

21世紀のCFDへの期待

里深 信行¹

Prospects of CFD in 21st Century by

Nobuyuki SATOFUKA¹

ABSTRACT

Development of CFD in the past three decades and todays trend in CFD are reviewed. New approaches in CFD, i.e., the Lattice Boltzmann method and the Level Set method are introduced. Numerical results by using these approaches are also presented. Finally prospect of CFD in 21st century is discussed.

1 はじめに

コンピュータと流体力学はコンピュータの誕生時から極めて密接な関係があり、1946年に出現した最初のコンピュータである ENIAC の最も重要な応用分野の一つは爆風の伝播であった。しかしながらコンピュータにより実際的な流体力学の問題の計算が可能となったのは 1960 年代の後半になってからであり、この頃から CFD(Computational Fluid Dynamics) という言葉が用いられるようになった。私の記憶では 1968 年に AIAA から出版されたコロンビア大学の C.K. Chu 編集の冊子¹⁾ が最初である。現在最も CFD の分野で伝統のある国際会議である ICNMFD の第 1 回の会議がソ連のノボシビルスクで開催されたのが 1969 年であり第 2 回が 1970 年アメリカ合衆国のバークレーで開催され、その後 2 年毎に変更され、最近では 1998 年にフランス共和国アルカションで第 16 回が開催された。ICNMFD は、1985 年に東京で第 1 回が開催された ISCFD と発展的に合併し ICCFD となり、その第 1 回が 2000 年 7 月に京都で開催されることになった。これらの会議の開催年度・場所を表 1 に示す。

表 1: 流体力学に関する国際会議

<ICNMFD>		<ISCFD>	
1969	Novosibirsk USSR		
1970	Berkeley USA		
1972	Paris France		
1974	Boulder USA		
1976	Enschede Netherlands		
1978	Tbilisi USSR		
1980	Stanford USA		
1982	Aachen West Germany		
1984	Saclay France	1985	Tokyo Japan
1986	Beijing China	1987	Sydney Australia
1988	Williamsburg USA	1989	Nagoya Japan
1990	Oxford UK	1991	Davis USA
1992	Rome Italy	1993	Sendai Japan
1994	Bangalore India	1995	Tahoe USA
1996	Monterey USA	1997	Beijing China
1998	Arcachon France	1999	Bremen Germany
↙ ↘			
<ICCFD>			
2000	Kyoto Japan		
2002	Sydney Australia		

2 CFD の歴史的な発展

CFD を構成する主な要素としてはコンピュータはもとより、格子生成、計算アルゴリズム、流れのモデル、可視化およびデータ管理などが考えられるが、この 30 年間でそれぞれが飛躍的な進歩を遂げた。

1970 年代後半における CRAY-1、CDC STAR などの所謂ベクトル型スーパーコンピュータの出現は、その高速性により CFD の実用化を大きく加速した。さらなる高速化に向って現在では多数の演算装置により計算を並列的に実行するパラレルコンピュータが主流となりつつある。これに対応して、表 2 に示すように、1989 年以来並

¹京都工芸繊維大学工芸学部教授

表 2: 並列計算流体力学国際会議 (Parallel CFD)

1st	1989	Manhattan Beach	USA
2nd	1990	Indianapolis	USA
3rd	1991	Stuttgart	Germany
4th	1992	New-Brunswick	USA
5th	1993	Paris	France
6th	1994	Kyoto	Japan
7th	1995	Pasadena	USA
8th	1996	Capri	Italy
9th	1997	Manchester	UK
10th	1998	Heinchu	Taiwan
11th	1999	Williamsburg	USA
12th	2000	Trondheim	Norway

列 CFD 国際会議が毎年開催されるようになり、1994 年の京都での会議に続き 2002 年には再び日本で開催される予定である。一方、1970 年代のミニ・コンピュータ (MC)、1980 年代のパーソナルコンピュータ (PC) による、小型、低コスト化の波は止まるところを知らず、現在では 10 年前のスーパーコンピュータを凌駕する性能の PC が個人の机上に乗る時代となっている。また、この間にコンピュータ間のネットワーク技術は著しい進歩を遂げ、今日では世界中のほとんどすべてのコンピュータがネットワークで結ばれている。このような現状から大規模な問題を解くのに世界中に分散しているコンピュータをネットワークを通じて利用し処理を分担させるメタ・コンピューティングが試みられるようになっている。

