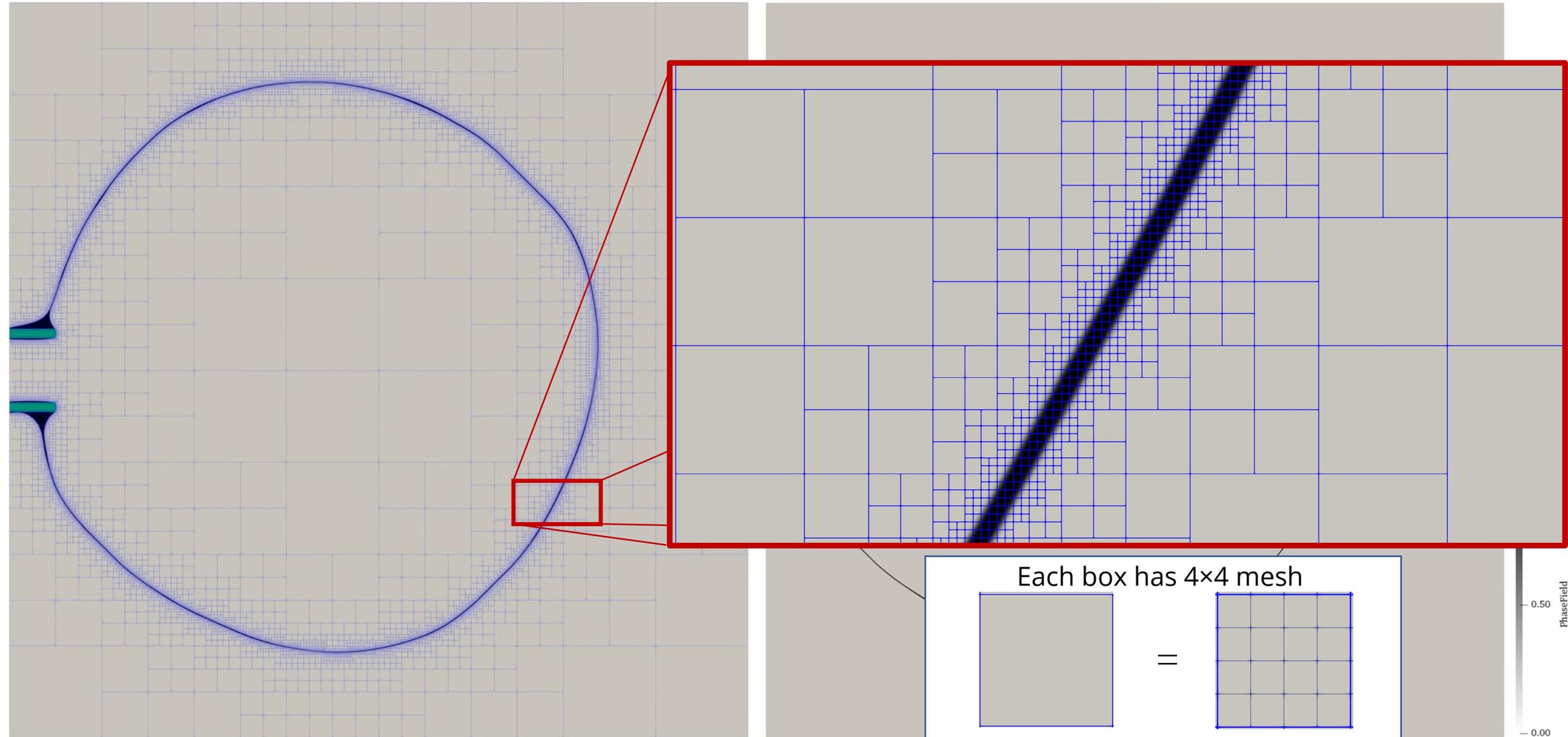
$$y_c = 0.08$$

# Soap Bubble Growing

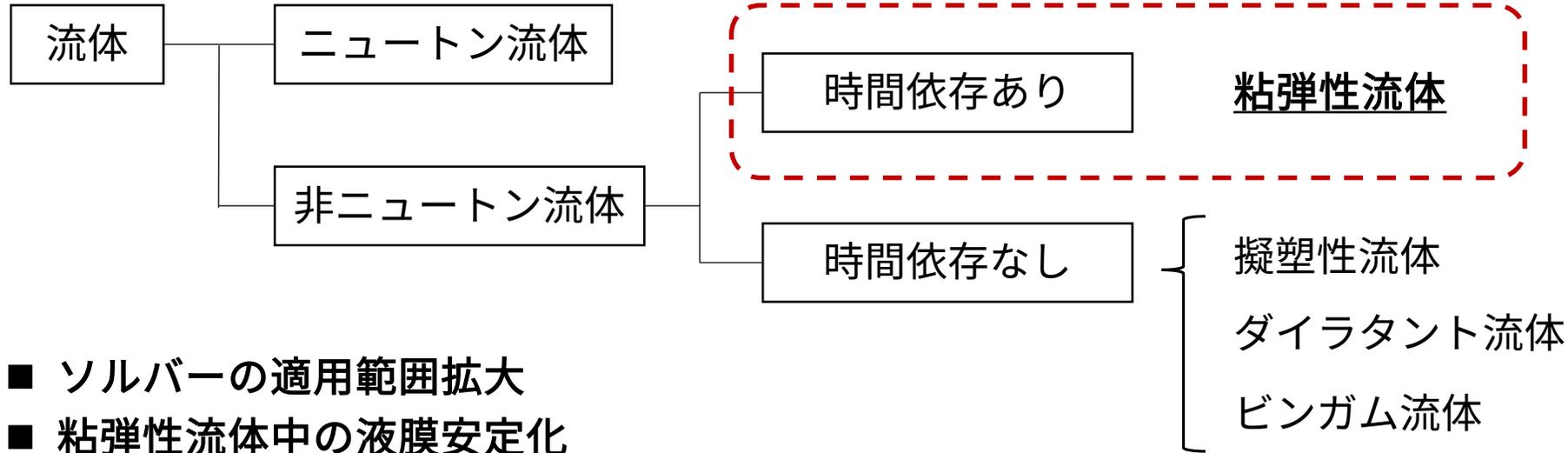


動画 <http://www.sim.gsic.titech.ac.jp/Japanese/Gallery/contents/2019-03.html>

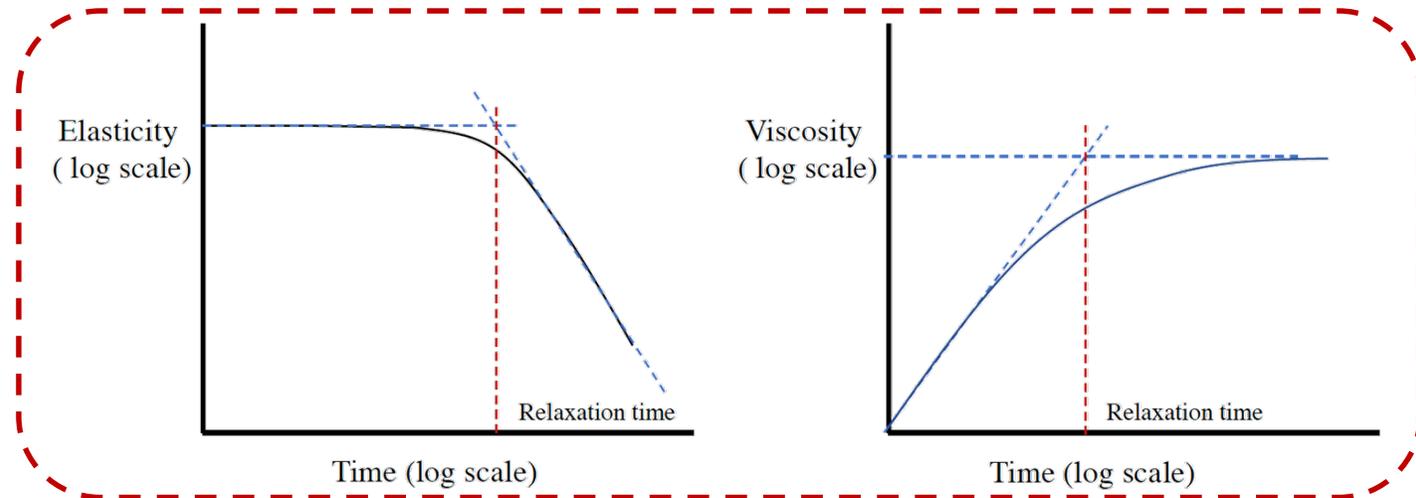
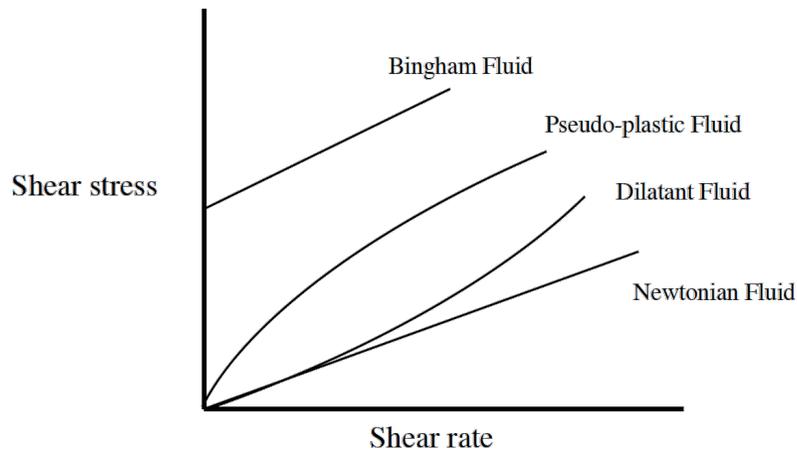
# Soap Bubble Growing



# 粘弾性流体解析



- ソルバーの適用範囲拡大
- 粘弾性流体中の液膜安定化



# FENE-CRモデル導入による粘弾性流体解析

粘弾性溶媒とニュートン性気相の弱圧縮性気液二相流解析

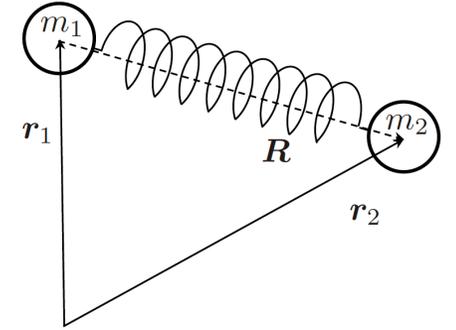
$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_s + \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_p + \frac{1}{\rho} \mathbf{F}$$

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

FENE-CRモデル:

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

高分子鎖をバネでモデル化した運動方程式:



