

OpenMPによる並列計算とその応用例 : 多相場を非圧縮性流体と考える数値解法(MICS)

牛島, 省
京都大学工学研究科社会基盤工学専攻

<https://doi.org/10.15017/1467692>

出版情報 : 九州大学情報基盤センター広報 : 全国共同利用版. 6 (3), pp.196-201, 2007-03. Computing and Communications Center Kyushu University

バージョン :

権利関係 :

OpenMP による並列計算とその応用例

— 多相場を非圧縮性流体と考える数値解法 (MICS) —

牛島 省¹

1. はじめに

比較的スケールの大きい物体 (固相) を含む流れや、気相と液相の界面である自由水面を持つ流れのように、固気液多相間の相互作用を考慮しなければならない流動現象に対する数値計算法 (MICS, Multiphase Incompressible flow solver with Collocated grid System) を検討している¹⁾。本資料では、この多相場に対する解法とその適用性、また OpenMP を用いた並列化などの概略を紹介する。

なお、解法の最終的な適用対象としては、津波や洪水等の災害時に、自由水面の変動を伴う流れによって船舶や家屋材などが輸送される現象や、漂流物を含む流れが建造物等に衝突して被害が生ずる事例などを考えている²⁾。

2. 数値解法

(1) 基礎式

多相場を構成する物体は剛体と仮定し、気体と液体は各相で物性値が一定な非圧縮性 Newton 流体とする。固体を含む流れ場を扱う場合には、固体に作用する流体力と流体が固体から受ける力学作用を適切に考慮する必要がある。この効果を扱うため、本資料で紹介する数値解法では、多相場を一旦物性値が異なる複数の流体の混合体として扱い、これに対して非圧縮性流体計算を行う。そして、その結果を利用して、固体部分に作用する流体力を評価し、固体運動の計算を行うという方法を用いる。

複数の混ざり合わない非圧縮性流体の混合体に対する質量と運動量の保存則を表す基礎式の導出の詳細は文献¹⁾に示されている。ここでは以下の基礎式を用いる。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j) = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial u_j}{\partial x_j} = 0 \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(u_i u_j) &= f_i - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} \\ + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\frac{\partial}{\partial x_j}(\mu u_i) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\mu u_j) \right] \end{aligned} \quad (3)$$

式 (1) は Euler 表記による質量保存則、式 (2) は非圧縮条件、式 (3) は保存形表示された運動方程式である。 t と x_i は時間と 3 次元直交座標系の座標成分を表す ($i = 1, 2, 3$)。 ρ, μ, p は順に計算セル内の体積平均操作によって求められる密度、粘性率、圧力である。また、 u_i はセル内の質量平均により算出される x_i 方向の流速成分である。 f_i は外力 (体積力) の加速度成分を表す。相間の界面張力を考慮する解法も検討しているが³⁾、ここでは界面張力は無視できるとする。

(2) サブセル法による物性値の設定

混合体としての物性値、すなわち密度と粘性率は、各相の体積平均として表現される¹⁾。本資料で扱う解法では空間に固定された Euler 格子を用い、その解像度は物体より十分小さく設定する。ある計算セル内 C の物性値 ψ は、計算セル内に含まれる各相の体積割合を考慮して次式で定める。

$$\begin{aligned} \psi &= (1-f)\psi_g + \left(f - \sum_{P_k \in C} \alpha_k \right) \psi_l \\ &+ \sum_{P_k \in C} \alpha_k \psi_{pk} \end{aligned} \quad (4)$$

ここに、 ψ_g および ψ_l は、それぞれ気相および液相の物性値であり、 ψ_{pk} は物体 P_k の物性値を表す。 f は液相と固相が占める体積割合、 α_k は計算セル C 内に含まれる物体 P_k の体積割合である。 α_k は、図-1 に示すサブセル法¹⁾により評価される。サブセル法では、1 つのセルを複数のサブセルに分割し、そのサブセルの数をカウントすることにより α_k を近似的に求める。

