

平成 30 年 6 月 11 日現在

機関番号：12608

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2015～2017

課題番号：15H03916

研究課題名(和文)工学実用から要請される高性能非構造自由界面多相流数値モデル開発と実証

研究課題名(英文) Development and validation of high-fidelity unstructured-grid numerical model for interfacial multiphase flows toward engineering applications

研究代表者

肖鋒(Xiao, Feng)

東京工業大学・工学院・教授

研究者番号：50280912

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 12,600,000円

研究成果の概要(和文)：工学応用に広く用いられる非構造格子における多相流数値流体力学モデルの計算精度及びロバスト性を一層改善するために、本研究企画を実施した。高性能な数値モデルの開発及び実証を中心に研究を遂行し、次の主な成果が得られた。任意形状要素、混合要素を持つ非構造格子における三次精度高性能数値流体力学コアを構築した。複雑非構造要素における高精度自由界面捕獲法を開発した。非構造格子における高性能な自由界面多相流汎用CFDモデルのフレームワークを構築した。自由界面多相流数値モデルを検証するための実験データセットを整備し、数値モデルの実証を行った。本研究によって工学上実用性の高い高性能数値モデルを確立した。

研究成果の概要(英文)：This research project aims at the substantial improvement of accuracy and robustness of numerical model for interfacial multiphase flows in unstructured-grids for engineering applications. Major efforts have been made on the development and validation of novel high-performance numerical model. The following main achievements have been obtained. (1) A third-order numerical dynamic core for unstructured grids with arbitrary shape elements and mixed elements has been constructed. (2) An accurate numerical method for capturing moving interface has been developed for unstructured grids of hybrid elements. (3) A high-fidelity general-purpose numerical framework for interfacial multiphase flows in unstructured grids has been developed. (4) An experimental data set for validating numerical models has been prepared and used to validate the numerical model developed in the project. This research project has established a high-performance numerical model with great practical significance.

研究分野：数値流体力学

キーワード：数値流体力学 多相流 自由界面流れ 非構造格子 計算法 数値流体モデル 計算物理 流体工学

1. 研究開始当初の背景

ものづくりが中心となる工学分野において数値流体力学 (CFD) の活用は不可欠である。製品開発の設計現場で直面する殆どの実問題は複雑な幾何形状を有するため、Fig.1 に示すような多面体を要素とする非構造格子が広く用いられている。商用ソフトを中心に、CFD コードは非構造格子をベースに開発されており、自由界面多相流を模擬する機能が一般的に整備されているが、現状として複雑流路における自由界面多相流シミュレーションの再現性が低く、工学実用の要請に十分対応できていない。

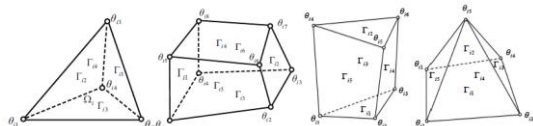


Fig.1 The basic elements of hybrid unstructured meshes for CFD codes.

その主な原因として力学コアの部分において次の根本的な欠陥が残されている。①従来型の有限体積法は高い汎用性を有するが、非構造格子での2次精度を超える高精度化は困難であり、さらに計算結果は格子品質に大きく影響されるため、ロバスト性にも欠ける。②自由界面の計算に幾何的再構築に基づくVOF (Volume of Fluid) 法は非構造格子への適用は非常に困難であるため汎用性に乏しく、既存コードの大半は他の低精度代替手法を利用している。これらの問題点は、非構造自由界面多相流 CFD コードの発展を阻む大きな要因となり、従来数値解法の枠組みのなかでは根本的に解決するのが極めて難しい。このため、新たな数値手法を基盤とする実用性の高い汎用非構造格子自由界面多相流モデルの開発は数値流体力学分野の喫緊の課題である

一方、複雑流路内の自由界面多相流現象は、厳密解が存在しないため、数値モデルを検証する際に実験結果に頼らざるを得ない場合は多い。しかし、学術研究レベルで利用可能なベンチマークデータセットが公開されておらず、当分野の研究進展にとって大きな弊害となっている。