$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \underbrace{-\zeta \left( \frac{d\mathbf{r}_i}{dt} - \mathbf{u}(\mathbf{r}_i) \right)}_{\text{流体から受ける抵抗力 (ストークスの抵抗)}} + \underbrace{(\mathbf{F}_B)_i}_{\text{周辺の溶媒分子のブラウン運動によるランダム力}} + \underbrace{\mathbf{F}_i}_{\text{バネの復元力}} \quad (i = 1, 2)$$

溶媒のテンソルを気相側へ外挿

$$\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial \tau} = \mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{A}$$

粘性係数をPhase field変数で計算

$$\boldsymbol{\tau}_p = \frac{\mu_p}{\lambda} f(\mathbf{A}) \mathbf{A}$$

$$\mu_p = \phi \mu_p$$

粘弾性液相+ニュートン性気相の気液二相流解析

# 粘弾性流体の検証計算

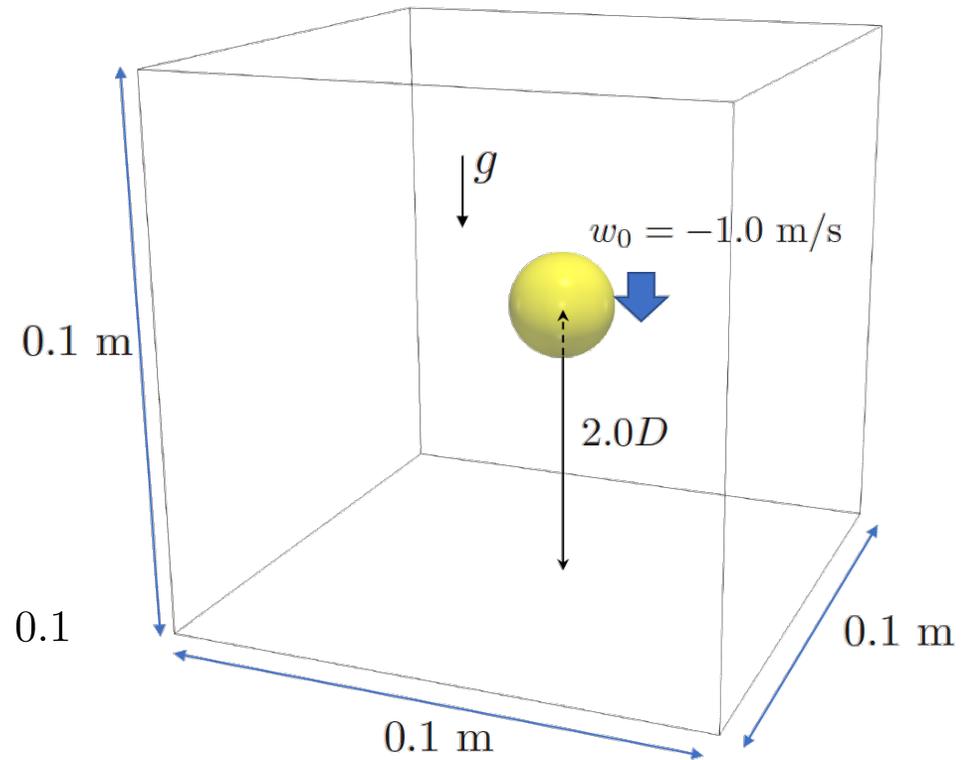
## 乾いた床へ衝突する粘弾性液滴問題

計算領域	0.1 x 0.1 x 0.1 [m]
格子数	256 <sup>3</sup> , 512 <sup>3</sup> 相当
初期気泡直径	0.02 [m] ( 51dx, 102dx )
密度比	1000
粘性比	1000
代表流速	1.0 [m/s]

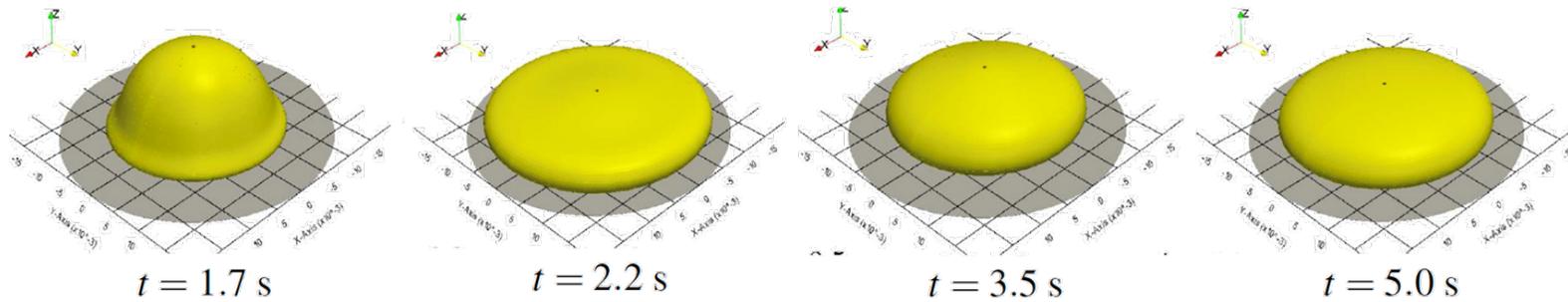
無次元数 :

$$Re = \frac{\rho UL}{\mu_0} = 5.0, Wi = \lambda \frac{U}{L} = 1.0, Fr = \frac{U}{\sqrt{gL}} = 2.26, \beta = \frac{\mu_l}{\mu_l + \mu_p} = 0.1$$