格子生成に関しては、当初はほとんどすべての計算がデカルト格子 (円柱、球座標格子なども含めて) で行われていたが、1974 年の J.F.Thompson による橢円型方程式による境界適合曲線座標生成に関する論文²⁾以来、境界適合構造格子が全盛となり橢円型以外にも双曲型、放物型方程式を用いる格子生成法^{3),4)}が提案された。

1980 年代に入り、有限要素法の CFD への応用と幾何学的に複雑な形状をした計算領域に対する格子生成の容易さから非構造格子の採用が試みられるようになった。⁵⁾しかし、物体近傍の粘性層の計算に非構造格子を用いるのは効率的ではなく構造格子との複合化が必要とされる。相対運動を伴う複数物体周りの流れの計算も、複合重疊格子⁶⁾を採用することにより可能となり、限られた格子数で精度の高い解を得るために解適応格子の生成が試みられている。⁷⁾

計算アルゴリズムの面では、J. von Neumann と R.D. Richtmyer による 1950 年の人工粘性法に関する論文⁸⁾を初めとして、Lax 法⁹⁾、Godunov 法¹⁰⁾、Lax-Wendroff 法¹¹⁾さらに非圧縮性流に対する MAC 法¹²⁾などの現在

の計算法の基本となる方法はすべて 1960 年代迄に提案されている。有名な R. W. MacCormack による陽的二段階法¹³⁾も 1969 年に発表された。

1970 年代終期から 1980 年代にかけて流束ベクトル分割法¹⁴⁾、流束差分割法¹⁵⁾、TVD 法¹⁶⁾、ENO 法¹⁷⁾などの風上型空間離散化法を含む高分解能、高精度解法が、さらに RK 法¹⁸⁾、AF 法¹⁹⁾および SGS 法²⁰⁾など陽的および陰的時間積分法が CFD の分野に採用されこれらを組み合わせた種々の計算法が現在応用されている。最近では多重格子法²¹⁾、領域分割法²²⁾などの高速化手法が広く応用され、これらに関する国際会議も毎年開催されている。

3 現在の CFD の動向

CFD の分野における現在の主なトピックスは非定常流、多相流、流体-固体（構造）連成問題、流体力学的最適化、LES などであり、それぞれに対応して高次精度差分法、標位関数（Level Set Function）法²³⁾、格子ボルツマン法²⁴⁾、遺伝的アルゴリズム（GA）²⁵⁾などの計算アルゴリズムが提案され応用されている。ここでは、これらのトピックスに関する我々の試みの例として、格子ボルツマン法および標位関数法の応用を紹介する。

格子ボルツマン法では、流体を多数の微小粒子が集まつたものとみなし、それらが移流と衝突を繰り返して巨視的な流れを形成すると考える。空間の離散化はその微小粒子の移流をもとに、一様に規則的な格子で離散化を行う。二次元では d2q9 モデル、三次元では d3q15 モデルが最も広く用いられている。を用いることとする。d2q9 モデルでは空間を図 1 に示すように正方形格子で分割し、粒子は節点にのみ存在し各格子点のリンクに沿う方向にだけ運動する、つまり粒子は次の三種類のみが存在する

