B222

格子ボルツマン法数値解析とリアルタイム可視化システムの開発

米津 豊作[○] (慶大院理工学研究科)、棚橋 隆彦 (慶大理工)Development of System for Lattice Boltzmann Method
Numerical Analysis and Real-time Visualization

Hosaku YONETSU and Takahiko TANAHASHI

ABSTRACT

We developed the real-time visualization system combined with solver of lattice Boltzmann method (LBM), which is efficient algorithm for simulating binary-fluid flow. Developed System enables us to visualize the result solved by LBM in real time, capture the interface moving we want to see in detail, and save the cost of computer resource for visualization. In this article, we present the simulation of phase separation as an analytical example by using LBM Real-time Visualization System.

Keywords: Lattice Boltzmann, Binary-fluid, Real-time Visualization, Java

1. 緒言

気液二相流の特徴は、気体と液体との界面の形状が複雑に変化し、多様かつ複雑な挙動を示すことである。このため、実験において局所の速度分布を測定することや変動する界面挙動を把握すること困難であり、そのため、数値解析の研究が重要視される。その二相流現象の解析もまた、二相の界面の形状が不規則に変化することや、分散していた相が合体し、一つの相が分裂することにより自由表面の生成消滅が不規則に起こり流動様式が変化するため、時間と空間に関し平均化近似を用いるマクロ・スコピックな手法では個々の気泡や界面の挙動を再現するのは難しい。しかし、格子ボルツマン法 (Lattice Boltzmann Method: LBM) による二相流解析では、粒子間に反発する相互作用を導入することで、粒子数密度の非一様な空間分布とその境界を自己組織的に形成し、気泡や界面挙動を比較的容易に再現できる^{1)~3)}。

更に、二相流現象の解析により機構論的な予測を可能にするためには、過渡的な界面構造を捉える必要がある。それには数値解析を行うと同時に、界面の動きを可視化し、注目すべき可視化結果を任意の時間ステップ間隔で保存する機能が有効である。また、格子ボルツマン法による二相流の三次元計算には莫大な数の格子が必要となることが報告されており⁴⁾、可視化処理に数値計算に使った計算機資源と同規模のものが必要となることが想定される。以上のことを考慮すると、リアルタイムビジュアライゼーションが有効なツールとなる。リアルタイムビジュアライゼーションとは、計算処理と同時に、同じ

計算機で可視化処理を実行し画像のみを保存する、一方で、途中の流れ場のデータは計算と同時に更新し保存しない方法である。既に、格子ボルツマン法の流体解析ソルバーをリアルタイム可視化システムに連携させ商品化したものはあるが⁵⁾、本研究ではそれらを統合したシステムを開発した。

2. 計算方法

2.1 格子ボルツマン法

格子ボルツマン法は、物理空間を格子により離散化し、仮想的な流体粒子の格子上の移動と衝突により巨視的な流体挙動を模擬する解析手法であり、格子ガスオートマトン(LGA)法から派生している⁶⁾。格子ボルツマン方程式の基礎式である格子ボルツマン方程式は

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, t+1) - f_i(\mathbf{x}, t) = \Omega_i[f(\mathbf{x}, t)] \quad i=1,2,\dots,N \quad (1)$$

- $\mathbf{c}_i$: 速度方向 i の粒子速度
- f_i : 速度 $\mathbf{c}_i$ をもつ粒子の速度分布関数
- Ω_i : 衝突演算子
- N : 粒子速度の数

である。

尚、式(1)の格子ボルツマン方程式は、ボルツマン方程式からも導出できる⁷⁾。クヌッセン数が十分に小さく低マッハ数の場合、ボルツマン方程式の巨視的な発展方程式は連続体としてナビエ・ストークス方程式となり、ガウス・エルミート積分により速度空間を離散化し、格子ボルツマン方程式が導出される。

2.2 一成分二相流格子ボルツマン法

本節では、第四章で用いる Swift らの一成分二相流モデル²⁾について2次元で記述する。また、以下に記す物理量は全て無次元量である。Swift らのモデルでは、圧力テンソルを非平衡系の熱力学に基づいて、

$$P_{\alpha\beta} = p\delta_{\alpha\beta} + \kappa \frac{\partial \rho}{\partial x_\alpha} \frac{\partial \rho}{\partial x_\beta} \quad (2)$$