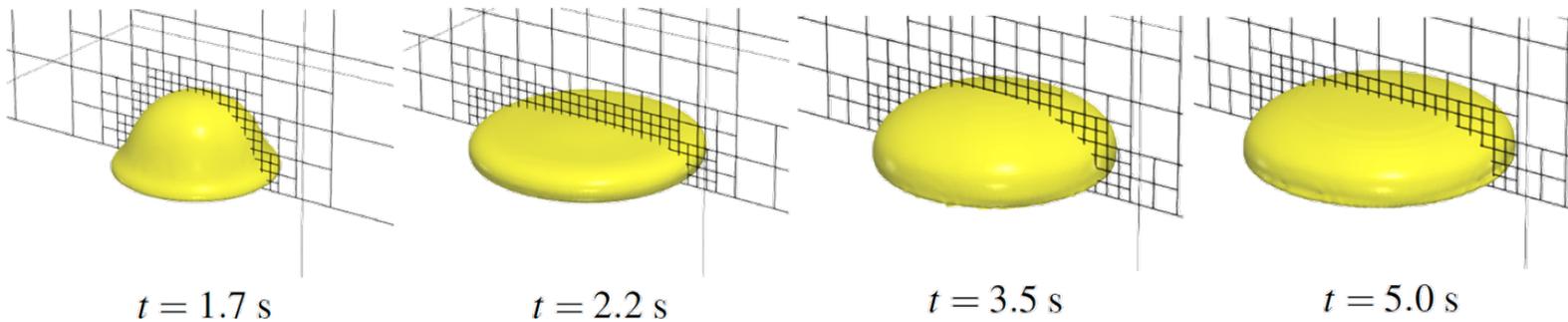
$$Ma = \frac{U}{c_s} = 0.03$$



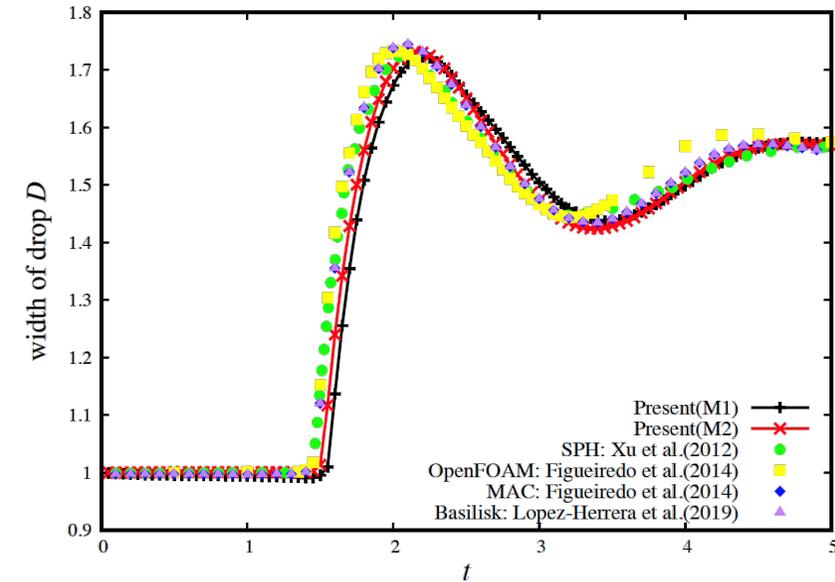
# 粘弾性流体の検証計算



非圧縮性ソルバーの結果\*



本手法の結果



\*Figueiredo, R. A., Oishi, C. M., Afonso, A. M., Tasso, I. V. M., & Cuminato, J. A. (2016). A two-phase solver for complex fluids: Studies of the Weissenberg effect. *International Journal of Multiphase Flow*, 84, 98–115. <https://doi.org/10.1016/j.ijmultiphaseflow.2016.04.014>

# 水面に達した気泡の液膜安定性への影響

計算するケース

	$L$	$De$
Case A-1	10	5
Case A-2	10	10
Case A-3	10	25
Case B-1	2	5
Case B-2	5	5

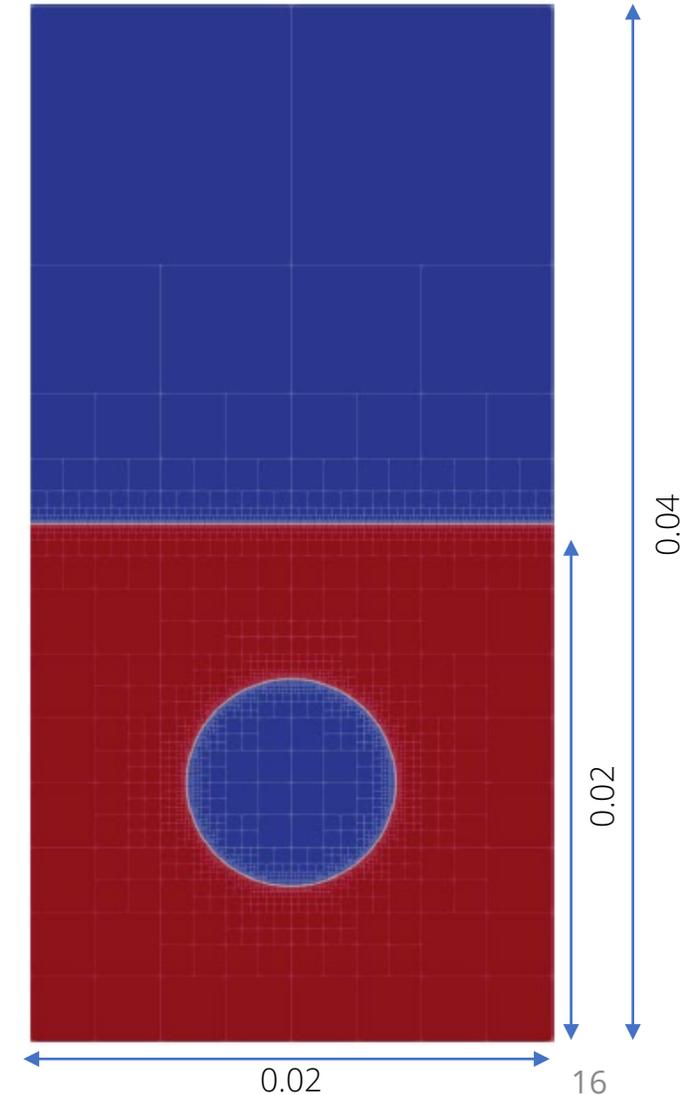
## 液面に衝突する気泡上昇問題

計算領域	0.02 x 0.04 [m]
格子数	512 x 1024 相当
初期気泡直径 $d$	8.0 [mm] ( 51dx, 102dx )
液相：気相	水：空気 (20°C)
表面張力	$72.8 \times 10^{-3}$ [N/m]
重力加速度	(0, -9.8) [m/s]

