

流体—粒子間相互作用を考慮した振動流中の不均一粒子群の 3 次元並列計算

牛 島 省*・瀬 津 家 久**

1. はじめに

粒径や比重などの物性値が均一でない混合砂が海岸の底質を構成する場合、その移動機構や分級過程を明らかにすることは海浜変形の評価を行う場合にきわめて重要である。このような混合砂を球形粒子の混合物と見る場合、周囲流体の影響下で発生する粒子の一樣分散あるいは偏析現象は、海岸工学や水工学などをはじめ、多くの工学分野で検討が進められてきた課題であり、実験的な考察に加えて、最近では個別要素法 (DEM) を用いた数値解析的な研究 (例えば、原田ら, 2000) も見られる。

DEM による数値解析は、このように数密度の高い粒子混合物の挙動を把握するために有効であるが、従来の解析手法をより有効なものとするためには、1) 計算手法の 3 次元化、2) 扱える粒子数の増加させるための計算速度の向上、3) 複雑な形状の計算領域に対する適用性の拡張、4) 可視化機能の付加、などが課題とされる。これらの課題を解決するための 1 つの方策として、領域分割・並列計算手法 (Ushijima ら, 2000) に基づく粒子運動の計算手法が提案されている (牛島ら, 2001)。この計算手法は流体に対する粒子の影響が無視できる、気体中の大粒径粒子を対象とするため、流体と粒子間の相互作用は、one-way model により取り扱われている。しかしながら、one-way model の適用範囲は、一部の固気混相流に限られるため (Hinze, 1975)、海岸や河川などの水流 (液相) 中における粒子運動の計算には必ずしも適切ではない。従って、本報では、前報 (牛島ら, 2001) の計算手法を、各相の相互作用を考慮した two-way model に基づく手法へ発展させるための検討を行う。

本報では、既往の計算手法に見られる上記 1) から 4) の課題を考慮して、two-way model による計算手法を構築するため、2 レベルの並列計算手法を提案する。これは、流体計算と DEM による粒子運動の計算の並列化 (level-1) と、領域分割に基づく各相の計算の並列化 (level-2) を利用するものである。level-1 の並列化により、液相と粒子の計算が時間進行を同期させつつ非定常

的に進められ、各計算ステップごとに両相の相互作用が考慮される。また、level-2 の領域分割・並列計算法により、計算速度の向上や複雑な境界形状の扱いが可能となる。さらに、前報 (牛島ら, 2001) と同様に可視化プロセスを level-2 の粒子計算プロセスと並列的に実行することで、計算過程の可視化表示を行う。本報では、提案された計算手法を用いて振動流中の粒子混合物を想定した数値実験を行い、その適用性を考察する。

2. 液相の数値解析法

粒子の周囲に存在する液相に対しては、Euler 的に導かれた支配方程式を離散化し、これを差分法により解析する。領域分割・並列計算法に基づく解法を利用するため、最初に与えられた計算領域を複数のサブブロックに分割する。ブロック分割の際には、計算負荷を平準化すること、また全体の領域が複雑な形状の場合には、形状の模擬性を良好にすること、などが考慮される。

サブブロックの形状が決定された後、各サブブロックに対して独立に 3 次元境界適合座標系を生成する。サブブロック間の共有境界面においては、計算格子点の重合はなく、各ブロックの境界面が接触するものとなる。共有境界面近傍で変数の 3 次スプライン内挿が行われるため、面上で各ブロックの格子点は一致しなくてもよい。

境界適合座標系は、Thompson ら (1985) と同様に、物理空間および写像空間中の座標成分 (それぞれ x_i および ξ_m ; $i, m=1, 2, 3$) から構成されるポアソン方程式を逆変換した次式により生成される。

$$\left(\frac{\partial^2 x_i}{\partial \xi_p \partial \xi_q}\right)^* \left(\frac{\partial \xi_p}{\partial x_j}\right)^* \left(\frac{\partial \xi_q}{\partial x_j}\right)^* + \frac{\partial^2 x_i}{\partial \xi_s \partial \xi_s} \left(\frac{\partial \xi_r}{\partial x_j}\right)^* \left(\frac{\partial \xi_s}{\partial x_j}\right)^* + P_m \left(\frac{\partial x_i}{\partial \xi_m}\right)^* = 0 \quad \dots (1)$$

