

平成 21 年 5 月 1 日現在

研究種目：基盤研究 (B)
 研究期間：2006～2008
 課題番号：18360089
 研究課題名 (和文) 二相系格子ボルツマン法と並列計算機を用いた気液二相流の大規模シミュレーターの開発
 研究課題名 (英文) Development of a large-scale simulator of two-phase flows by the lattice Boltzmann method on a parallel computer
 研究代表者
 稲室 隆二 (INAMURO TAKAJI)
 京都大学・大学院工学研究科・教授
 研究者番号：20263113

研究成果の概要：二相系格子ボルツマン法を並列計算機 (最大 32CPU) に移植して気液二相流の大規模シミュレーターを開発し、液滴衝突や気泡流の大規模計算を行い実験結果と比較することにより開発したシミュレーターの性能を検証した。その結果、開発したシミュレーターは、複雑な気液二相流に対しても安定で精度の良い計算が可能になったことがわかった。さらに、本シミュレーターを用いて、これまで不明であった液滴衝突の挙動やマイクロ流路内の気液二相流の挙動などを明らかにすることができた。

交付額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2006年度	7,000,000	2,100,000	9,100,000
2007年度	2,900,000	870,000	3,770,000
2008年度	2,600,000	780,000	3,380,000
年度			
年度			
総計	12,500,000	3,750,000	16,250,000

研究分野：工学

科研費の分科・細目：機械工学・流体工学

キーワード：混相流, 格子ボルツマン法

1. 研究開始当初の背景

気液二相流の問題は、機械工学、原子力工学、化学工学などの様々な分野において重要な課題であり、これまで多くの実験的、数値解析的および理論解析的研究がなされてきている。気液二相流の特徴は、界面が存在しその界面形状が複雑に変化し、多様かつ複雑な流動様式を示すことである。すなわち、気液二相流を解明するためには、界面ダイナミクスの解析が重要な課題である。しかしながら、界面の複雑な挙動を明らかにするために

は、実験的ならびに理論解析的アプローチでは限界があり、数値解析的アプローチが不可欠である。

気液二相流の界面現象を支配する基礎過程を忠実に定式化し、それを基に計算機シミュレーションすることは、現在の計算機能力でも極めて困難である。たとえば、二相間に作用する界面張力や二相間の相変化などは、本来は分子レベルの非平衡現象であるため、分子動力学法によるアプローチが有効であるが、上記のようなマクロスケールの流動を

取り扱うには現在の計算機能力では不可能である。一方、分子レベルの現象にとらわれず界面張力や相変化をマクロレベルでモデル化して二相流の挙動を数値解析する方法として、VOF (Volume of Fluid) 法, Level Set 法, Front Tracking 法などが提案されているが、いずれの方法も界面を二相が接する不連続面 (物理的構造を無視し数学的に理想化した面) として扱うため、界面の分裂や合一などの複雑な界面挙動を取り扱う際の問題点 (例えば、質量保存の精度や固体表面での不連続面の境界条件) が指摘されている。

それに対して、両者の中間に位置するメソスケールの界面ダイナミクス解析法として、二相系格子ボルツマン法 (二相系 Lattice Boltzmann Method. 以下、二相系 LBM とよぶ) が注目されている。二相系 LBM は、最近、材料科学を中心に発展している Phase-field 法の一つと考えることができる。二相系 LBM では、非平衡系の熱力学に基づいて界面形状や界面張力が導入されているため、界面の挙動を陽に追跡する必要がなく、界面形状は自律的に決まる。また、質量保存性に優れている。したがって、本手法は上記のミクロならびにマクロスケールの数値解析法がもっている問題点を解決し得る可能性があり、申請者はこれまでの研究で液液および気液二相流に適用可能な新しい二相系 LBM を開発し、手法の妥当性および計算精度を検証してきた。さらに、世界に先駆けて、二相の密度比が 1000 程度まで適用できる新しい二相系 LBM を開発してきた。また、二相系 LBM の欠点である変数として速度分布関数を用いるためメモリーを多く使うことや高レイノルズ数の計算が不安定になることなどを解決する新しい方法である格子運動論スキーム (Lattice Kinetic Scheme) を開発した。なお、この格子運動論スキームは、二相系 LBM を改良した手法と位置づけられる。加えて、格子ボルツマン法は、隣接格子点の値だけを使って計算を進めることができるため、並列処理に向いており次世代の並列コンピューターに非常に適した計算手法であることが特徴である。したがって、近年の発展が目覚ましい並列計算機を用いて計算の高速化を計ることが期待できる。