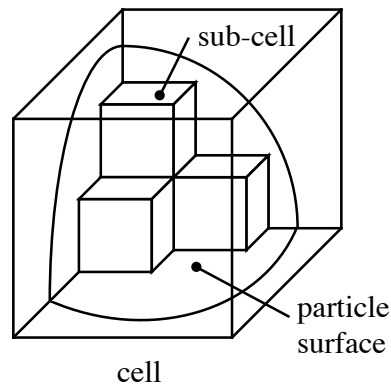


図 1 サブセル法の概略

¹ 京都大学 工学研究科 社会基盤工学専攻
ushijima@mbx.kudpc.kyoto-u.ac.jp

(3) 3次元多相流場の解法

サブセル法により設定された物性値を用いて、場全体に対する非圧縮性流体計算が行われる。変数は3次元計算セル上でコロケート配置される。この変数配置では、圧力と流速3成分がセル中心で定義され、圧力計算段階で流速成分をセル境界に空間内挿する。

MICSの計算は、予測段階、圧力計算段階、修正段階から構成される。予測段階では、計算セル中心で流速の推定値が求められるが、計算時間を短縮するために陰的解法(C-ISMAC法)⁴⁾を利用する。空間方向には、移流項に対して5次精度の保存形QSIスキーム(FVM-QSIスキーム)⁵⁾を用い、フラックス制御⁵⁾により数値振動を抑制する。

MICSでは一旦固体領域を非圧縮性流体として扱い、上記の混合体の基礎式を場全体に用いる。このため、物体表面に対する境界条件の設定は不要となる。物体表面に作用するせん断力は、混合体の運動方程式の拡散項を通じて評価される。物体に作用するせん断力は、後述するように拡散項の計算結果を用いて流体力の一部として考慮される。

圧力計算段階では、予測段階で求められた流速の推定値をセル境界へ空間内挿し、そこで圧力勾配を考慮する。圧力計算段階では、C-HSMAC法⁶⁾に基づいて、全計算セルの連続性の誤差がしきい値以下となるように、次の3式を用いる反復計算が行われる。

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial \phi^k}{\partial x_i} \right) = \frac{1}{\Delta t} \frac{\partial \hat{u}_i^k}{\partial x_i} \equiv \frac{1}{\Delta t} D^k \quad (5)$$

$$p^{k+1} = p^k + \phi^k \quad (6)$$

$$\hat{u}_i^{k+1} = \hat{u}_i^k - \frac{1}{\rho} \frac{\partial \phi^k}{\partial x_i} \Delta t \quad (7)$$

ここで、上添え字 k はC-HSMAC法の反復計算ステップ、 \hat{u}_i はセル境界上の流速成分である。式(5)は、空間方向に離散化すると ϕ の連立1次方程式となり、その数値解はクリロフ部分空間法に基づく各種の解法を利用して求められる⁷⁾。

以上の流体計算の結果を用いて物体に作用する流体力を評価する。流体の運動方程式の右辺に含まれる外力項、圧力項、拡散項に物体部分が占める体積割合を乗じてセル間の総和を取り、その結果を物体に作用する流体力とする。物体の並進運動の運動方程式には、このようにして算出された流体力と他の物体や境界面との接触力が用いられ、回転運動の運動方程式にはそれらから計算されるモーメントが用いられる。物体間および物体と境界面との間に生ずる接触力は、3次元個別要素法モデル⁸⁾により評価される。

移動後の物体領域が有する速度と圧力、また物性値は、次の時間ステップの演算開始時において、物体の占有体積率に応じて計算セル内の変数あるいは物性値に考慮される⁹⁾。このようにして物体領域の情報が計算セルに反映され、非定常計算が進行する。なお、気相と液相の界面の計算方法は、既報¹⁰⁾に示されている。