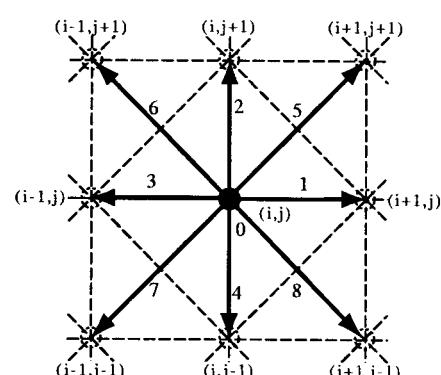


図 1: Nine discrete velocities model

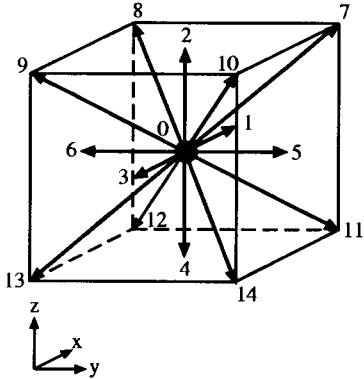


図 2: Fifteen discrete velocities model

と考える。

$$\left\{ \begin{array}{ll} 0: \text{節点に静止している粒子} & |\mathbf{e}_0| = 0 \\ 1: \text{水平、垂直軸に沿って速度 } c \text{ で動く粒子} & |\mathbf{e}_\alpha| = c \quad \alpha = 1, \dots, 4 \\ 2: \text{対角線方向を速度 } \sqrt{2}c \text{ で動く粒子} & |\mathbf{e}_\alpha| = \sqrt{2}c \quad \alpha = 5, \dots, 8 \end{array} \right.$$

d3q15 モデルでは空間を図 2 に示すように立方体格子で分割し、d2q9 モデルと同様に粒子は節点にのみ存在し各格子点のリンクに沿う方向にだけ運動する、つまり粒子は次の三種類のみが存在すると考える。

$$\left\{ \begin{array}{ll} 0: \text{節点に静止している粒子} & |\mathbf{e}_0| = 0 \\ 1: x, y, z \text{ 軸に沿って速度 } c \text{ で動く粒子} & |\mathbf{e}_\alpha| = c \quad \alpha = 1, \dots, 6 \\ 3: \text{対角線方向を速度 } \sqrt{3}c \text{ で動く粒子} & |\mathbf{e}_\alpha| = \sqrt{3}c \quad \alpha = 7, \dots, 14 \end{array} \right.$$

ここで c は、粒子の移流速度で $c = \delta x / \delta t$ で定義され、 δx , δt はそれぞれ空間刻み幅、時間刻み幅である。粒子は格子点上に静止するか、次のタイムステップまでに格子線に沿って別の格子点へちょうど到達する速度で移動し、格子点上での衝突は瞬時に起こると約束する。速度 \mathbf{e}_α を持つ粒子の存在は分布関数 f_α であらわされる。そして分布関数 f_α は、次に示す離散ボルツマン方程式を満たす。

$$\frac{\partial f_\alpha}{\partial t} + \mathbf{e}_\alpha \cdot \nabla f_\alpha = -\frac{f_\alpha - f_\alpha^{(eq)}}{\tau} \quad (1)$$

式 (1) の右辺は、ボルツマン方程式の衝突項に相当し本来積分項を含んだ非常に複雑な式であるが、Bhatnager, Gross, Krook (BGK) による単一緩和時間近似モデルを用いるのが現在では一般的である。ここで τ は緩和時間で、粒子が平衡状態に近づく割合を示す変数である。平衡分布関数 $f_\alpha^{(eq)}$ は次式で与えられる。

$$f_\alpha^{(eq)} = w_\alpha \rho \left[1 + \frac{3(\mathbf{e}_\alpha \cdot \mathbf{u})}{c^2} + \frac{9(\mathbf{e}_\alpha \cdot \mathbf{u})^2}{2c^4} - \frac{3\mathbf{u}^2}{2c^2} \right] \quad (2)$$

ここで、式 (2) の係数 w_α は d2q9 モデルでは $w_0 = \frac{4}{9}, w_\alpha = \frac{1}{9} (\alpha = 1, \dots, 4), w_\alpha = \frac{1}{36} (\alpha = 5, \dots, 8)$ である。

d3q15 モデルでは $w_0 = \frac{4}{9}, w_\alpha = \frac{1}{9} (\alpha = 1, \dots, 6), w_\alpha = \frac{1}{72} (\alpha = 7, \dots, 14)$ である。