座標生成時の計算精度を高めるため、上式中の*記号がついた項を、中央差分ではなく 3 次スプライン関数を用いて評価することとしている (Ushijima, 1994)。なお、(1) 式中の P_m は、物理空間中のメッシュ間隔の粗密を制御するためにユーザが設定する関数である。このようにして、全体の計算領域は境界適合座標系で表現された複数のサブブロックの集合体として扱われる。

* 正 会 員 工 博 京都大学助教授 環境地球工学専攻
** フ ェ ロ ー 工 博 京都大学教授 環境地球工学専攻

液相の基礎方程式はアンサンブル平均がなされた連続式と運動方程式、そして乱れエネルギーとその散逸率の輸送方程式から構成される。Cを固相の体積濃度の平均成分とすると、液相の連続式は次式で与えられる。

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\phi U_{fi}) = 0 \quad (2)$$

上式中で、 U_{fi} は液相の x_i 方向の平均流速成分、 $\phi=1-C$ である。また、固液混相流に対する二流体モデルを用いる場合、液相の運動方程式は一般に次式のように表される(牛島ら, 2000)。

$$\begin{aligned} \frac{D_f U_{fi}}{Dt} = & \frac{1}{\phi} F_i - \frac{1}{\phi} \frac{1}{\rho_f} \frac{\partial P}{\partial x_i} \\ & - \frac{1}{\phi} \frac{\partial}{\partial x_j} (\phi \overline{u'_{fi} u'_{fj}}) + \nu_f \frac{\partial^2 U_{fi}}{\partial x_j^2} \\ & - \frac{18 \nu_f}{d^2} \frac{1}{1-C} [C(U_{fi} - U_{pi}) + \overline{c' u'_{fi}} - \overline{c' u'_{pi}}] \end{aligned} \quad (3)$$

ここに、 D_f/Dt は液相流速に基づくLagrange微分、 F_i は重力などの外力、 P は液相の平均圧力、 ν_f は液相の動粘性係数、 ρ_f は液相の密度、 d は粒子の代表粒径、 U_{pi} は固相の平均流速成分である。プライム付の小文字の変数は変動成分を表す。(3)式右辺第5項は、固相から受ける粘性抵抗力に相当する。ここでは、同項中に含まれる固相の乱流量の評価が困難であるので、平均速度成分のみを考慮することとした。

液相の乱れエネルギーとその散逸率に対しては、単相流に対して導かれた方程式を用いる。これらは、写像空間中において以下のように表される。

$$\begin{aligned} \frac{Dk}{Dt} = & \epsilon_m \left(\frac{\partial u_i}{\partial \xi_n} \frac{\partial \xi_n}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial \xi_n} \frac{\partial \xi_n}{\partial x_i} \right) \frac{\partial u_i}{\partial \xi_m} \frac{\partial \xi_m}{\partial x_j} \\ & + \left(\nu + \frac{C_k}{C_\nu} \epsilon_m \right) \left(\frac{\partial^2 k}{\partial \xi_m \partial \xi_n} \frac{\partial \xi_m}{\partial x_j} \frac{\partial \xi_n}{\partial x_i} + P_m \frac{\partial k}{\partial \xi_m} \right) \\ & + \frac{C_k}{C_\nu} \frac{\partial \epsilon_m}{\partial \xi_m} \frac{\partial \xi_m}{\partial x_j} \frac{\partial k}{\partial \xi_n} \frac{\partial \xi_n}{\partial x_j} - \epsilon \quad (4) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{D\epsilon}{Dt} = & C_{\epsilon 1} \frac{\epsilon}{k} \epsilon_m \left(\frac{\partial u_i}{\partial \xi_n} \frac{\partial \xi_n}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial \xi_n} \frac{\partial \xi_n}{\partial x_i} \right) \frac{\partial u_i}{\partial \xi_m} \frac{\partial \xi_m}{\partial x_j} \\ & + \left(\nu + \frac{C_\epsilon}{C_\nu} \epsilon_m \right) \left(\frac{\partial^2 \epsilon}{\partial \xi_m \partial \xi_n} \frac{\partial \xi_m}{\partial x_j} \frac{\partial \xi_n}{\partial x_i} + P_m \frac{\partial \epsilon}{\partial \xi_m} \right) \\ & + \frac{C_\epsilon}{C_\nu} \frac{\partial \epsilon_m}{\partial \xi_m} \frac{\partial \xi_m}{\partial x_j} \frac{\partial \epsilon}{\partial \xi_n} \frac{\partial \xi_n}{\partial x_j} - C_{\epsilon 2} \frac{\epsilon^2}{k} \quad (5) \end{aligned}$$