(4) OpenMPによる並列計算法の導入

式(5)を離散化して得られる連立1次方程式の計算に、OpenMPを用いる並列計算法を導入した。OpenMPによる行列解法として、拙著¹¹⁾にはGMRES法の並列化の例が記載されているが、ここではBiCGSTAB法¹²⁾を利用している。

このソルバを用いて、3次元Laplace方程式を離散化して得られる連立1次方程式の数値解を求めたときの計算時間とスピードアップを図-2と図-3に示す¹³⁾。計算には、京都大学学術情報メディアセンターのHPC2500を用いた。

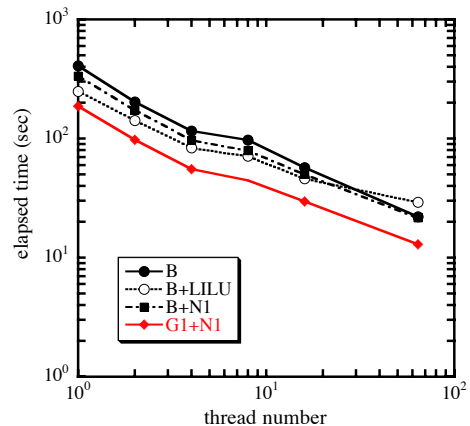


図2 計算時間とスレッド数の関係 (B=BiCGSTAB法, G1=GCR(1)法, LILU=不完全LU分解前処理, N1=打ち切りノイマン展開前処理)

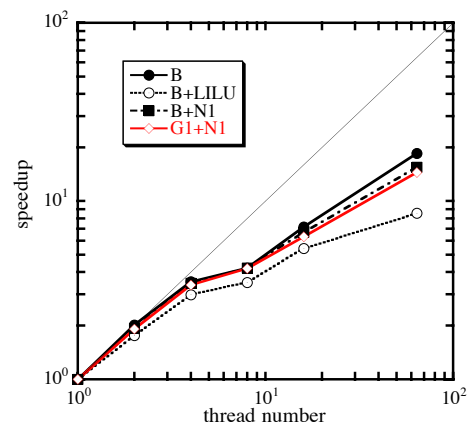


図3 スピードアップとスレッド数の関係 (B=BiCGSTAB法, G1=GCR(1)法, LILU=不完全LU分解前処理, N1=打ち切りノイマン展開前処理)

前処理として、1 次の打ち切りノイマン展開 (図中の記号 N1) と局所不完全 LU 分解 (同 LILU) を利用している。また、両図には、Bi-CGSTAB 法 (同 B) の他に、参考として毎回リスタートを行う GCR(1) 法 (同 G1) による結果が示されている。ただし安定性の理由から、実際の式 (5) の計算には、GCR(1) 法を利用せず、BiCGSTAB 法を用いている。

3. 計算手法の適用性

(1) 一様流中に置かれた球に対する抗力係数

MICS では、抗力係数などの経験定数を用いずに物体に作用する流体力を評価することができる。この点に関する基本的な検証を行うため、一様流中に置かれた球体に対する抗力係数を計算で求めて、その結果を既往の実験結果を近似する曲線 (White¹⁴) と比較した。両者は図-4 に示すようにほぼ一致しており、数値解法により流体力がほぼ妥当に算定されることが示されている。

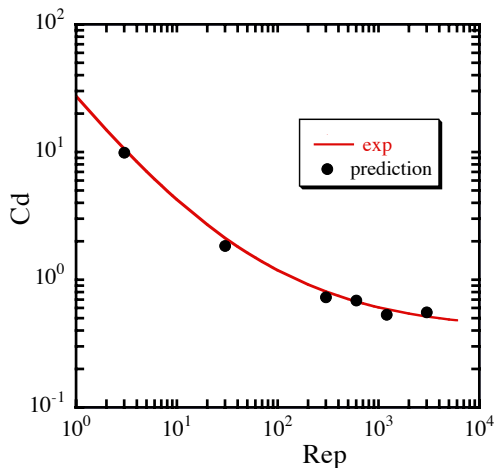


図 4 球に対する抗力係数の比較

(2) 成層密度界面の変動周期

MICS では、気相と液相が混合しない密度の異なる非圧縮性流体として同時に計算される。この計算が適切に行われることを確認するために、Rayleigh-Taylor の安定問題¹⁵) に解法を適用した。

