B211 個別要素法による固液混相流の 並列計算と数値可視化

牛島 省[○] 楠津 家久 (京大)

Numerical Visualization on Parallel Computation of Liquid-Solid Flows with DEM

Satoru Ushijima and Iehisa Nezu

ABSTRACT

A new parallel computational technique has been proposed for the liquid flows including granular mixture with multi-block grid system. In this technique, a three-dimensional computational volume is decomposed into multiple blocks which are represented by 3D body-fitted coordinates. Both of the computations of particle motions with the distinct element method (DEM) and liquid flows with a turbulence model in the multiple blocks are executed simultaneously. The interaction between two phases are taken into account on the basis of a two-way method. Since the numerical visualization procedure is also treated as one of the parallel processes, it scarcely affects the efficiency of the other computations. The computational method was applied to the granular binary mixture exposed to the oscillating flows in a pipe. As a result, it was shown that the reasonable transportation of particles is predicted and that the segregation of the granular mixture is qualitatively predicted.

Keywords : parallel computation, liquid-solid flows, DEM, numerical visualization

1. はじめに

粒径や比重などの物性値が均一でない多数の粒子の集まりである粒子混合物に対して、これに擾乱を加えた場合に生ずる一様分散あるいは偏析現象は、多くの分野で検討が進められてきた課題である。特に、固液混相流中においては、河川や海岸における混合粒径の土砂粒子の分級現象などがこのような事例として関心が持たれており、最近では個別要素法 (DEM) を用いて流動場の底部に堆積した粒子混合物の輸送量の評価が検討された例 [1] も見られる。

DEMによる数値解析は、このように液相中の粒子混合物の挙動を把握するために有効であるが、現状では2次元計算手法が適用されることが多く、また粒子数を十分大きく確保することが困難であるなど、改良が望まれる点も少なくない。また、固気混相流で用いられることがある one-way method に基づく数値モデルが固液混相流に対しては必ずしも適切ではないため、各相の相互作用を考慮した解析手法を構築することが必要である。

これらの背景から、著者らは DEM に基づく固体粒子の計算と液相の流体解析に対して、領域分割・並列計算手法を利用することが有効であると考えた。この計算手法では、3次元境界適合座標系 (BFC) を用いた領域分割法により、計算領域を複数のブロックに分割して、各ブロックの固相および液相の計算を並列

的に進めると同時に、1つのブロックにおける各相の計算も並列的に実行するものとした。さらに、粒子分布と液相の流況を表示する数値可視化処理を並列計算プロセスの1つとして位置づけ、他の処理にはほとんど負荷をもたらさずに計算の途中経過を可視化表示できるものとした。

本研究では、この解析手法を円管内の振動流中に含まれる粒子混合物の計算に適用し、解析結果に対する考察を加えた。

2. 並列計算法の概要

固液混相流では各相の挙動が互いに影響を及ぼし合うため、数値計算においては two-way method に基づく数値モデルが必要とされる。本研究では、液相を Euler 的な手法で扱い、固体粒子の運動を DEM に基づき Lagrange 的に計算する。このように各相に対して異なる計算手法を適用するため、計算手法の開発や改良を進めていく場合には、各相の計算プログラムがある程度独立したものとするのが適している。このような考えから、計算領域に領域分割法を適用して、複数のブロックを生成する。そして、各ブロックの液相と固相の計算を並列的に進めると同時に、ブロック内の液相と固相の計算も非定常計算における時間進行を同期させながら並列的に実行する計算手法を作成した。

Fig. 1 Flowchart of parallel computations for liquid and solid phases

Fig.1 は液相と固相の並列計算の手順とメッセージパッシングを概略的に示したものである。液相および固相の計算においては、それぞれ単一のマスタープロセスが起動され、それらが各相のスレーブプロセス間のメッセージパッシングなどを管理する。各相のスレーブプロセスは、領域分割により生成されたブロック数と同数起動され、ブロック内の計算を並列的に進める。また、液相と固相のスレーブプロセス間では Fig.1 中に (A), (B) として示したように、計算に必要な情報が送受信される。このうち、(A) では液相の計算で生成された境界適合座標が固相の計算に送信される。また、(B) では、液相の 3 次元流速成分、固相に加わる流体力、固相の体積濃度などが送受信される。

Fig.1 の固相の計算に含まれる可視化プロセスは、液相と固体粒子の非定常計算の過程をディスプレイ上に表示する。このときの描画処理は他の処理と並列的に行われるので、描画頻度を適切に設定すれば、可視化プロセスは他の計算に負荷を及ぼさない。

上記の計算は、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 [2] 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。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。