これらの基礎方程式は写像空間中においてLagrangeスキームを利用して離散化される(Ushijima, 1994)。移流項は局所的な3次スプライン内挿を利用する手法であるLCSI法(Ushijima, 1994)により計算している。

図-1は、上記の基礎方程式を解析する際の概略的な手順を示すフローチャートである。液相の並列計算のプロセスとして、各サブブロック内の流体計算を行うため

のスレーブプロセスと、それらの通信を管理する1つのマスタープロセスが生成される。最初に各サブブロックにおいて、座標生成を行い、ブロックの共有境界面近傍の計算格子点の座標値などがマスタープロセスに送られる。次に、運動方程式の移流項、拡散項などが計算され、SMAC法に基づき圧力計算が行われる。その際に、圧力場の連続性を保つため、スレーブプロセス間で共有境界面近傍の圧力値をその収束計算の所定のステップごとに送受信する。得られた圧力値を用いて $n+1$ ステップの流速値が算出され、その値が再びスレーブプロセス間で送受信される。図-1には明示されていないが、乱流エネルギーとその散逸率の輸送方程式も同様に各サブブロック内で計算が進められ、 $n+1$ ステップの値はスレーブプロセス間で送受信される。

粒子運動の計算では、後述するように流体計算で生成された各サブブロックの境界適合格子が用いられる。このため、図-1中の矢印(A)で示されるように、計算格子点の座標成分が同じサブブロックの粒子計算のプロセスに送信される。また、固相との相互作用を求めるために、矢印(B)で示される計算段階において、必要な情報の送受信が行われる。

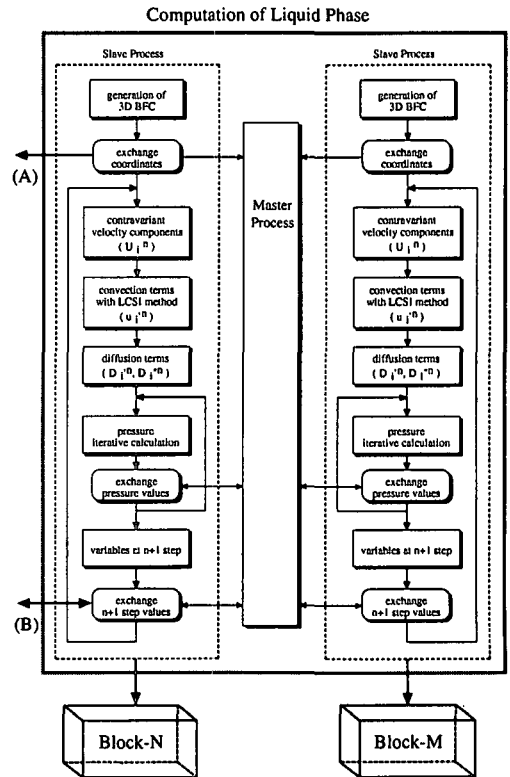


図-1 液相の計算のフローチャート

3. DEM による固体粒子の計算

粒子運動の支配方程式は、3次元場の並進運動と回転運動に関するものであり、それぞれ次式で与えられる。

$$m \frac{d^2 \mathbf{x}_p}{dt^2} = \mathbf{F}_L + \mathbf{F}_B + \mathbf{F}_C \quad \dots\dots\dots (6)$$

$$I \frac{d\boldsymbol{\omega}_p}{dt} = \mathbf{T}_L + \mathbf{T}_C \quad \dots\dots\dots (7)$$