奥行きが単位幅の 3 次元矩形容器内において、上下にそれぞれ密度 ρ_1 および ρ_2 、層厚 h_1 および h_2 の混合しない二流体を入れ、初期の静止状態の界面形状に微小な変位を与えておく。密度は $\rho_1 \leq \rho_2$ であるとし、二流体は非圧縮性完全流体とする。界面張力が無視できる場合には、矩形容器の幅を b とすると、容器内に生ずる 1 次モードの界面の定在波の角周波数 σ は次式

で表される。

$$\sigma = \left[\frac{\pi g}{b} \cdot \frac{\rho_2 - \rho_1}{\rho_1 \coth \frac{\pi h_1}{b} + \rho_2 \coth \frac{\pi h_2}{b}} \right]^{1/2} \quad (8)$$

ここに、 g は重力加速度である。

上下層の密度の比 ρ_1/ρ_2 を r_ρ として、これを広範囲に変化させた数値計算を行った。図-5 に計算で得られた容器両端における界面変位 η の時系列を示す。 r_ρ を大きく変えた条件でも、一定の振幅を持つ界面変動が継続する計算結果が得られている。

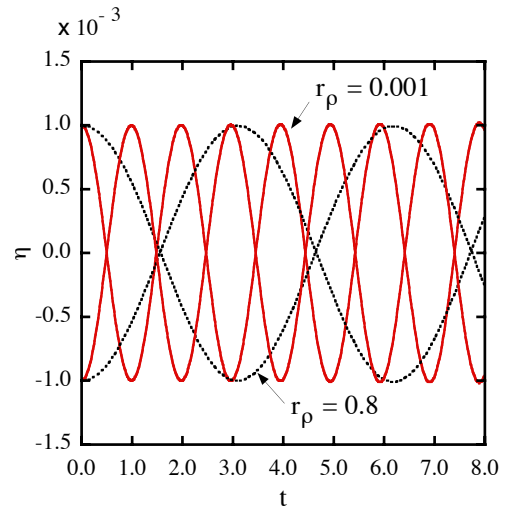


図 5 容器両端における界面変位の時系列

図-6 は、 r_ρ を変化させた場合の界面定在波の角周波数の計算値を式 (8) の理論値と比較したものである。この結果に示されるように、計算結果は理論値とほぼ一致しており、二流体の界面の挙動は、上下の密度が広範囲に変化する場合でも適切に計算できることが確認されている。

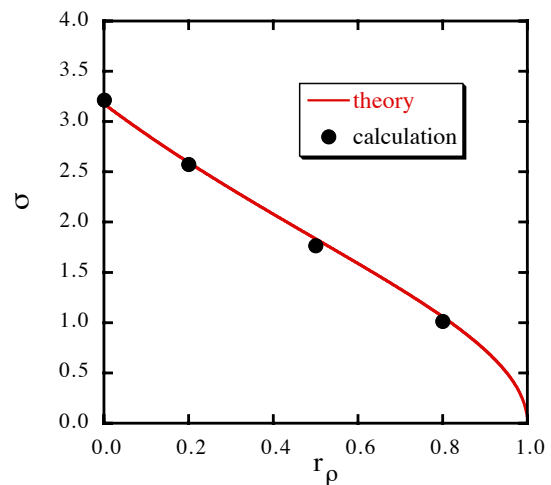


図 6 界面定在波の角周波数の比較

(3) 波動流れによる物体輸送の基礎水理実験

波動流れによって生ずる物体輸送を把握するための基礎的な水理実験を行った。この実験では、図-7に示す造波装置の付いた水槽を用いて、複数のアクリル球体の移動状況を計測した。