無次元数：

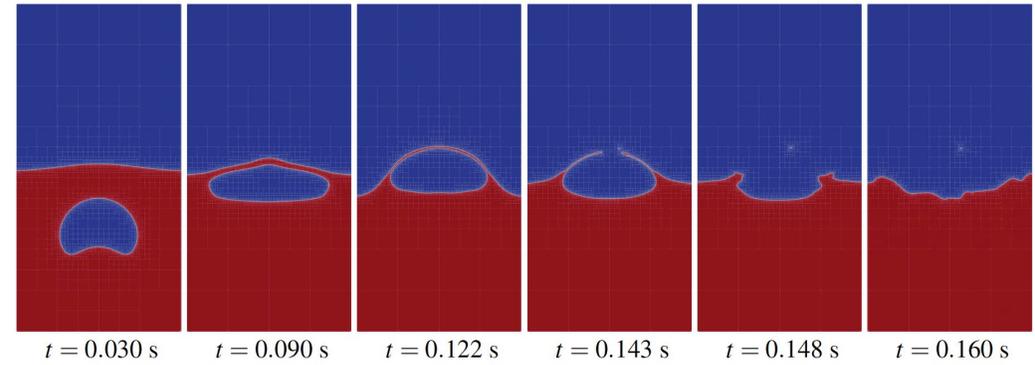
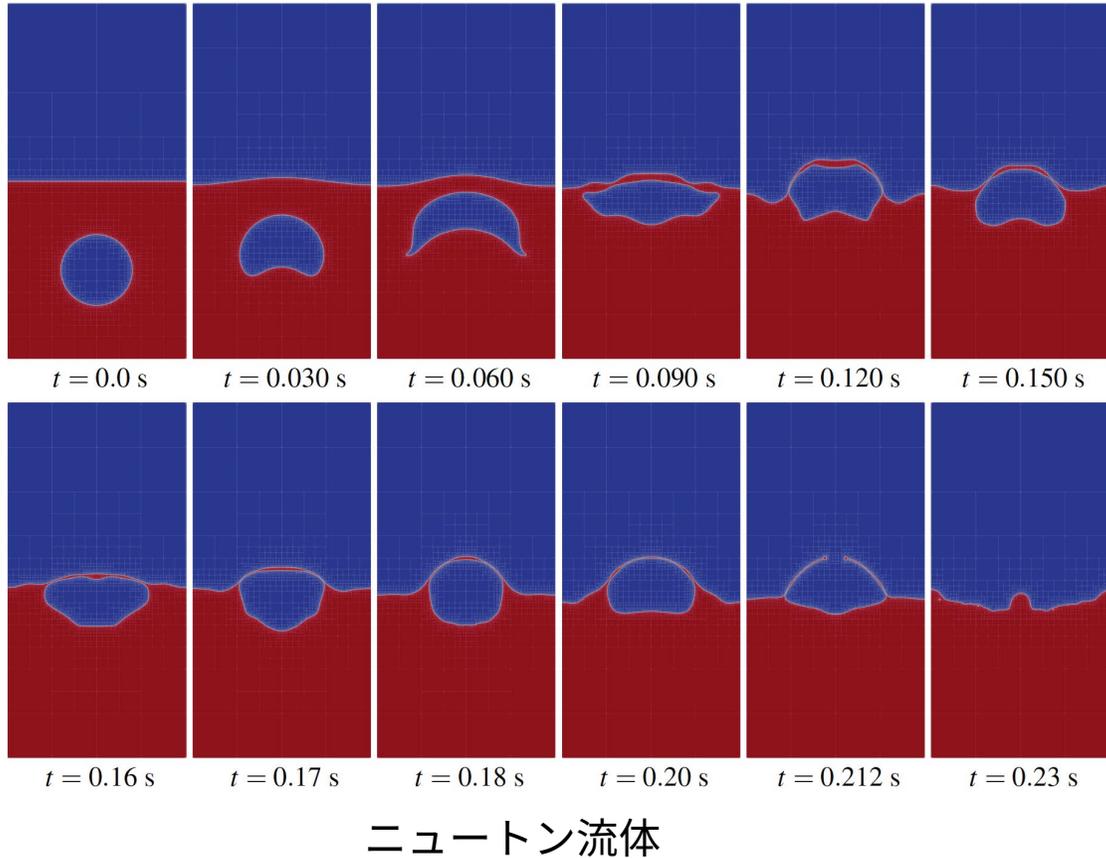
$$\beta = \frac{\mu_l}{\mu_l + \mu_p} = 0.1 \quad U = \sqrt{gh} = 0.313$$