2. 研究の目的

本研究では、これまでに開発してきた二相系 LBM (実際には LBM を改良した格子運動論スキーム) を並列計算機に移植し、気液二相流の大規模シミュレーターを開発し、このシミュレーターを用いて液滴流や気泡流の大規模計算を行い実験結果との比較によりシミュレーターの性能を検証することを目的とする。

3. 研究の方法

[H18 年度]

(1) 格子ボルツマン法を用いて圧力計算のためのポアソン方程式の高速解法を開発する。開発したプログラムを既存の二相系 LBM のプログラムに組み入れ、テスト計算により効率および妥当性を確認した (稲室)。

(2) 上述の二相系 LBM プログラムを MPI (並列計算法) を用いて並列計算用プログラムに改良し、現有の小型 PC クラスタ並列計算 (6CPU) を用いて動作確認とテスト計算を行った (杉元)。

(3) 上の並列計算用プログラムを本年度購入の PC クラスタ並列計算機 (32CPU) に移植し動作確認をした後、次の基本問題を計算し、解析手法の妥当性を検証した (稲室, 杉元)。

①液滴同士の衝突

二つの液滴の衝突計算には、小さい方の液滴の挙動を精度良く計算するため、多くのメッシュが必要である。次ページの図 1 に同じ直径の液滴同士の衝突計算例を示す。この結果は 1CPU を用いた計算であるが、分裂後の中央に生じる小さな液滴は時間が経過するに従って消滅する。32CPU を用いれば、この小さな液滴も精度良く計算できることが期待できる。また、現有の並列計算機では計算できない直径比の大きな液滴の衝突の計算も可能となる。

②上昇気泡流

上昇気泡流は、気液界面が複雑に変化する気液二相流の代表的な現象である。従来の二相流解析法では界面の分裂や合体の取り扱いが困難であるが、二相系 LBM では界面の挙動は自立的に計算できるので、そのような困難さはない。次ページの図 2 に気泡塔の計算結果例を示す。これも 1CPU で計算したものである。気泡の複雑な挙動が計算されている様子が分かる。32CPU を用いれば、より大きな領域の計算が可能となる。

③ミクロ構造内の気液二相流

MEMS や燃料電池に見られるように、近年、ミクロ構造内の気液二相流の挙動解析が重要になってきている。これら特徴は、通常、複雑な構造内の流れであることである。したがって、一般に多くの計算メッシュを必要とするため、大型 PC クラスタ並列計算機を用いて適用可能性を検討する。

(4) 上述の基本問題への適用を通して、開発した並列計算用の二相系 LBM のプログラムの並列化性能を検討し、次年度の検討課題を抽出した (稲室)。

[H19 年度]

(1) 前年度に開発する MPI を用いた並列計算

用プログラムは、分散型メモリであるため、各々のクラスタで得られた計算結果を一つにまとめて処理するためには、各クラスタのメモリ内の結果を一つのメモリに集約して処理する必要がある。そのためには、大容量メモリ計算機を購入し、画像処理ソフトをインストールして、最終計算結果を画像処理する計算結果処理システムを構築した(杉元)。

(2) 前年度に実施する基本問題(液滴同士の衝突, 上昇気泡流, ミクロ構造内の気液二相流)計算結果を用いて, 上記で構築した計算結果処理システムを検証する。二相流の挙動は流速ベクトルだけでなく界面の表現の方法が重要である。それぞれの問題に適した界面の表現方法を検討した(稲室, 杉元)。

[平成 20 年度]

(1) 前年度までに開発する大規模二相流シミュレーターを用いて, 基本問題(液滴同士の衝突, 上昇気泡流, ミクロ構造内の気液二相流)を計算し, 既存の実験結果と比較して計算精度の検証を行う。また, 計算時間(並列化効率)も検証した(稲室, 杉元)。なお, 本年度に導入する大容量ファイルサーバは, 途中の計算結果を保存するために使用した。