3. DEM による固体粒子の計算

DEM による固体粒子運動の計算は、後述する液相の計算で生成される 3 次元境界適合座標系を利用して行われる。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。

$$m \frac{d^2 \mathbf{x}_p}{dt^2} = \mathbf{F}_L + \mathbf{F}_B + \mathbf{F}_C \quad (1)$$

$$I \frac{d\boldsymbol{\omega}_p}{dt} = \mathbf{T}_L + \mathbf{T}_C \quad (2)$$

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。

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_L = & m \frac{\rho_f}{\rho_p} \frac{\partial \mathbf{u}_f}{\partial t} + \frac{m}{2} \frac{\rho_f}{\rho_p} \frac{\partial \mathbf{u}_r}{\partial t} \\ & + \beta \frac{m}{c_p \rho_p} \mathbf{u}_r |\mathbf{u}_r| + m \frac{\rho_p - \rho_f}{\rho_p} g \\ & + C_{LR} |\mathbf{u}_r| \frac{\mathbf{u}_r \times \boldsymbol{\omega}_r}{|\boldsymbol{\omega}_r|} \end{aligned} \quad (3)$$

ここで、 ρ_p と ρ_f はそれぞれ固体粒子と液相の密度、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、(3) 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 [3] を利用している。

なお、粒子間および粒子と境界面との間で発生する接触力は、DEM で一般に用いられるバネ-ダッシュポットモデルにより評価する [4]。

マルチブロック環境における粒子計算では、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。これらに対しては、前報 [5] と同様の手法を利用した。

4. 液相の数値解析法

液相の計算は、基本的に著者らが提案した領域分割・並列計算法 [6] に基づく。この手法では、分割した各ブロックの形状を境界適合座標系を用いて表現する。このため、全体として複雑な形状をもつ計算領域を取り扱うことが可能である。

液相の基礎方程式は単相流における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。ここでは、液相の乱流量に対する固相の影響などを考慮しない簡略的な数値モデルとしている。また、液相の乱流量に乱数を利用して固体粒子に対する影響を考慮する手法 [7] があるが、ここではその効果は含めていない。

運動方程式には、固相が受ける力の反力が含まれている。これは、計算格子中に含まれる粒子に作用する力の総和としている。実際の計算では、DEM における計算で得られた力を流体計算プロセスへメッセージパッシングして、その値を運動方程式の計算に利用する。

液相の基礎方程式は写像空間中に変換された後、Lagrange スキームを利用して離散化される [8]。移流項は局所的な 3 次スプライン内挿を利用する手法 (LCSI) [8] により計算している。また、Fig.1 に示すように、ブロック間の境界近傍の計算領域では、圧力の収束計算の所定のステップごとに圧力値を送受信し、さらに新しい計算ステップの変数が計算された後にそれらの値を互いに交換する [6]。

5. 粒子混合物の分級現象の計算

内径 50mm、軸方向長さ 90mm 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 2mm で比重 2.0 の粒子 (S 粒子) と粒径 3mm 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。初期の粒子分布を Fig.2 に示す。

Fig. 2 Initial particle distribution ($t/T \approx 0$)

計算領域は、Fig.2 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。

Fig. 3 Snapshot of particles ($t/T = 3.15$)

Fig. 4 Snapshot of particles ($t/T = 3.33$)

Fig. 5 Snapshot of particles ($t/T = 3.51$)

Fig. 6 Snapshot of particles ($t/T = 3.69$)

Fig. 7 Snapshot of particles ($t/T = 3.87$)

計算では, Fig.2 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 $\pm 1.5 \text{ m/s}$ 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 Fig.3 から Fig.7 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の移動が発生している. 粒子群の表面は平坦でなく, 粒子が軸方向にやや偏在するものとなった. 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, 粒子の巻き上げがあまり見られない. この点に関しては, 今後詳細な検討が必要である. また, Fig.2 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, Fig.3 から Fig.7 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, 分級の発生などが生ずることが確認された. 今後, モデルの精度向上を図るとともに, 実験結果などとの定量的な比較を行う予定である.

参考文献

- [1] 後藤 仁志・原田 英治・酒井哲郎. 数値移動床による混合粒径流砂の流送過程のシミュレーション. 水工学論文集, 第 44 巻, pp. 665-670, 2000 年.
- [2] W. Gropp, E. Lusk and A. Skjellum. *Using MPI*. The MIT Press, 1994.
- [3] 川口寿裕・田中敏嗣・辻裕. 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), Vol. 61, No. 589, pp. 2169-3175, 1995.
- [4] P. A. Cundall and O. D. L. Strack. A discrete numerical model for granular assemblies. *Geotechnique*, Vol. 29, No. 1, pp. 47-65, 1979.
- [5] 牛島 省・田中 伸和・山本亮介. 回転円筒内における固体粒子の再分離シミュレーションの数値可視化. 可視化情報, vol. 19 suppl. No.2, 1999.
- [6] 牛島 省・田中 伸和・米山望. 一般座標系を用いた領域分割流体解析手法の提案とその基本特性に関する考察. 水工学論文集, 第 44 巻, 2000 年.
- [7] Liang-Shih Fan and Chao Zhu. *Principles of Gas-Solid Flows*. Cambridge University Press, 1997.
- [8] S. Ushijima. Prediction of thermal stratification in a curved duct with 3D boundary-fitted co-ordinates. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, Vol. 19, pp. 647-665, 1994.