ここで、 $\mathbf{x}_p$ は粒子の位置ベクトル、 $\mathbf{F}_L$ 、 $\mathbf{F}_B$ 、 $\mathbf{F}_C$ は、それぞれ粒子に作用する流体力、浮力、接触力であり、 $\boldsymbol{\omega}_p$ は粒子の角速度ベクトル、 $\mathbf{T}_L$ と $\mathbf{T}_C$ は、それぞれ流体の粘性に起因する減衰モーメントと接触力により発生するモーメントである。

粒子に作用する液相の流体力としては、次式のように、Basset 項を除く5つの項を考慮している。

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_L = & m \frac{\rho_f}{\rho_p} \frac{\partial \mathbf{u}_f}{\partial t} + \frac{m}{2} \frac{\rho_f}{\rho_p} \frac{\partial \mathbf{u}_r}{\partial t} \\ & + \beta \frac{m}{c_p \rho_p} |\mathbf{u}_r| |\mathbf{u}_r| + m \frac{\rho_p - \rho_f}{\rho_p} \mathbf{g} \\ & + C_{LR} |\mathbf{u}_r| \frac{|\mathbf{u}_r| \times \boldsymbol{\omega}_r}{|\boldsymbol{\omega}_r|} \quad \dots\dots\dots (8) \end{aligned}$$

ここで、 ρ_p は固体粒子の密度、また c_p は固相の体積濃度、 $\mathbf{u}_r$ は液相と固体粒子の相対速度($\mathbf{u}_f - \mathbf{u}_p$)であり、(8)式右辺第3項の抗力では、Ergun 式に基づき粒子数密度の高低を考慮した抵抗係数 β (川口ら, 1995)を利用している。

図-2に粒子計算のフローチャートを示す。流体計算で生成した境界適合座標系を利用するため、図-2中の矢印(A)で示されるように、最初に同一のサブブロックにおける流体計算プロセスから格子点のデータを受信する。次に、非定常計算の計算ステップが、指定した回数(例えば100ステップに1回など)に相当する場合、粒子分布の表示が可視化プロセス(Graphic process)により行われる。

(6)式および(7)式を解析するため、最初に粒子に作用する流体力を算出する。液相の流速値は、3次元境界適合座標系に従う格子点上で求められているため、物理空間中では格子間隔が不均一なものとなる。このため、(8)式等で必要となる各時刻の粒子位置における液相流速の空間内挿は、写像空間中で行うものとした。具体的には、物理空間中の粒子位置 $\mathbf{x}_p$ と粒子に最も近接する格子点位置、すなわち境界適合座標系により定められた計算格子点の位置 $\mathbf{x}_g$ を求め、それらの差 $\mathbf{x}_p - \mathbf{x}_g$ として定義されるベクトルに基底変換行列 $\mathbf{C}$ を作用させることで、次式のように写像空間中の粒子位置 $\mathbf{X}_p$ を定める。

$$\mathbf{X}_p = \mathbf{C}(\mathbf{x}_p - \mathbf{x}_g) + \mathbf{X}_g \quad \dots\dots\dots (9)$$