巨視的な密度は式 (3) より、巨視的な運動量は式 (4) より、 f_α を足し合わせて求める。

$$\rho = \sum_\alpha f_\alpha \quad (3)$$

$$\rho \mathbf{u} = \sum_\alpha \mathbf{e}_\alpha f_\alpha \quad (4)$$

格子ボルツマン法は、一般に圧縮性である。非圧縮性の流れに対しても X.He ら²⁶⁾ による非圧縮性の定式を用いる。まず、密度を $\rho = \rho_0 + \Delta\rho$ のように分解する。密度の初期値を ρ_0 とし密度の微小変分を $\Delta\rho$ とすると、非圧縮性流れ場ではこの値は無視できるほどの微小値となる。式 (2) の ρ をこれで置き換え、高次の微小項を無視すると、次に示す非圧縮性の平衡分布関数を得ることができる。

$$p_\alpha^{(eq)} = w_\alpha \left[p + \rho_0 ((\mathbf{e}_\alpha \cdot \mathbf{u}) + \frac{3(\mathbf{e}_\alpha \cdot \mathbf{u})^2}{c^2} - \frac{1}{2}\mathbf{u}^2) \right] \quad (5)$$

ここで p_α は圧力の離散分布関数であり、式 (6) を用いて密度の分布関数を変換して得る。

$$p_\alpha = c_s^2 f_\alpha \quad (6)$$

ここで c_s は音速で、 $c_s = c/\sqrt{3}$ で与える。したがって、位置 \mathbf{x} 、時間 t における、圧力の分布関数 p_α による非圧縮性離散ボルツマン方程式は次のようにになる。

$$\begin{aligned} \frac{\partial p_\alpha(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \mathbf{e}_\alpha \cdot \nabla p_\alpha(\mathbf{x}, t) \\ = -\frac{1}{\tau} \{ p_\alpha(\mathbf{x}, t) - p_\alpha^{(eq)}(\mathbf{x}, t) \} \end{aligned} \quad (7)$$

本研究で用いている格子ボルツマン BGK 方程式である式 (8) は、式 (7) において左辺を時間段階 $t + \Delta t$ で時間微分項には後退オイラー法を用い、空間微分項には一次精度風上差分法を用いて離散化し、時間段階 t の衝突項を用いて導出することができる。

$$\begin{aligned} p_\alpha(\mathbf{x} + \mathbf{e}_\alpha \Delta t, t + \Delta t) - p_\alpha(\mathbf{x}, t) \\ = -\frac{1}{\tau} \{ p_\alpha(\mathbf{x}, t) - p_\alpha^{(eq)}(\mathbf{x}, t) \} \end{aligned} \quad (8)$$

巨視圧力 p 、速度 \mathbf{u} はそれぞれ次式でもとまる。

$$p = \sum_\alpha p_\alpha \quad (9)$$

$$\mathbf{u} = \frac{1}{\rho_0 c_s^2} \sum_\alpha p_\alpha \mathbf{e}_\alpha \quad (10)$$

また緩和時間 τ は動粘性係数 ν と次のような関係がある。

$$\tau = \frac{3\nu}{c\delta x} + \frac{1}{2} \quad (11)$$

したがって、適当な圧力と速度の初期条件を与え、式 (5) より平衡分布関数 $p_\alpha^{(eq)}$ を求める。分布関数 p_α は、

初期状態では、 $p_\alpha^{(eq)}$ に等しいと仮定して、レイノルズ数 Re を与え、式 (11) より緩和時間 τ を求めて、式 (8) を用いて次の時間段階の分布関数 p_α を求める。これより、式 (9) および式 (10) を用いると、次の時間段階の巨視圧力 p 、巨視速度 \mathbf{u} が求まる。これを用いて式 (5) より平衡分布関数 $p_\alpha^{(eq)}$ を求める。という手順を繰り返すことで時間発展的に式 (7) を解くことができる。