$$De = \lambda \frac{U}{L}$$

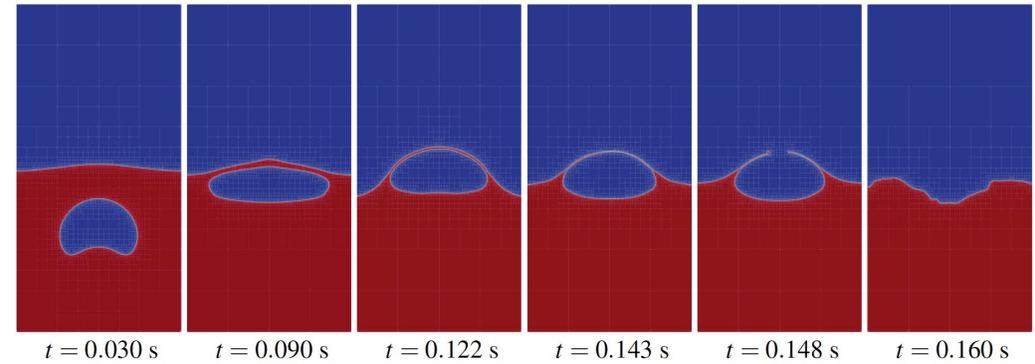


# 液膜安定性への影響

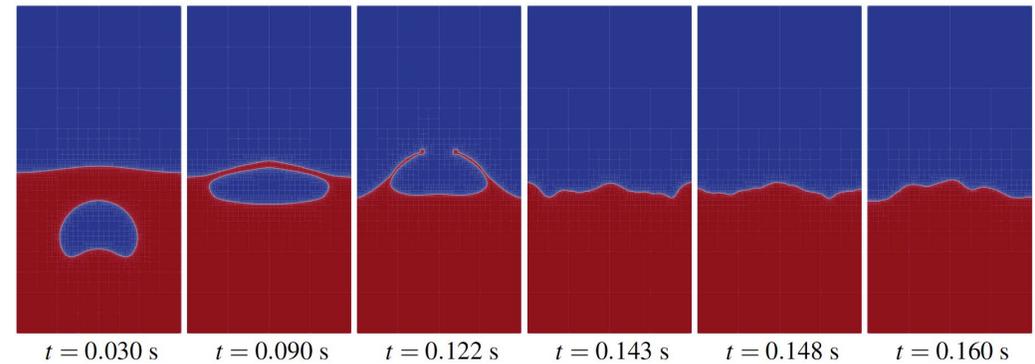
緩和時間の液膜への影響



(a)  $De = 5$



(b)  $De = 10$



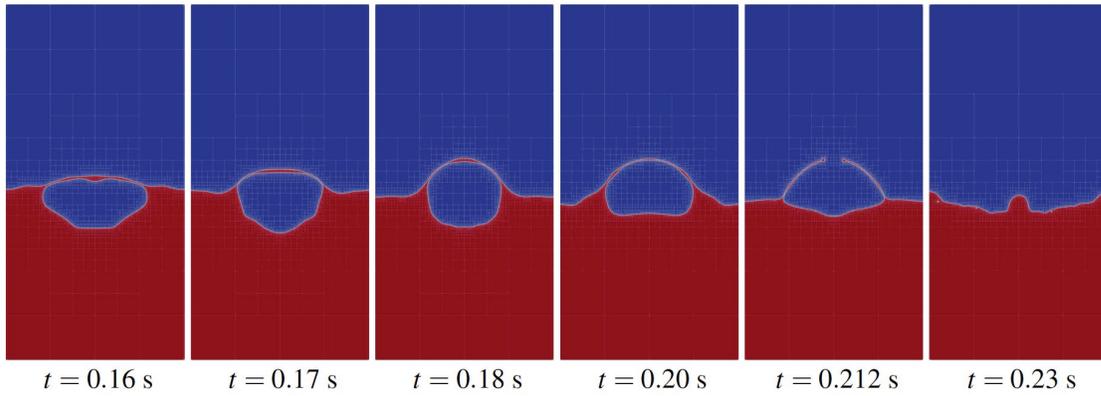
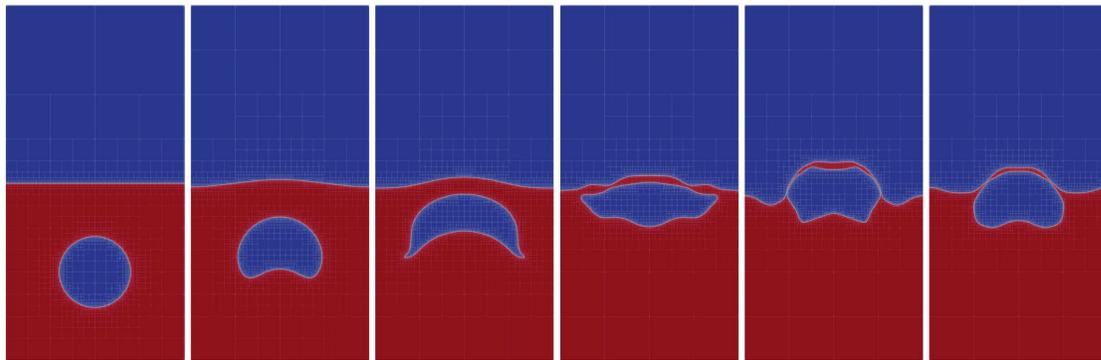
(c)  $De = 25$

粘弾性流体

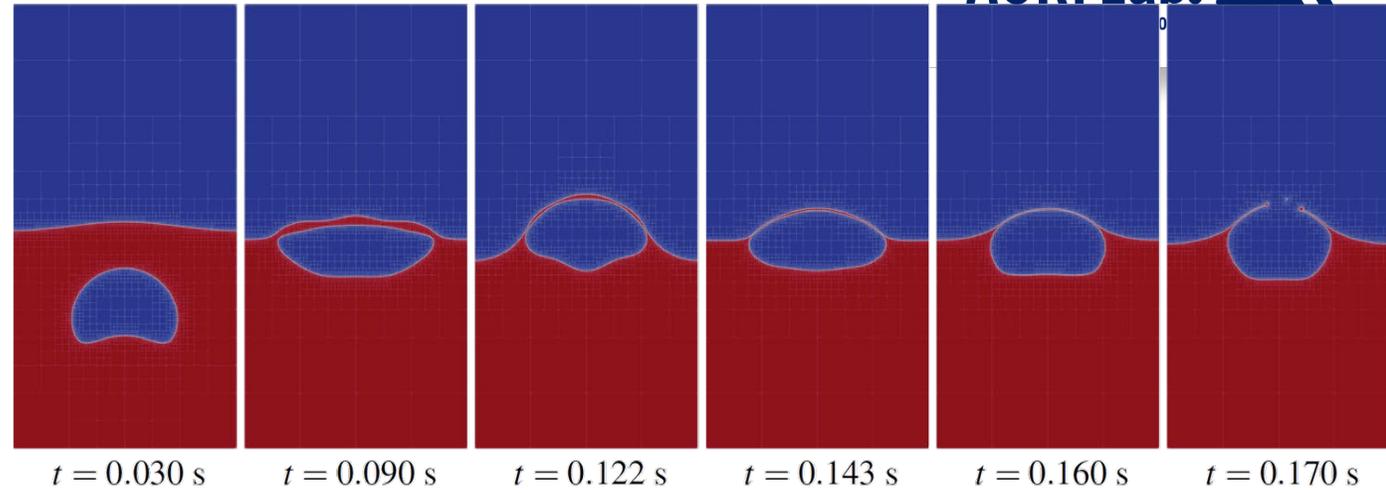


# 液膜安定性への影響

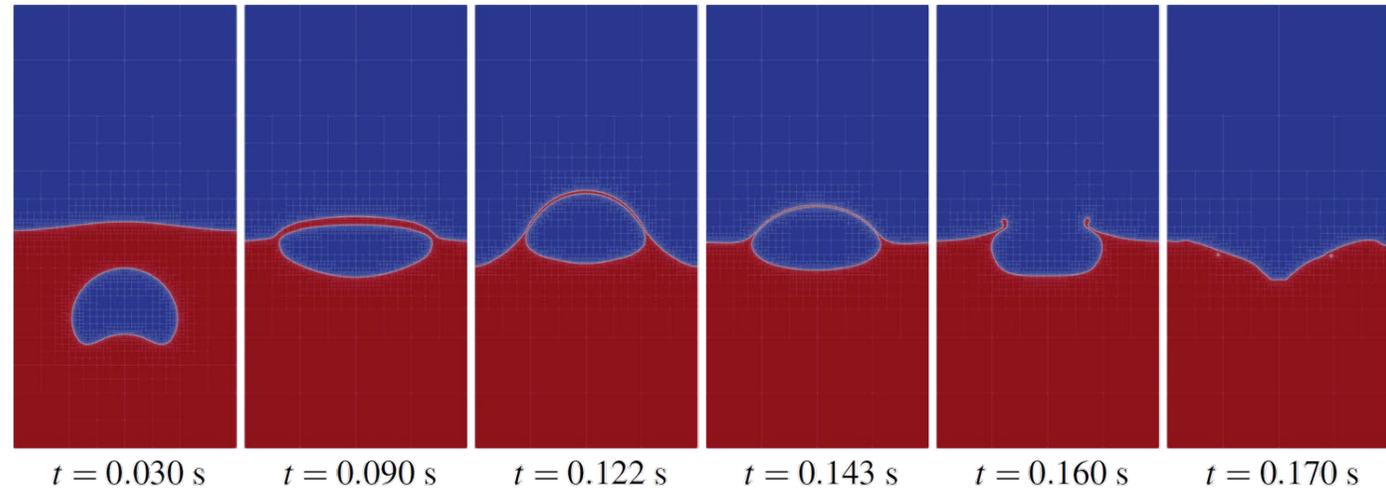
復元力パラメータの液膜への影響



ニュートン流体



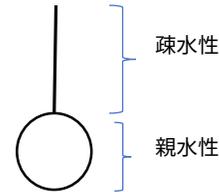
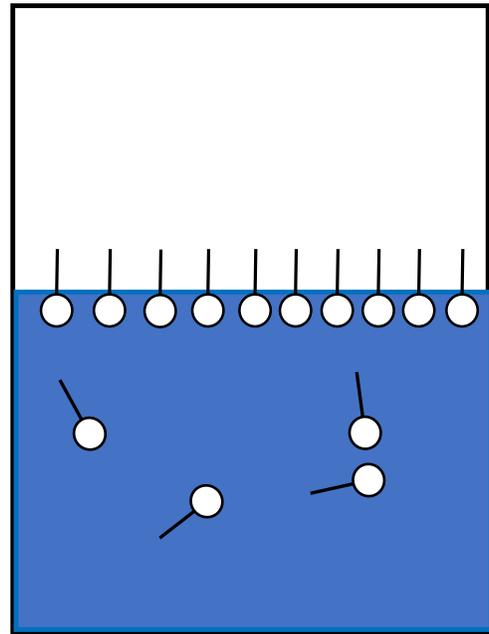
(a)  $L = 2$