ここに、基底変換行列の成分 C_{ij} は

$$C_{ij} = \frac{\partial \xi_i}{\partial x_j} \quad \dots\dots\dots (10)$$

で与えられ、 $\mathbf{X}_g$ は格子点 $\mathbf{x}_g$ の写像空間中の位置ベクトルである。ここで、 x_j および ξ_i ($i, j=1, 2, 3$)は、それぞれ物理空間および写像空間中の座標成分である。次に、格子点上で求められている周囲流体の流速の反変ベクトル $\mathbf{U}(=\mathbf{C} \mathbf{u}_f)$ を写像空間中の粒子位置 $\mathbf{X}_p$ において空間内挿し、その値を物理空間中に再度変換する。この変換を行うために、粒子が存在する位置における基底変換行列の逆行列 $\mathbf{C}_p^{-1}$ が必要となるが、 $\mathbf{C}_p$ も格子点上で得られている基底変換行列 $\mathbf{C}$ を空間内挿することで求めることとした。また、(7)式右辺第1項 $\mathbf{T}_L$ の算出には、物理空間中の粒子と流体の相対角速度ベクトルが必要であるが、これも同様の評価方法により求めている。

上記のようにして流体力が求められた後、粒子間および粒子と境界面との間で発生する接触力を算出する。これらの接触力は、DEM で一般に用いられるバネ-ダッシュ

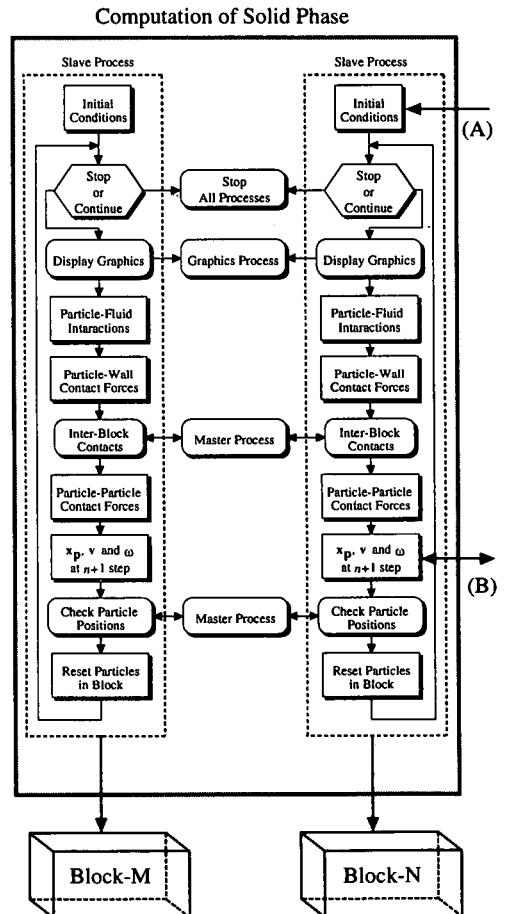


図-2 粒子運動の計算のフローチャート

ポットモデルにより評価する (Cundall ら, 1979). 接線方向の接触力に対しては, 粒子の滑りを考慮するため, 摩擦スライダを設定した. 粒子と計算領域の境界面との接触は, 実際には境界面上の計算格子点によって形成されるセル平面と粒子との接触として扱われる. すなわち, セル平面と粒子中心位置の距離と粒子半径との大小関係から接触の有無を判定するものとした. 一方, 粒子間の接触力を求める際には, サブブロックどうしが接続する断面を介して接触する, 異なるブロックに属する粒子の間に働く接触力を適切に扱うことが必要となる. これに対しては, 前報 (牛島ら, 2001) と同様の手法を利用する.

図-2 に示されるように, $n+1$ ステップの粒子位置や粒子の速度・角速度成分が算出された段階で, 流体・粒子間の相互作用を計算するために必要な情報を流体計算のプロセスと送受信する.

4. 並列計算環境

流体および粒子の計算は, Linux を OS とする PC クラスタ上で実行される. 並列計算環境としては, MPI (Lusk ら, 1994) 準拠の通信コマンド等を含んだライブラリを提供する LAM (<http://www.mpi.nd.edu/lam/>) を利用した. PC クラスタを構成する各計算機は, 一般の DOSV 機 (CPU は PentiumIII, 850 MHz) であり, これらは 100 BaseT のネットワークで接続されている. このネットワークの接続にはスイッチングハブを利用している. また, 可視化プロセスには Mesa (<http://www.mesa3d.org/>) により提供されるグラフィックスライブラリを利用した.