計算結果の一例として図 3 に、正四角柱を過ぎるレイノルズ数 $Re = 100$ の非圧縮性流の等圧力線を示す。初期流速 $U = 0.2$ 、初期圧力 $p_0 = \frac{1}{3}$ 、として計算格子には単一格子 { 格子点数 [379 × 199] 角柱一辺 18 格子 } を用いた。

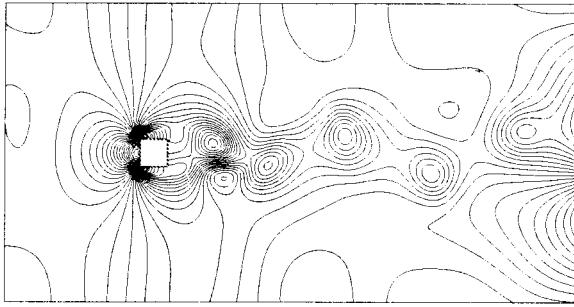


図 3: 正四角柱の等圧力線図 ($Re = 100$)

つぎに、曲面境界を有する代表的形状であり他者の計算結果例も多い、二次元円柱を過ぎる流れ場の数値計算の結果を図 4 に示す。

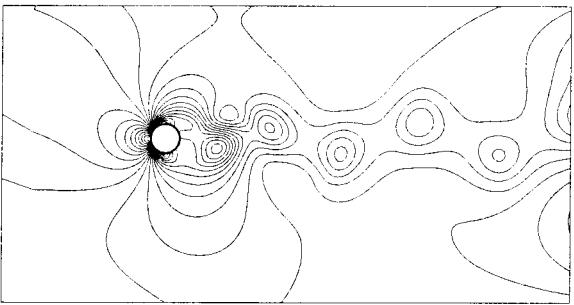


図 4: 円柱の等圧力線図 ($Re = 100$)

混相流の代表的な流動状態の一つである気液二相流は、工学的に極めて重要な問題であり、数値解析により現象を短期間で予測することが求められている。気液二相流を解析するにあたって、最も知りたい情報の一つが二流体の境界面がどのように変化するということである。従来、移動境界面の取り扱いには大きく分けて境界面追跡法と境界面捕獲法の二通りがある。境界面追跡法では、境界面の大変形などの場合、境界面の位相幾何学的性質の変化が大きく、解析が困難である。境界面捕獲法は境界面を間接的に表現し、この境界面を表現する関数を移流さ

ることにより境界面の移流および捕獲を行うものである。ただし、この方法にも問題がないわけではなく、境界面が拡散的であるといったことに注意をする必要がある。近年、捕獲法の一種として標位関数法が有望視されている。この方法は計算領域全域に境界面からの垂直距離関数を分布させることで、境界面を含む全標位関数を同じく全領域において移流させるというものである。この方法は境界面の拡散を抑制することに注目し、標位関数の再初期化を行うことで、境界面の拡散の問題が改善されている。

標位関数とは、異なる二流体の境界面を追跡することを目的とするものである。この標位関数は ϕ で表し、計算領域 R^n 内に $\Omega(t)$ の領域をもつ移動境界面 $\Gamma(t)$ は境界面の法線方向速度 \mathbf{F} で展開するものとすると、標位関数 ϕ は

$$\begin{cases} \phi(\mathbf{x}, t) < 0 & \text{in } \Omega(t) \\ \phi(\mathbf{x}, t) = 0 & \text{on } \Gamma(t) \\ \phi(\mathbf{x}, t) > 0 & \text{in } R^n / \bar{\Omega}(t) \end{cases} \quad (12)$$