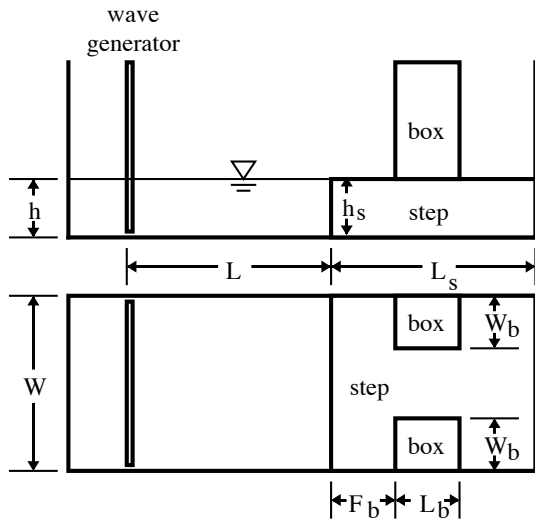


図 7 造波水槽の概形

実験では、パルスモータ内蔵スライダにより平板を下流側へ平行移動させることによって造波を行う。造波板の移動パターンは、 0.2 m/s の移動速度で下流側へ d_w だけ移動させ、そこで停止させる条件とした。水槽の下流側にはステップが設置されている。ステップ上には最大 2 個までボックスを設置することが可能である。ボックスは水槽に固定され、流れによって移動することはない。ステップ上に複数のアクリル球体を置き、これらが波動流れを受けて、他の球体やボックスと衝突しながら移動する状態を把握する。

水槽の形状は、 $W = 0.19 \text{ m}$ 、 $L = 0.9 \text{ m}$ 、 $L_s = 0.4 \text{ m}$ である。ボックスの大きさは $w_b = 0.06 \text{ m}$ 、 $L_b = 0.1 \text{ m}$ であり、設置する際の位置は $F_b = 0.18 \text{ m}$ とした。ステップの高さは $h_s = 0.1 \text{ m}$ である。

(4) 球体運動に対する数値計算

ステップ上に直径 40mm、比重約 1.2 のアクリル球体を置き、それらが造波により生じた波動流れによって輸送される状況を把握する実験を行った。図-8に示すように、ステップ上流側に 9 個の球体を設置する。図-8 中に示される球体中心点の初期位置は、 $a = 25 \text{ mm}$ 、 $b = c = 50 \text{ mm}$ とした。ボックスの個数を 0, 1, 2 と変化させ、合計 3 ケースの実験を行った。造波条件は $d_w = 0.1 \text{ m}$ とした。上流側水深は $h = 0.1 \text{ m}$ とし、ステップ高さと同しくした。このため、ステップ上は実験開始時にはドライな状態であり、造波によって生じた波動流れがステップ上に乗上げて球体に当たり、これらを下流側へ移動させることになる。

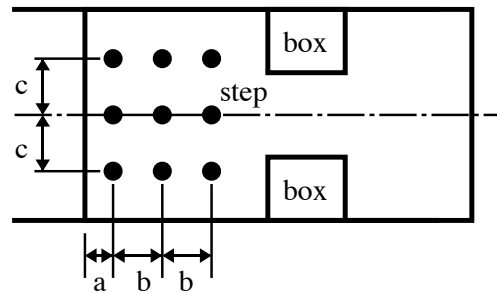


図 8 球体初期位置とボックスの配置

実験では、球体の運動を水槽上部に設置したビデオカメラで撮影し、画像を解析することで球体位置を求めた。写真-1 は撮影された球体分布の例である。ボックスが 1 個の場合には非対称な球体の分布が生じ、2 個の場合には多くの球体がボックスに衝突する一方、ボックス間を通り抜ける球体があることが観察される。