κ : 表面張力に関するパラメータ

と定義する。ここで、デカルト座標系 $\alpha, \beta, \gamma = x, y$ は総和規約に従う。 $\delta_{\alpha\beta}$ はクロネッカーのデルタである。圧力 p は自由エネルギーから

$$p = p_0 - \kappa \nabla^2 \rho - \frac{\kappa}{2} |\nabla \rho|^2 \quad (3)$$

と得られる。尚、 p_0 は実在気体の圧力であり、Swift らのモデルでは臨界点近傍の状態をモデル化していることから、Van der Waals 状態式

$$p_0 = \frac{\rho RT}{1 - b\rho} - a\rho^2 \quad (4)$$

R : 気体定数

a : 分子間力に起因する圧力修正項

b : 分子体積に起因する比容積修正項

を用いている。尚、Swift らのモデルでは、気体定数を $R=1$ とする²⁾。

以下、図1に示す2次元9速度モデルを用い、式(1)で定式化する。衝突項に BGK 近似⁸⁾を用いると、速度分布関数 f_i の時間発展式は

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, t+1) - f_i(\mathbf{x}, t) = -\frac{f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)}{\tau} \quad i = 0, 1, \dots, 8 \quad (5)$$

τ : 緩和時間

f_i^{eq} : 局所平衡分布関数

$$\mathbf{c}_i = \begin{cases} (0,0) & i = 0 \\ (1,0), (0,1), (-1,0), (0,-1) & i = 1, 2, 3, 4 \\ (1,1), (-1,1), (-1,-1), (1,-1) & i = 5, 6, 7, 8 \end{cases} \quad (6)$$

となる。

Fig.1 Lattice geometry and velocity vectors of the two-dimensional nine-speed model

流体の密度 ρ および流速 $\mathbf{u}$ は

$$\rho = \sum_{i=0}^8 f_i \quad (7)$$

$$\rho \mathbf{u} = \sum_{i=0}^8 \mathbf{c}_i f_i \quad (8)$$

と定義される。局所平衡分布関数 f_i^{eq} は、式(2), (7), そして(8)を満たす関数の一つとして

$$f_i^{eq} = H_i \rho + F_i (p_0 - \kappa \rho \nabla^2 \rho) + E_i \rho \left(3u_\alpha c_{i\alpha} - \frac{3}{2} u_\alpha u_\alpha + \frac{9}{2} u_\alpha u_\beta c_{i\alpha} c_{i\beta} \right) + E_i \kappa G_{\alpha\beta} c_{i\alpha} c_{i\beta} \quad (9)$$

が得られる⁹⁾。ここで、

$$E_0 = 4/9, E_1 = \dots = E_4 = 1/9, E_5 = \dots = E_8 = 1/36, \\ H_0 = 1, H_1 = H_2 = \dots = H_8 = 0, \\ F_0 = -5/3, F_i = 3E_i, i = 1, 2, \dots, 8 \quad (10)$$

$$G_{\alpha\beta} = \frac{9}{2} \frac{\partial \rho}{\partial x_\alpha} \frac{\partial \rho}{\partial x_\beta} - \frac{9}{4} \frac{\partial \rho}{\partial x_\gamma} \frac{\partial \rho}{\partial x_\gamma} \delta_{\alpha\beta} \quad (11)$$

である。なお表面張力 σ とパラメータ κ の間には

$$\sigma = \kappa \int \left(\frac{\partial \rho}{\partial n} \right) dn \quad (12)$$

の関係が成り立つ。ここで、 n は界面に垂直な座標である。

3. LBM リアルタイム可視化システム

開発に使用した言語は、Java である。Java は Sun Microsystems 社によって開発されたオブジェクト指向のプログラミング言語である。開発に Java を用いた理由として、

- オブジェクト指向言語 C++ に由来しており、一度開発したモジュールの再利用が簡単である。
- Java Virtual Machine と呼ばれるソフトウェアを通じて実行されるため、特定のマシンや OS に依存しない。
- 軽量 GUI コンポーネントである Swing の利用により、OS 間で見た目や操作性に全く差のないシステムを構築することができる。
- グラフィックアプリケーションを作成するための Java2D API と Java3D API の機能が充実している。またグラフィックスを Web ブラウザ上で動作するアプレット(applet)で複数のユーザーで共有できる。
- 格子ボルツマン法は並列計算に適しているため、Java のスレッド機能を用いた並列処理を比較的容易に適用できる。

Fig. 2 LBM Real-time Visualization System

が挙げられる。インタープリタ型言語の問題点である処理速度の低下については、Java HotSpot テクノロジーの機能追加などにより年々急速に向上している。HotSpot とは Java Virtual Machine に内蔵された機構で、バイトコードのうち実行に時間のかかる繰り返し処理などの部分を、実行前にあらかじめネイティブコードに変換しておくことにより、C 言語などで開発されたプログラムとほとんど変わらない実行速度を実現する技術である。