のような値をとる境界面からの垂直距離関数である。ここでは、 $\mathbf{x} \in R^n$ 。逆に、標位関数から移動境界面を探し出すことができる。つまり、

$$\Gamma(t) = \{\mathbf{x} \in R^n : \phi(\mathbf{x}, t) = 0\} \quad (13)$$

この標位関数を計算領域全体に分布させ、次の移流方程式

$$\phi_t + \mathbf{u} \cdot \nabla \phi = 0 \quad (14)$$

あるいは

$$\phi_t + \mathbf{F} |\nabla \phi| = 0 \quad (15)$$

を全領域で解くことにより、境界面を含む全標位関数を移流させる。また、標位関数を用いることで移動境界面の単位法線ベクトル \mathbf{n} 、曲率 κ 、移動境界面の長さ $|\Gamma(t)|$ はそれぞれ以下のように表すことができる。

$$\mathbf{n} = -\frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|} \quad (16)$$

$$\kappa = -\nabla \cdot \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|} \quad (17)$$

$$|\Gamma(t)| = \int \delta(\phi) \cdot |\nabla \phi| d\mathbf{x} \quad (18)$$

ここで注意すべきのは、この方法は標位関数が境界面からの垂直距離関数であることにより成り立っているということである。しかしながら、標位関数は式 (8) あるいは (9) によって移流されるに当たり数値散逸により、境界面からの垂直距離関数としての性質が失われ、質量保存の悪化、さらに境界面の消失が起きる恐れがある。標位関数はもう一度境界面からの垂直距離関数としての性質

をもつようにその値を修正する再初期化を行う必要がある。再初期化は以下の式(13)を用いるものとする。

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = S(\phi_0)(1 - |\nabla \phi|) \quad (19)$$

$$S(\phi_0) = \frac{\phi_0}{\sqrt{\phi_0^2 + (\Delta x^2)}} \quad (20)$$

ここで Δx は格子幅で、 ϕ_0 は移流された直後再初期化する前の標位関数である。上式を解くことにより、境界面以外の点では $|\nabla \phi| = 1$ 、境界面上においては標位関数が変化しない。これによって、境界面からの垂直距離関数を作り出すことができる。

また、気液界面において ρ 、 μ は急に変化するので式(4)、(5)を解く際、数値的発散が生じる。数値発散を抑えて安定な計算を可能にするため、ある程度の厚さを境界面として定義する。これによって、境界面において密度及び粘性率関数が連続になって以下のように書き換える。

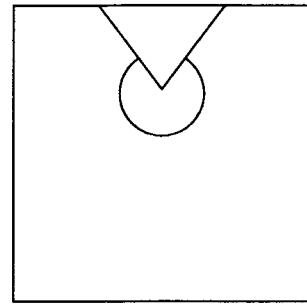
$$H_\alpha(\phi) = \begin{cases} 0 & \phi < -\alpha \\ (\phi + \alpha)/(2\alpha) + \sin(\pi\phi/\alpha)/2\pi & |\phi| \leq \alpha \\ 1 & \phi > \alpha \end{cases} \quad (21)$$

$$\rho(\phi) = \rho_{in} + (\rho_{out} - \rho_{in})H_\alpha(\phi) \quad (22)$$

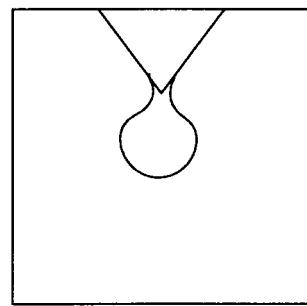
$$\mu(\phi) = \mu_{in} + (\mu_{out} - \mu_{in})H_\alpha(\phi) \quad (23)$$

ここで、 2α は気液界面の厚さである。本計算においては、 α の最適値を総合的に検討した上で $\alpha = 3\Delta x/4$ とする。

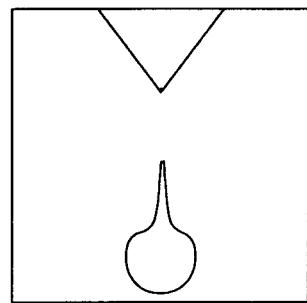
標位関数法の応用の一例として、二次元くさびから落下する液滴の運動の計算結果を図5に示す。



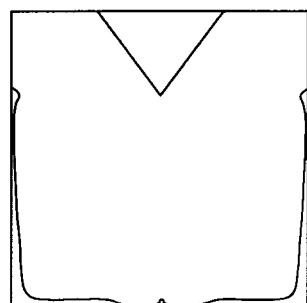
t=0.0



t=1.0



t=2.0



t=4.0

4 21世紀のCFD

ペタフロップス、テラバイト級のスーパーコンピュータの出現が期待でき、一方ギガフロップス、ギガバイト級のPCが100万円以下で手に入る現在、CFDの今後を考えることは時宜を得たことである。