なお, 液相の計算プログラムは FORTRAN で書かれているが, 粒子計算のプログラムは C 言語で作成しているため, 前者に対して C 言語のインタフェースプログラムを適用し, メッセージパッシングは C 言語のプログラム間で実行されるものとした.

5. 粒子混合物の分級現象の数値実験

計算手法の適用性を検討するため, 円管内に振動流を発生させて内部の不均一粒径の粒子混合物の挙動を調べる数値実験を行った. この数値実験では, 内径 50 mm, 軸方向長さ 90 mm の円管内において両端の圧力条件を変化させることにより, 流向が時間によって変化する振動流を内部に発生させる. 円管軸は水平に置かれている. 円管内には, 粒径が 2 mm で比重 2.0 の粒子 (S 粒子) と粒径 3 mm で同比重の粒子 (L 粒子) をそれぞれ 1,067 個および 533 個ずつ投入した. 計算では, 最初に液相流速を 0 として, 円筒内に 2 種類の粒子をランダムに配置し, それらが下部に堆積した状態を初期条件とした. 初期の

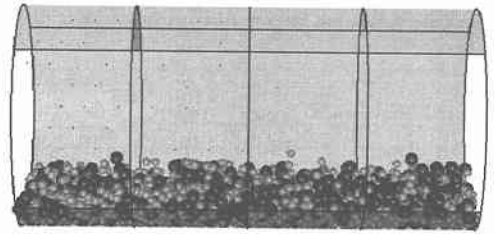


図-3 初期の粒子分布 ($t/T \approx 0$)

粒子分布を図-3 に示す.

計算領域は, 図-3 に示すように, 軸方向に 4 つの領域に分割されている. これら 4 ブロックの液相および固相の計算を 4 台の PC に割り当て, 可視化プロセスを他の 1 台で実行させた.

計算では, 図-3 の初期状態から, 円管の両端に圧力勾配を与え, 内部の流体を駆動させる. 両端における流速は周期境界条件に従う. 端部の中心軸上の流速が 1.5 m/s になった時点で圧力条件を切り替えるものとした. 固体粒子の移動に関しても周期境界条件を適用し, 一端から排出された粒子は他端より同一流速を持って同一断面内位置から投入される.

計算結果を図-4 から図-9 に示す. T は振動流の周期 (約 0.18 秒) である. この振動流に対応して粒子群が移動を開始し, 計算の進行とともに粒子が軸方向に偏在するものとなった. このため, 初期にはほぼ平坦であった粒子群の表面は, 局所的に高低差を有する分布を示す. なお, 本報では鉛直方向の乱流効果を粒子運動の計算に考慮していないため, 粒子の巻き上げはあまり見られない. この点に関しては, 今後詳細な検討が必要である. また,

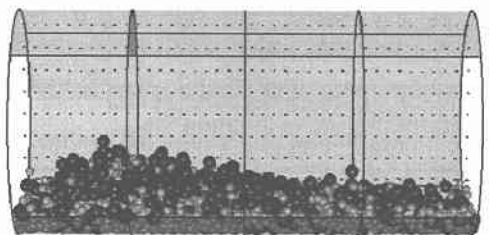


図-4 数値計算により得られた粒子分布 ($t/T \approx 3.15$)

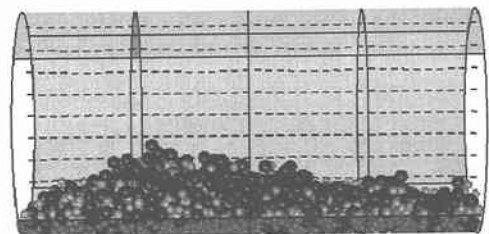


図-5 数値計算により得られた粒子分布 ($t/T \approx 3.33$)