システムは、図 2 に示すように大きく GUI クラス、Graphics クラス、Color クラス、Data クラス、そして LBM Solver クラスの 5 つから構成される。現在のところ二次元の可視化にのみ対応している。したがって、Graphics クラスではグラフィックを作成するために Java2D を使用し、ベクトル場として速度、スカラー場として密度と圧力を描画する関数をそれぞれ作成した。システムの流れは、次のとおりである。

- 1) GUI クラスでパラメータの設定を行う。
- 2) LBM Solver クラスで、数値計算を行う。
- 3) Data クラスの密度、速度、圧力などのデータが更新される。
- 4) 任意のステップ数間隔で、Graphics クラスを呼び出し、その呼び出した時点の巨視的物理量データを可視化する。
- 5) 可視化の際、Color クラスの色を使用する。
- 6) 可視化された画像を保存し、アニメーションに利用する。
- 7) 2)~6) の繰り返し

尚、計算を一時的に停止し、可視化表示するステップ数を変更することによって、注目すべき可視化結果のみを保存することができる。

4. 解析結果と可視化

第二章で記述した Swift らのモデルを使用し、自発的相分離の解析を行った。尚、解析結果については、定性的議論にとどめる。自発的相分離とは、超臨界状態から急激に冷却した場合に生じる現象である。式(4)のパラメ

ータは $a=9/49$ 、 $b=2/21$ とする。温度は $T=0.55$ 、緩和時間は $\tau=1$ を用いた。また、計算格子は 80×80 、表面張力に関するパラメータは $\kappa=0.025$ を用いる。初期密度は温度 $\rho=3.20238$ とし、5%のランダムな揺らぎを与えた。尚、計算領域の境界は周期境界としている。図 3 に時間ステップごとの密度分布を示す。図 3(a)と図 3(b)を比較すると、超臨界相が二相に別れるまで暫く不安定な液滴形状が形成されることがわかる。その後は、時間が進むにつれて、平均的な液滴半径が増大している。図 3(c)では、多くの液滴が表面張力によってお互い引き合い合体する段階が見られる。図 3(e)では、液滴が合体した結果、2 つの液滴に分離していることがわかる。尚、最終的に液滴は 1 つになることが確認できている。

5. 結言

格子ボルツマン法の流体解析ソルバーとリアルタイム可視化システムを統合したシステムを開発した。二相流現象の解析では、計算と同時に界面の動きを捉えることが可能となり、注目すべき界面の動きに対しても、可視化する時間ステップ間隔を任意に変更することで、その可視化と保存が可能となった。今後の課題は、Java3D を用いたシステムの三次元可視化への対応である。

参考文献

- 1) X. Shan, and H. Chen: Lattice Boltzmann model for simulating flows with multiple phase and components, Phys. Rev. E, Vol. 47 (1993) pp. 1815-1819
- 2) M. R. Swift, W. R. Osborne, and J. M. Yeomans: Lattice Boltzmann Simulation of Nonideal Fluids, Phys. Rev. Lett. Vol. 75 (1995) pp. 830-833
- 3) X. He, S. Chen, and R. Zhang: A Lattice Boltzmann Scheme for Incompressible Multiphase Flow and Its Application in Simulation of Rayleigh-Taylor Instability, J. Comput. Phys, Vol. 152 (1999) pp. 642-663
- 4) 瀬田剛、河野浩二: 二相流に対する格子ボルツマン・スキームの提案、日本機化学会論文集(B編)、Vol. 65, No. 643 (1995) pp. 1955-1963
- 5) <http://www.nec.co.jp/techrep/ja/journal/g02/n09/g020924.html>
- 6) G. MaNamara, G. Zanetti: Use of the lattice Boltzmann equation to simulate lattice-gas automata, Phys. Rev. Lett., Vol. 61 (1988) pp. 2332-2335
- 7) X. He, L.-S. Luo: A priori derivation of the lattice Boltzmann equation, Phys. Rev. E, Vol. 55, (1997) pp. 6333-6636
- 8) P. L. Bhatnagar, E. P. Gross, M. Krook: A model for collision processes in gases I: small amplitude processes in charged and neutral one-component system, Phys. Rev., Vol. 94 (1954) pp. 511-525
- 9) 稲室隆二: 格子ボルツマン法—新しい流体シミュレーション、物性研究, Vol. 77-2 (2001) pp. 197-232

(a)

(b)

(c)

(d)

(e)

Fig. 3 Phase separation in LBM Real-time Visualization System on 80×80 meshes. Shown are the time evolution of the density distribution at $t = 1$ (a), $t = 200$ (b), $t = 300$ (c), $t = 18000$ (d), $t = 800000$ (e). Red color and Blue color represent high density and low density, respectively