21世紀のCFDとして考慮すべき問題は前述のプラットホーム以外に、計算アルゴリズムの面では、DDM、多重格子法などを用いた場合の並列加速率の向上、動的負荷分散であり、格子生成においては複雑形状に対する格子生成時間の短縮である。これに対しては、解適応階層的デカルト格子の採用が有望な方法である。

21世紀においてCFDの実用化がさらに促進されるためには予測性、信頼性の更なる向上が必要であり、この面では乱流モデル、特に大剥離を伴う場合に対する乱流モデルの開発が強く期待される。コンピュータ性能の向

図5: A droplet falling from a wedge.

上に伴い RANS からより普遍性のある LES への移行が予想される。仮想現実を応用した大規模計算結果の可視化と高速ネットワークの整備に伴う CFD データベースの構築および両者を利用した CFD の AP サービスの実現が期待できる。

参考文献

- 1) Chu,C.K.; Computational Fluid Dynamics,AIAA Selected Reprint Series,Oct.(1968).
- 2) Thompson,J.F. et.al. J.Comput.phys, 24,274-302, (1977).
- 3) Steger,J. Numerical Grid Generation Techniques, NASA Conference Publication 2166,463-478,(1980).
- 4) Nakamura,S. Numerical Grid Generation,North-Holland,(1982).
- 5) Bristeau,M.D. et.al. In Approximation Methods for Navier-Stokes Problems,Lecture Notes in Mathematics,Vol.771,New York:Springer Verlag(1980).
- 6) Steger,J. et.al. A Chimera Grid Scheme,Advanced in Grid Generation.ed. by Ghia,K.N.& Ghia,U., 59-70,(1983).
- 7) Nakahashi,K.& Deiwert,G.S. AIAA J.,25,4,513-520,(1987).
- 8) Von Neumann,J. & Richtmyer,R.D. J.Math.Phys, 21,(1950).
- 9) Lax,P.D. Comm. Pure and Applied Mathematics, 7,159-93,(1954).
- 10) Godunov,S.K. Mathmaticheskii Sbornik,47,271-306,(1959).
- 11) Lax,P.D. & Wendroff,B. Comm. Pure and Applied Mathematics,17,381-98,(1964).
- 12) Harlow,F.H.& Welch,J.E. Phys.Fluid,8, 2182-2189,(1965).
- 13) MacCormack,R.W. AIAA Paper,69-354,(1969).
- 14) Steager,J.L. & Warming, R.F. J.Comput.phys, 40,2,263-293,(1981).
- 15) Roe,P.L. J.Comput.phys,43,357-372,(1981).
- 16) Yee,H.;Upwind and Symmetric Shock-Capturing Schemes,NASA TM 89464,May,(1987).
- 17) Harten,A.& Osher,S. SIAM J.Numer.Anal,24, 279-309,(1987).
- 18) Jameson,A. et.al. AIAA Paper, 87-1184,(1987).
- 19) Beam, R.M. & Warming,R.F. AIAA J., 16, 393-402,(1976).
- 20) Yoon,S.& Kwak,D.& Chang,L. AIAA Paper, 89-1964,(1989).
- 21) Brandt,A. AIAA Paper, 79-1455,(1979).
- 22) Smith,B.F.& Bjørstad,P.E.& Gropp,W.D.; Domain Decomposition ,Cambridge univ. Press,(1996).
- 23) Sethian,J.A.; Level Set Methods,Cambridge univ. Press,(1996).
- 24) Hou,S. et al. J.Comput.Phys,118,329-347,(1995).
- 25) Goldberg,D.E.;Genetic Algorithms in Search,Optimization, and Machine Learning Addison-wesley,1-214,(1998)
- 26) He,X. & Luo,L.S. J.Stat.Phys,88,927-944,(1997).