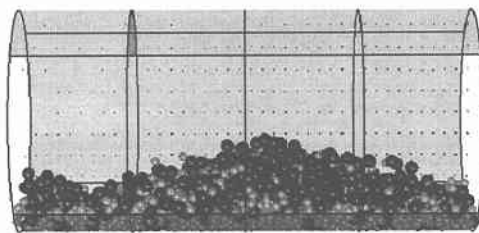
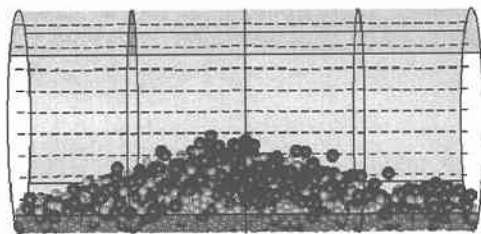
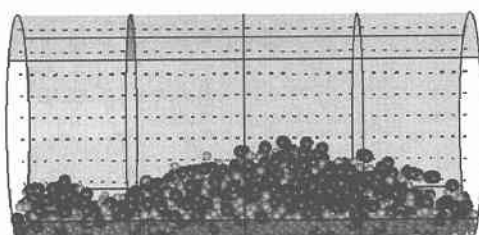
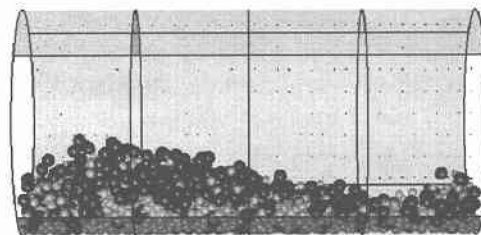
図-6 数値計算により得られた粒子分布 ($t/T \approx 3.51$)図-8 数値計算により得られた粒子分布 ($t/T \approx 3.87$)図-7 数値計算により得られた粒子分布 ($t/T \approx 3.69$)図-9 数値計算により得られた粒子分布 ($t/T \approx 4.05$)

図-3の初期状態ではほぼランダムに2種類の粒子が分布していたにもかかわらず、図-4から図-8に示されるように、時間が経過するとL粒子が表層付近に数多く分布する、分級現象が再現されることが確認された。

6. おわりに

本報では、two-way methodに基づき、液相をEuler的な手法、固体粒子をLagrange的な手法で扱う並列計算法を提案した。振動流下における粒子混合物の挙動を解析した結果、分級が発生することなどが確認された。今後、モデルの精度向上を図るとともに、実験結果との定量的な比較を行う予定である。

参考文献

- 原田英治, イェガネ・バクティアリ・アバス, 後藤仁志, 酒井哲郎 (2000): 粒状体モデルによるシートフロー漂砂の分級現象の数値シミュレーション, 海岸工学論文集, 第47巻, pp. 491-495.
- 牛島 省, 瀬津家久 (2000): 固液二流体モデルを用いた海底砂面の局所洗掘数値解析手法, 海岸工学論文集, 第47巻, pp. 566-570.
- 牛島 省, 瀬津家久 (2001): 不均一粒子流の混合・分級現象に関する3次元並列数値解析法の提案, 水工学論文集, 第45巻, pp. 715-720.
- 川口寿裕, 田中敏嗣, 辻 裕 (1995): 離散要素法による2次元流動層の数値シミュレーション(噴流層の場合: 2次元モデルと3次元モデルの比較) 日本機械学会論文集(B編), 第61巻 (589), pp. 3169-3175.
- Cundall, P. A. and O. D. L. Strack (1979): A discrete numerical model for granular assemblies. *Geotechnique* 29(1), pp. 47-65.
- Hinze, J. O. (1975): *Turbulence*. McGraw-Hill.
- Lusk, W. G. E. and A. Skjellum (1994): *Using MPI*. The MIT Press.
- Thompson, J. F., Z. U. A. Warsi, and C. W. Mastin (1985): *Numerical Grid Generation*. Elsevier Science, New York.
- Ushijima, S. (1994): Prediction of thermal stratification in a curved duct with 3D boundary-fitted co-ordinates. *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 19, pp. 647-665.
- Ushijima, S., N. Yoneyama, and N. Tanaka (1998): Multiblock-parallel computations of 3D flows in complicated-shaped hydraulics structures. *Proc. 7th Int. Symp. on Flow Modeling and Turbulence Measurements*, pp. 347-354.