(b)  $L = 5$

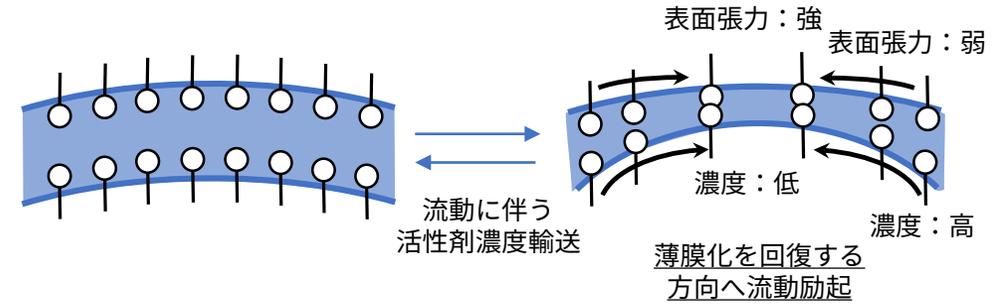
粘弾性流体

# 界面活性剤の吸着脱離を考慮した液膜計算



$k_{ad}$  : 吸着速度係数  
 $k_{de}$  : 脱離速度係数  
 $f_{lim}$  : 飽和濃度

<濃度差マランゴニ効果>



流体計算へ連成

界面活性剤の空間的な表面張力低下効果

界面活性剤

- イオン性界面活性剤  
水に溶けた時イオン
- 非イオン性界面活性剤**  
水に溶けた時に中性

Langmuir modelで記述できる非イオン性のみ扱う

アニオン界面活性剤		衣料用洗剤, シャンプー等
カチオン界面活性剤		衣料用柔軟剤, 殺菌剤等
両性界面活性剤		台所洗剤, シャンプー等

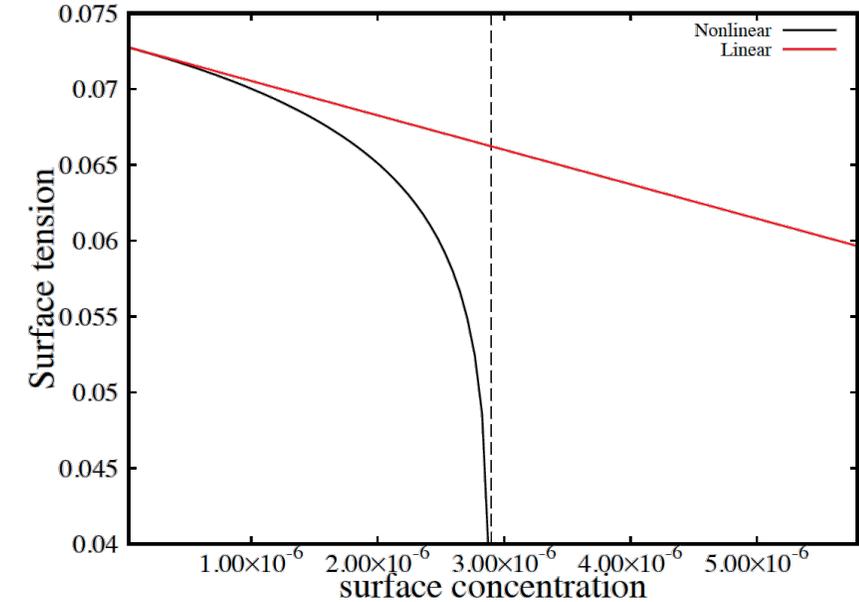
# 界面活性剤の吸着脱離の輸送方程式

界面活性剤輸送とマランゴニ効果を考慮した弱圧縮性気液二相流解析

バルク/界面上の界面活性剤移流・拡散方程式:

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla F = D_F \nabla^2 F + j \delta(\psi)$$

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \mathbf{f} - f(\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) = D_f (\nabla^2 f - \mathbf{n} \cdot \nabla \nabla f \cdot \mathbf{n} - \kappa \mathbf{n} \cdot \nabla f) + j$$



気相側への外挿+界面周辺へ分布作成

$$\frac{\partial f}{\partial \tau} + S(\psi) \mathbf{n} \cdot \nabla f = 0$$

$$\frac{\partial F}{\partial \tau} = S(\psi) \mathbf{n} \cdot \nabla F$$

マランゴニカ

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_{\text{marangoni}} &= \nabla_s \sigma(f) \delta_\Gamma \\ &= (\mathbf{I} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}) \nabla \sigma(f) \frac{6}{\epsilon} \phi^2 (1 - \phi)^2 \end{aligned}$$

Langmuir equation of state :

$$\sigma(f) = \sigma_0 \left[ 1 + \frac{RT f_{\text{lim}}}{\sigma_0} \ln \left( 1 - \frac{f}{f_{\text{lim}}} \right) \right]$$

$$\sigma(f) = \sigma_0 \left[ 1 + \frac{RT f_{\text{lim}}}{\sigma_0} \ln \left( 1 - \frac{\min(f, kf)}{f_{\text{lim}}} \right) \right]$$

$$k = 0.95$$

# 水面に達した気泡の液膜安定性

## < 水面に到達する気泡上昇問題 >

計算領域	0.02 x 0.04 [m]
格子数	512 x 1024 相当
初期気泡直径 $d$	8.0 [mm] ( 51 $\Delta x$ , 102 $\Delta x$ )
液相：気相	水：空気 (20°C)
表面張力	72.8 x 10 <sup>-3</sup> [N/m]
重力加速度	(0, -9.8) [m/s]

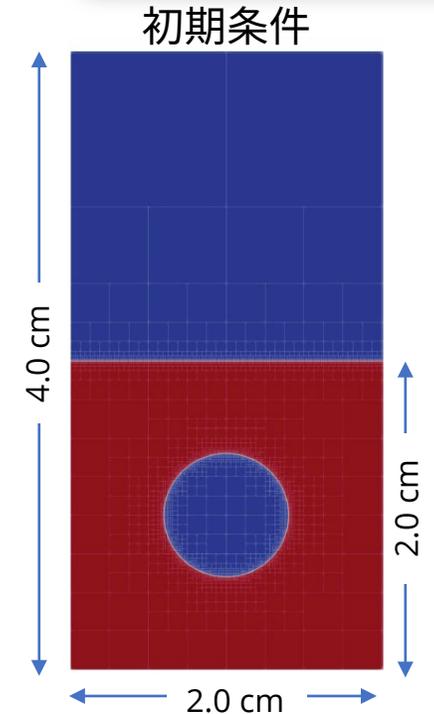
$k_{ad}$  : 吸着速度係数

$k_{de}$  : 脱離速度係数

$f_{lim}$  : 飽和濃度

## 実際の界面活性剤の物性値を使用

	$k_{ad}$ [ m <sup>3</sup> / ( mol · s ) ]	$\beta$ [ mol / m <sup>3</sup> ]	$f_{lim}$ [ mol / m <sup>2</sup> ]	$k_{de}$ [ s <sup>-1</sup> ]
Triton X-100	50	6.6 × 10 <sup>-4</sup>	2.9 × 10 <sup>-6</sup>	0.033



## 溶液濃度 $F_0$ を変えることでラングミュア数 $La$ を変化させて計算

$$La = \frac{F_0 k_{ad}}{k_{de}}$$

	$F_0$ [ mol / m <sup>3</sup> ]	$La$
Triton X-100	1.0 × 10 <sup>-4</sup>	0.15
	1.0 × 10 <sup>-3</sup>	1.5
	1.0 × 10 <sup>-2</sup>	15