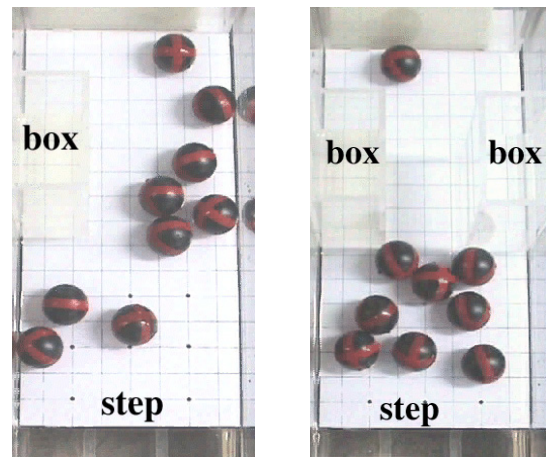
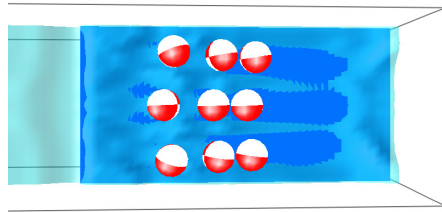


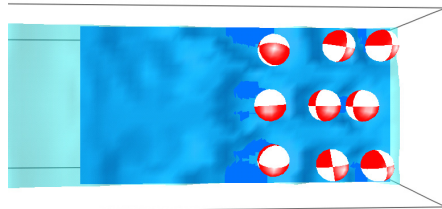
写真-1 実験で計測された球体分布の例
(手前が上流側、左=ボックス 1 個、
右=ボックス 2 個)

数値計算では、水の動粘性係数と密度は $1.0 \times 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$ および $1.0 \times 10^3 \text{ kg/m}^3$ とし、空気に対してはそれぞれ 10 倍および $1/1000$ の値を用いた。

図-9、図-10 および図-11 に、それぞれボックス数を 0, 1, 2 としたときの計算結果を示す。これらはいずれも左側が水槽上流側であり、鉛直上方から計算結果を見た表示となっている。ボックスが設置されない条件では、9 個の球体は前後の間隔を狭めながらほぼ一群となって下流側へ移動して下流端付近で停止する。これに対して、ボックスが 1 個設置された場合には、球体はボックスに衝突して反対側のスペースに展開する。ボックスが 2 個の場合には、下流端中央の球体とその上流側の球体がボックス間を通り抜けて下流端へ達する。それ以外の球体はボックスおよび他の球体に衝突してボックス前面で停止する。

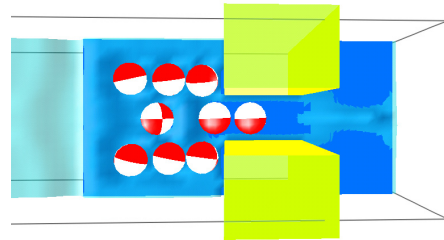


(a) $t = 2.5 \text{ s}$

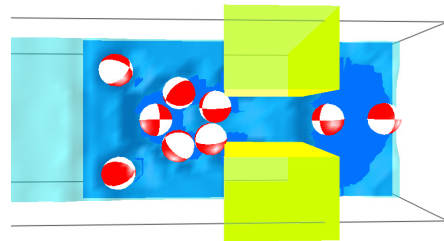


(b) $t = 4.6 \text{ s}$

図 9 数値計算結果 (ボックスなし)

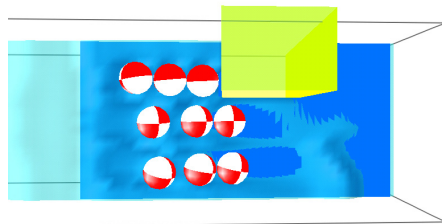


(a) $t = 2.5 \text{ s}$

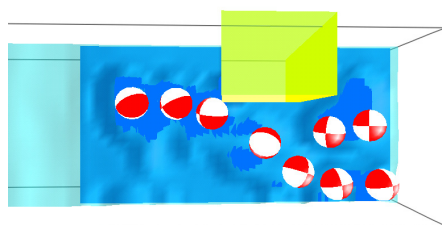


(b) $t = 4.9 \text{ s}$

図 11 数値計算結果 (ボックス 2 個)