(2) 最大の 32CPU を用いた並列計算機を行って, 複雑流路内の気液二相流(例えば, 冷凍機内の気液分配器周辺の冷媒とその蒸気の振る舞い, 燃料電池の電極内の気液二相流の挙動など)の大規模計算を行い, 局所の気液挙動を明らかにした(稲室, 杉元)。

(3) H18 年度~H20 年度の研究成果を基に, 開発した大規模二相流シミュレーターの問題点を整理し, 次段階の研究に着手するための総括を行った(稲室)。

4. 研究成果

(1) 液滴同士の衝突

液滴の衝突は, 雨滴の形成やエンジン内の噴霧過程などの理工学分野に関連して重要な現象であり, 流体力学では界面ダイナミクスに関連して非常に興味深い現象である。本研究では, 開発したシミュレーターを用いて液滴衝突の数値計算を行った。図 1 は, 直径比 $D_1/D_2=0.5$, ウェーバ数 $We=\rho VD/\mu=61.5$, 衝突パラメータ $B=2X/(D_1+D_2)=0.6$ の計算結果である。衝突パラメータ B が大きいと, 衝突の際に液滴の一部しか接触しない。液滴の大部分は初速度の向きに進もうとするため, 接触部分の液滴は引き伸ばされ分裂する。この衝突形態は **stretching separation** と呼ばれている。その他の代表的な衝突形態としては, 衝突後に 1 つの液滴に合体する **coalescence** と衝突後に反発しながら分裂す

る **reflexive separation** がある。

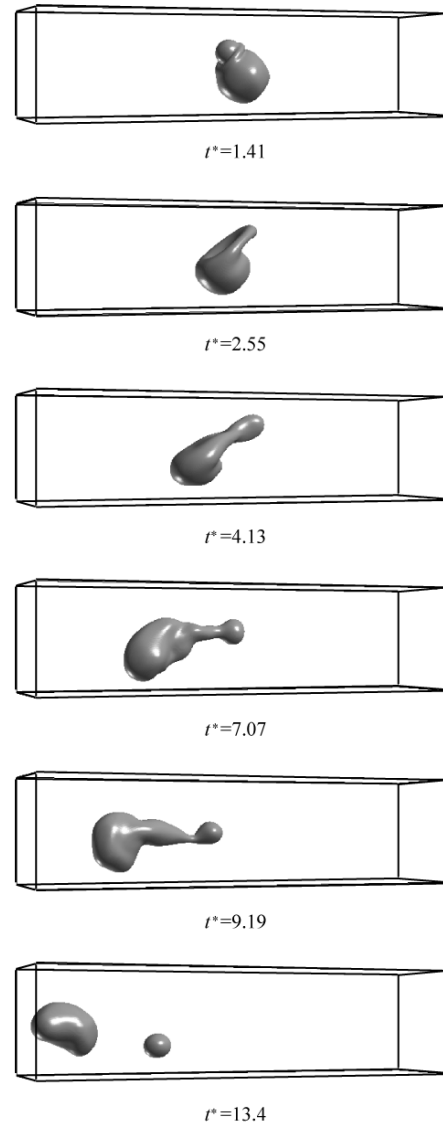


図 1. 液滴衝突の計算結果. 直径比 $D_1/D_2=0.5$, ウェーバ数 $We=\rho VD/\mu=61.5$, 衝突パラメータ $B=2X/(D_1+D_2)=0.6$.

(2) 上昇気泡流

気液二相流の特徴は, 界面が存在しその界面形状が複雑に変化し, 多様かつ複雑な流動様式を示すことである。図 2 は, 冷凍機内の分岐流路内の気液二相流計算結果を示す。気液の密度比は約 45, レイノルス数は 20,000 程度である。気液流が下部の 1 つの入口から流入し上部の 2 つの出口から流出する。左図は気液界面を表示しており, 右図は中央断面の気液分布(赤:液体, 青:気体)を表示している。図より, 気液界面は分岐流路内部で複雑な挙動を示すことがわかる。分岐部の傾斜や入口および出口の配置が流量分配におよぼす影響を調べた。