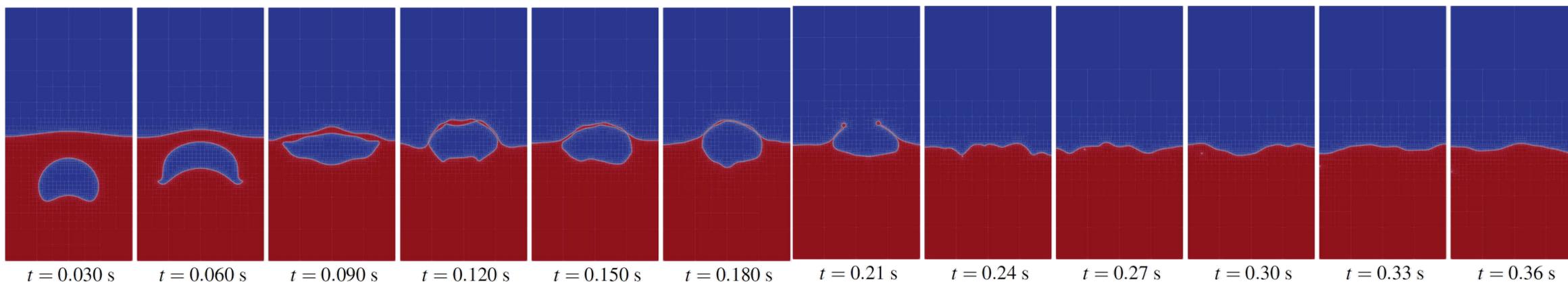
$La$  数が高いほど吸着特性が支配的

# 界面活性剤による液膜の安定化

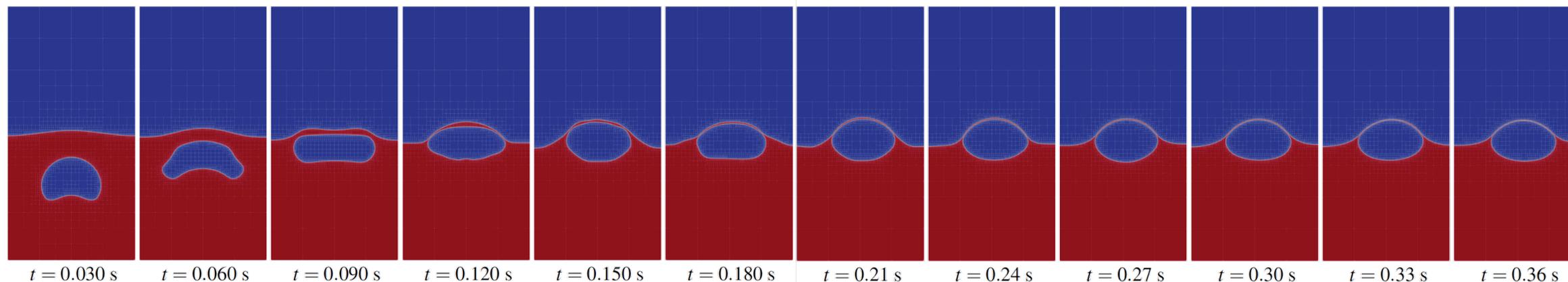
初期の界面上活性剤濃度を0として計算

$$j(t=0) = 0$$

$$La = 0.15$$

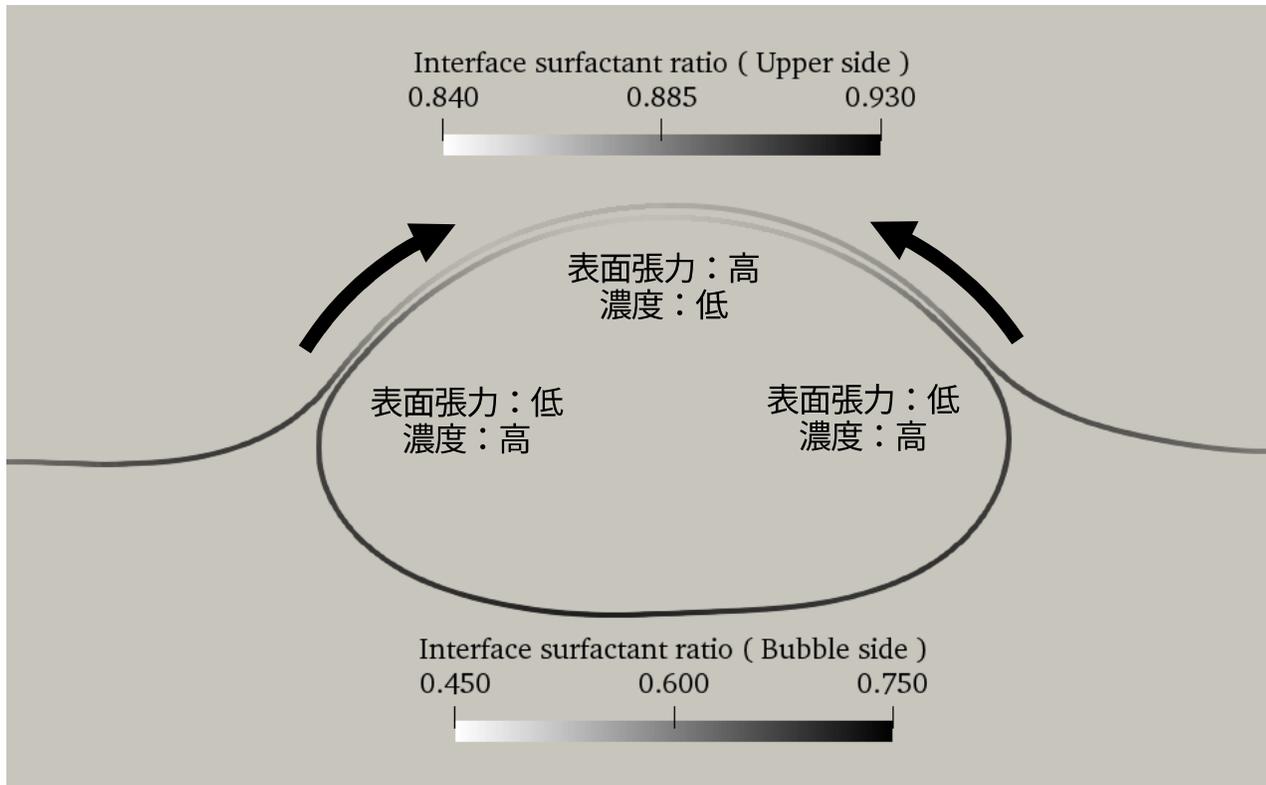


$$La = 1.5$$



# 濃度差マランゴニ効果による液膜安定化

界面上の界面活性剤濃度  
の飽和濃度に対する比率  $\frac{f}{f_{lim}}$



$t = 0.25 \text{ s}$

- 気泡上昇に伴い、界面活性剤は気泡後方へ輸送される
- 液体自由膜形成後は重力によって界面活性剤濃度は気泡中心より気泡左右の方が高くなる
- 界面活性剤濃度が高い方から低い方へマランゴニ効果が働き、重力と逆方向の力によって液膜が安定化