(a) $t = 2.2 \text{ s}$



(b) $t = 4.7 \text{ s}$

図 10 数値計算結果 (ボックス 1 個)

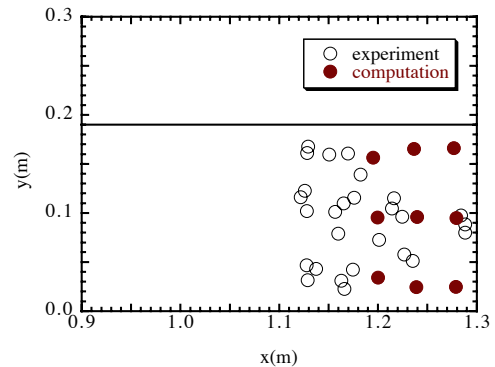


図 12 球体分布の比較 (ボックスなし, $t = 6.0 \text{ s}$, 実験は複数回の結果を表示)

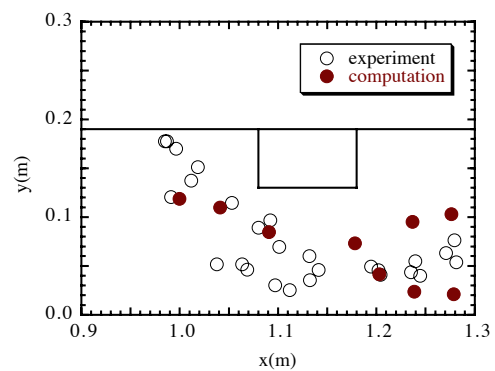


図 13 球体分布の比較 (ボックス 1 個, $t = 6.0 \text{ s}$, 実験は複数回の結果を表示)

いずれの実験条件においても, 下流側へ移動した球体は波動流れの影響が減衰するとそこで停止する. 図-12 から図-14 は, 球体が停止したときの分布を実験と計算で比較したものである. 実験で得られた平均的な分布状況と計算結果は概ね一致している.

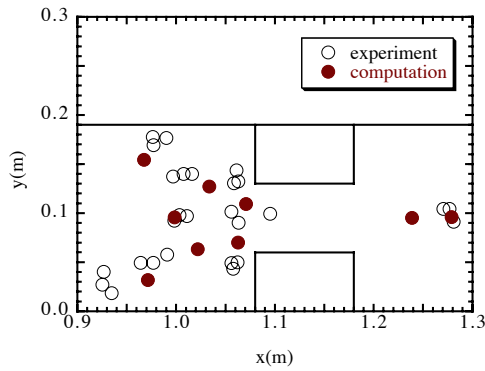


図 14 球体分布の比較 (ボックス 2 個, $t = 6.0s$, 実験は複数回の結果を表示)

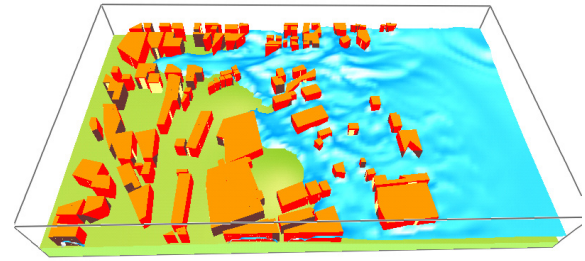


図 16 市街部に浸入する津波流の 3 次元計算

4. おわりに

本資料では、多相場の数値解法 (MICS) の概要と適用性などを示した。最近では、四面体要素を用いる任意形状の物体を含む場に拡張している¹⁶⁾。またニュートン流体だけでなく、ビンガム流体を含む場へ適用可能な解法とするための検討も進めている³⁾。図-15 は水中を沈降する直方体の運動、図-16 は建物群の間に浸入する津波流の計算例である。