なお、本計算のように2つの出口からの流量分配を求めるためには、長時間の計算が必要であり、並列計算による高速化は必須である。

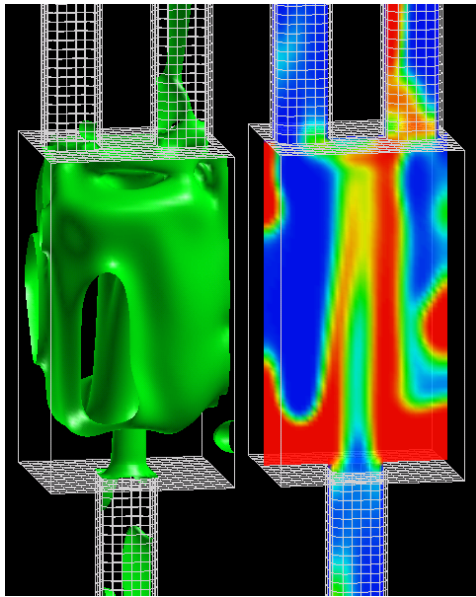


図 2. 分岐流路内の気液二相流シミュレーション結果

(3) ミクロ構造内の気液二相流

自動車搭載の燃料電池の開発やCO₂地下貯留などに関連して、マイクロポーラス構造内の気液二相流の解析の必要性が高まっている。本研究では、壁面上での接触角、表面張力およびボイド率を変化させたときの気液二相流の挙動を解析した。

図3に本研究で用いたマイクロポーラス構造を示す。格子上的構造を規則的に千鳥配置したものである。側面は周期境界になってお

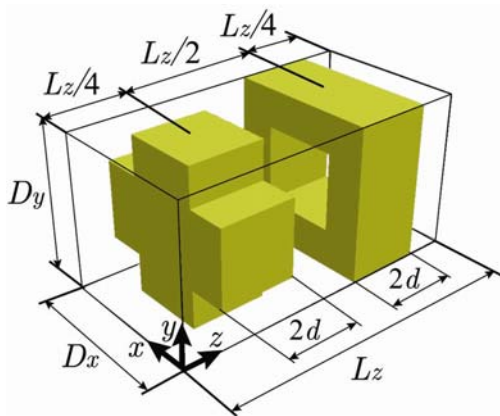


図 3. マイクロポーラス構造

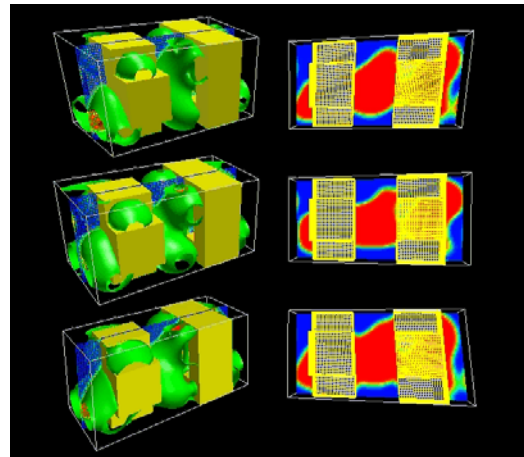


図 4. 接触角を変化させたときの気液二相流の様子 (上: 120 度, 中: 90 度, 下: 42 度)

り、このような構造が無限につながっている。図4に計算結果の一例を示す。計算結果から接触角が大きい(疎水性)ほど液体の透過性が向上し流速が大きくなることがわかった。

(4) 研究成果のまとめ

以上のように、本研究で開発した大規模二相流シミュレーターは、並列計算機との相性も良く、また計算精度も良好である。

なお、研究代表者らが開発した二相系LBMは、高密度比の気液二相流の数値解析法として世界中から注目されており、同様の手法による研究が世界中で多数なされている。今後も本研究分野で世界をリードしてゆくことが期待されている。

(5) 今後の課題

今後の課題として、下記の検討が挙げられ、引き続き研究を進めて行く予定である。

- ①ポアソン方程式を用いない圧力計算法を提案したが、計算精度を向上させる必要がある。
- ②LBMと埋め込み境界法とを組み合わせた方法が有望であり、今後の開発が望まれる。
- ③気泡流のようなより複雑な現象解析には長時間の計算が必要であり、更なる計算時間の短縮化の検討が必要である。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 8 件)