# 泡沫 (Foam) シミュレーション

## 準安定な液膜で隔壁が構成された気泡群：

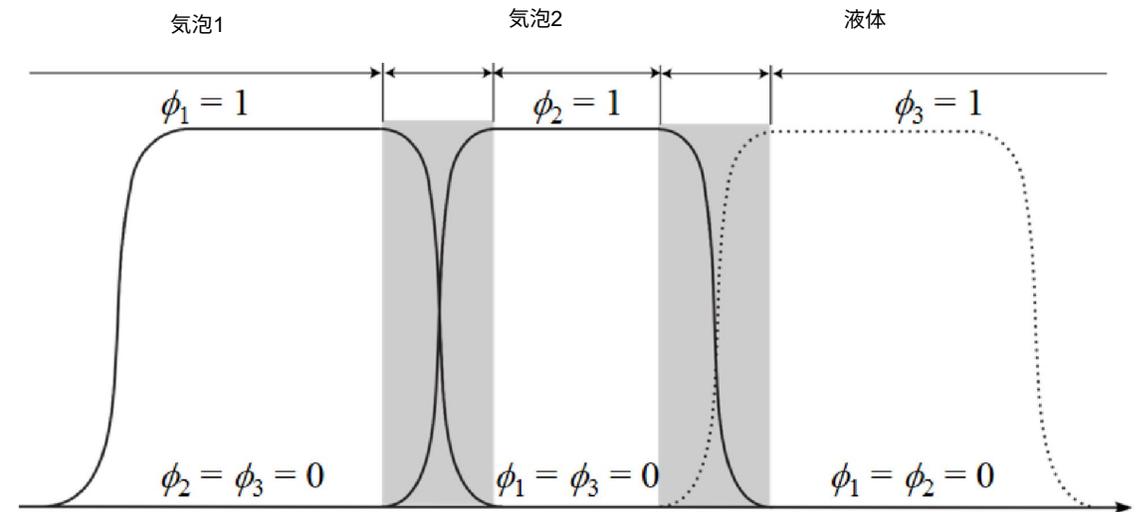
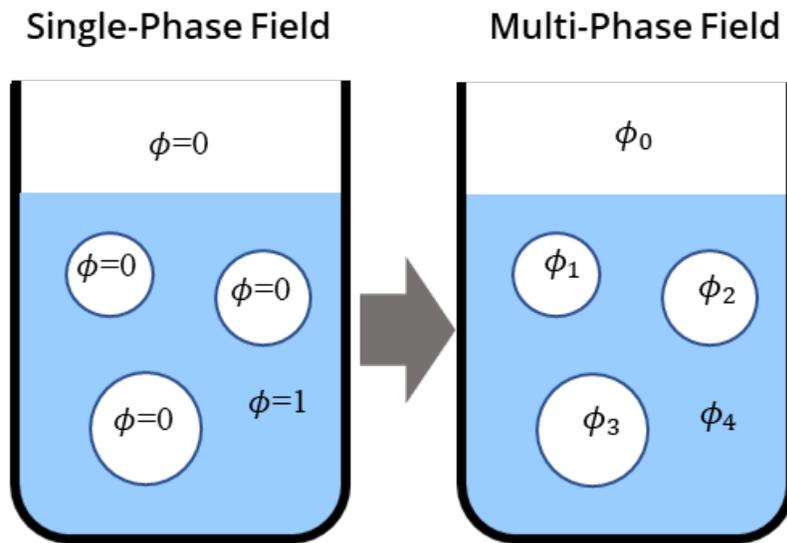
食品：ビールの泡、パン、マッシュマロ、ホイップクリーム、抹茶、カプチーノ  
工業製品：発砲スチロール、軽量素材、洗剤、化粧品、・・・

## 超難易度の数値シミュレーション：

非常に薄い液膜の気液二相流（気泡径に対する液膜厚さのマルチスケール）  
気液界面での界面活性剤等の輸送、非ニュートン性の顕在化  
液膜を介した物質輸送・熱伝達

# MPFによる泡沫シミュレーション

## MPF (Multi-Phase Field) 法の導入

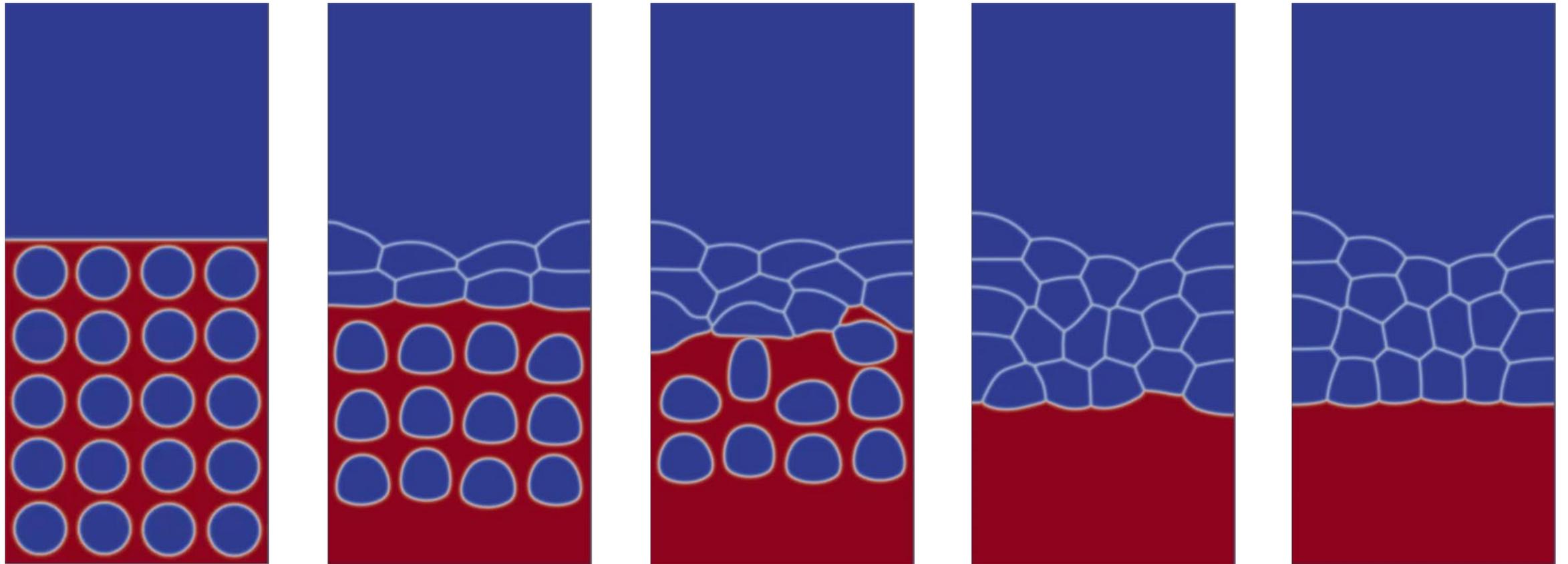


Transactions of JSCES, Paper No.20130018

「多結晶粒成長シミュレーション」 岡本成史, 山中晃徳, 下川辺隆史, 青木尊之

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi_i \mathbf{u}) = D \left[ \nabla \cdot \left\{ \nabla \phi_i - B \phi_i (1 - \phi_i) \frac{\nabla \phi_i}{|\nabla \phi_i|} \right\} - \frac{\phi_i^2}{\sum_{j=1}^N \phi_j^2} \sum_{j=1}^N \left[ \nabla \cdot \left\{ \nabla \phi_j - B \phi_j (1 - \phi_j) \frac{\nabla \phi_j}{|\nabla \phi_j|} \right\} \right] \right]$$

# MPFによる泡沫シミュレーション



2020年度 JHPCN 課題：JH200018

# Summary

- 弱圧縮性気液二相流計算手法に等温過程を導入：気液界面に細かい格子を適合させるAMR法とGPU実装をさらに発展
  - シャボン玉の形成過程：直径12.5cm（膜厚117 $\mu$ m）
  - 粘弾性（非ニュートン性）気液二相流シミュレーション
  - 界面活性剤の輸送を考慮：マランゴニ効果（液膜安定化）
- 今後の課題
  - 動的負荷分散の導入し、大規模計算
  - MPF法による泡沫シミュレーションの研究展開  
(jh20018-NAH)

# 研究業績

S.Matsushita, T.Aoki: Gas-liquid two-phase flows simulation based on weakly compressible scheme with Interface-adapted AMR method (J. Comput. Phys., submitted)

Yos Sitompul, Takayuki Aoki: A Filtered Cumulant Lattice Boltzmann Method for Violent Two-phase Flows, J. Comput. Phys, Vol 390, No.1, pp.93-120, 2019  
<https://doi.org/10.1016/j.jcp.2019.04.019>

国際会議発表	4
国内発表	5
解説記事	1 (注目研究in CFD32, 日本流体力学会誌)

学術賞： 松下真太郎, 青木尊之 グラフィックスアワード特別賞, 第24回計算工学講演会, 大宮, 2019年5月30日

# 謝 辞

本研究は、科研費・基盤研究（S）課題番号19H05613「自由界面を含む混相流の革新的数値流体シミュレーション」（2019年度～2023年度：研究代表者青木尊之）からの補助を受けています。