謝辞：この資料で紹介した成果は、(当時) 大学院生の山田修三君、円界正憲君、福谷彰君、牧野統師君の協力により得られたものである。

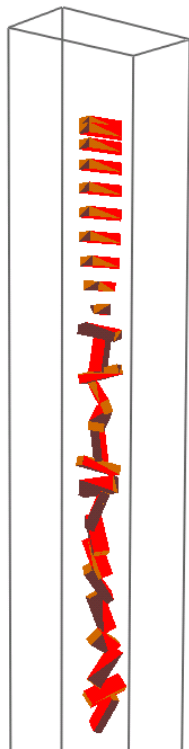


図 15 水中を沈降する直方体

参考文献

- 1) 牛島省, 山田修三, 藤岡奨, 禰津家久. 3次元自由水面流れによる物体輸送の数値解法 (3D MICS) の提案と適用性の検討. 土木学会論文集, Vol. 810/II-74, pp. 79-89, 2006.
- 2) 牛島省, 牧野統師, 禰津家久. 水路を遡上する波動流れと物体輸送に対する 3次元多相場の数値解法 (3D MICS) の適用性. 応用力学論文集, Vol. 9, pp. 933-940, 2006.
- 3) 藤田学, 牛島省. ビンガム流体を含む非圧縮性多相場の数値解析法. 応用力学論文集, Vol. 9, pp. 875-882, 2006.
- 4) 牛島省, 禰津家久. 陰解法を用いたコロケート格子による高精度の流体解析手法の提案. 土木学会論文集, No. 719/II-61, pp. 21-30, 2002.
- 5) 牛島省, 吉田圭介, 竹村雅樹, 禰津家久. フラックス制御を利用する移流方程式の 5次精度保存形式スキーム. 土木学会論文集, No. 747/II-65, pp. 85-94, 2003.
- 6) 牛島省, 奥山洋平, 竹村雅樹, 禰津家久. 3次元一般座標系における圧力場の並列計算法の提案. 水工学論文集, Vol. 47, pp. 385-390, 2003.
- 7) 藤野清次, 張紹良. 反復法の数理. 朝倉書店, 1996.
- 8) 牛島省, 田中伸和, 米山望. 3次元複雑形状領域内における固気混相流中の固体粒子のラグランジュ的解析法. 水工学論文集, 第 43 巻, pp. 515-520, 1999.
- 9) 牛島省, 竹村雅樹, 山田修三, 禰津家久. 非圧縮性流体解析に基づく粒子-流体混合系の計算法 (MICS) の提案. 土木学会論文集, No. 740/II-64, pp. 121-130, 2003.
- 10) 牛島省, 竹村雅樹, 山田修三, 後藤孝臣. 非圧縮性多相流場の解法 (MICS) による自由水面流中の粒子輸送の数値解析. 水工学論文集, Vol. 48, pp. 649-654, 2004.
- 11) 牛島省. OpenMP による並列プログラミングと数値計算法. 丸善株式会社, 2006.
- 12) H. A. Van Der Vorst. BI-CGSTAB : A first and smoothly converging variant of BI-CG for the solution of nonsymmetric linear systems. *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, Vol. 13, pp. 631-644, 1992.
- 13) 櫻山和男 (研究代表者). 国際フォーラム「土木工学における計算力学手法の新展開」の企画調査. 平成 16 年度科学研究費補助金研究成果報告書, 課題番号: 16636010, pp. 211-250, 平成 17 年.
- 14) F. M. White. *Viscous fluid flow*. McGraw-Hill, 1991.
- 15) 巽友正, 後藤金英. 流れの安定性理論. 産業図書, 1976.
- 16) 藤岡奨, 牛島省, 福谷彰. 四面体要素を用いた接触を伴う剛体運動の数値計算法. 応用力学論文集, Vol. 9, pp. 141-150, 2006.