- ① J. Timiyasu, T. Inamuro, Numerical simulation of gas-liquid two-phase flows in a micro porous structure, Eur. Phys. J. Special Topics, 171, 123-127, 2009, 査読有
- ② T. Nishiyama, S. Yasuda, T. Inamuro, Lattice Boltzmann simulation of the dispersion of aggregated Brownian particles under shear flows, Eur. Phys. J. Special Topics, 171, 145-149, 2009, 査読有
- ③ B. Sakakibara, T. Inamuro, Lattice Boltzmann simulation of collision dynamics of two unequal-size droplets, Int. J. Heat Mass Transfer, 51, 3207-3216, 2008, 査読有
- ④ 榊原文平, 稲室隆二, 二相系格子ボルツマン法を用いた液滴衝突の数値解析 (直径比 0.5 の場合), 混相流研究の進展, 2, 157-164, 2007, 査読有
- ⑤ 富安城司, 稲室隆二, マイクロポーラス構造内の気液二相流解析, 日本機械学会論文集 B, 73, 2213-2219, 2007, 査読有
- ⑥ T. Inamuro, Lattice Boltzmann methods for viscous fluid flows and for two-phase fluid flows, Fluid Dynamics Research, 38, 641-659, 2006, 査読有
- ⑦ K. Kobayashi, T. Inamuro, F. Ogino, Numerical simulation of advancing interface in a micro heterogeneous channel by the lattice Boltzmann method, J. Chem. Eng. Japan, 39, 257-266, 2006, 査読有
- ⑧ T. Inamuro, T. Ii, Lattice Boltzmann simulation of the dispersion of aggregated particles under shear flows, Mathematics and Computers in Simulation, 72, 141-146, 2006, 査読有

[学会発表] (計 11 件)

- ① T. Inamuro, Lattice Boltzmann methods for viscous fluid flows and two-phase fluid flows, The 5th Int. Conf. on Computational Fluid Dynamics, 2008
- ② 西山卓哉, 稲室隆二, 大きさの異なる微粒子で構成された微粒子凝集体の分散化シミュレーション, 日本混相流学会年会講演会, 2008
- ③ 棟方稔久, 稲室隆二, 兵頭志明, 毛管

圧の解析に対する Leverett function の適用性, 日本混相流学会年会講演会, 2008

- ④ 越山将裕, 稲室隆二, ポアズイユ流中における球形および非球形粒子の運動, 日本流体力学学会年会 2008, 2008
- ⑤ T. Inamuro, H. Hayashi, M. Koshiyama, Lattice Boltzmann simulation of the behavior of spherical and nonspherical particles in a square pipe, DFD08 Meeting of The American Physical Society, 2008
- ⑥ 越山将裕, 稲室隆二, 二相系格子ボルツマン法によるポアズイユ流中における非球形粒子の挙動解析, 第 22 回数値流体力学シンポジウム, 2008
- ⑦ 盛山浩司, 稲室隆二, 二相系格子ボルツマン法を用いた微小流路内壁面における水滴挙動解析, 第 22 回数値流体力学シンポジウム, 2008
- ⑧ 稲室隆二, 二相系格子ボルツマン法による混相流シミュレーション—最新の応用例と今後の展開, 第 26 回混相流シンポジウム, 2007
- ⑨ 林洋史, 越山将裕, 稲室隆二, 管路内を流れる球形および非球形粒子の挙動解析, 第 21 回数値流体力学シンポジウム, 2007
- ⑩ 佐藤巨, 稲室隆二, 高密度比の気液二相流に対する新しい二相系格子ボルツマン法, 第 21 回数値流体力学シンポジウム, 2007
- ⑪ 西山卓哉, 安田修悟, 稲室隆二, 二相系格子ボルツマン法を用いたせん断流れ場における微粒子分散シミュレーション, 2007

[その他]

<http://fd.kuaero.kyoto-u.ac.jp/>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

稲室 隆二 (INAMURO TAKJI)
京都大学・大学院工学研究科・教授
研究者番号：20263113

(2) 研究分担者

杉元 宏 (SUGIMOTO HIROSHI)
京都大学・大学院工学研究科・講師
研究者番号：50222055

(3) 連携研究者

なし