2. 研究の目的

これまでの研究成果を踏まえ、申請者らが提案した数値解法を基盤とする高性能非構造自由界面多相流数値モデルの構築及び実証を行い、工学実用の要請に充分対応できる数値モデルを確立することが本研究の目的である。具体的には、本研究を通して次の目標を達成する。

- (1) 任意形状要素、混合要素を持つ非構造格子における三次精度高性能数値流体力学コアを構築する。
- (2) 複雑非構造要素における高精度自由界面捕獲法を開発する。

(3) 非構造格子における高性能自由界面多相流汎用 CFD モデルのフレームワークを構築する。

(4) 観測実験による自由界面多相流数値モデルを検証するためのデータセットを整備し、数値モデルの実証を行う。

3. 研究の方法

3.1 複雑な非構造要素におけるマルチモーメント有限体積法 (MMFVM) に基づく数値流体力学コアの構築

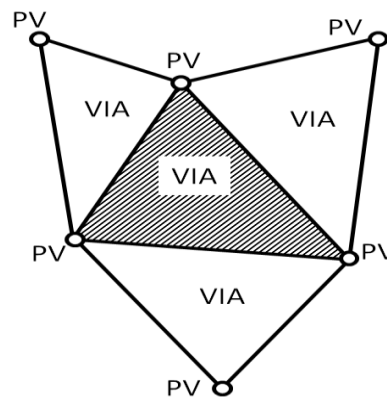


Fig.2 Definition of the computational moments for the multi-moment finite volume method (MMFVM).

MMFVM 法では、Fig.2 に示すように、従来型の有限体積法のモデル変数であるメッシュセルにおける積分平均値 (VIA) に加え、セル節点の点値 (PV) も新たにモデル変数として取り扱う。従って、注目するセルとその隣接セルで構成するコンパクトなステンシルにおいて高次補間を構築することができる。様々な要素形状において理論分析と数値実験の両面から補間再構築を検討し、高精度かつロバスト性を持つ再構築関数及びそれを定めるためのマルチ・モーメント制約条件を見出す。さらに MMFVM 法を用いてナビエ-ストークス方程式に基づく一般流体力学数値解析モデルを開発する。

3.2 非構造格子における高性能自由界面捕獲法の開発

通常の幾何再構築に基づく VOF 法は、平面ポリゴンを用いて自由界面を近似するため、界面の法線方向及び曲率の計算精度が低く、表面張力の計算誤差による疑似流れが生じる問題点がある。また、幾何要素を取り扱う演算は煩雑であるため、従来の VOF 法を構造格子へ拡張することが困難である。本研究では、THINC (Tangent of Hyperbola Interface Capturing) 法を用い、自由界面の幾何的情報を解析可能な関数を通して陰的に表現することによって任意形状の格子要素において二次曲面による自由界面再構築を行う。これまでに非構造格子における多次元 THINC 補間関数の再構築を行う際に各方向において厳密積分と数値積分を併用していた。本研究で

は、汎用性と計算効率を図るため、数値積分を用いる。

3.3 自由界面多相流力学モデルの構築

前述の研究項目の成果をもとに、非構造格子における自由界面多相流モデルを構築する。多相流の特徴である密度変化の大きい流れに適用するために、有限体積法の定式化に基づく運動量移流計算の保存型数値解法を考案する。これによって密度差の大きい多相流問題の計算精度を大きく改善することを狙う。また、表面張力や重力など外力の計算について Balanced force 定式化を開発する。

3.4 数値モデル検証用実験データセットの構築及び開発した数値モデルの実証

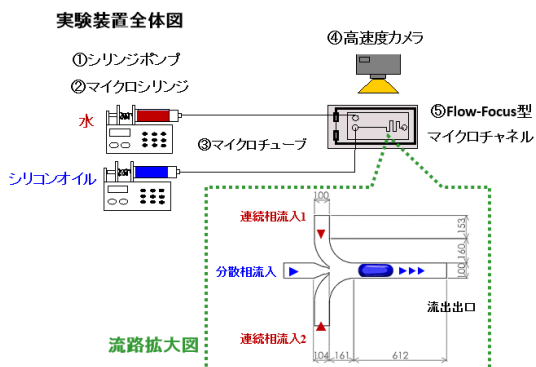


Fig.3 The configuration of experimental system for multiphase interfacial flows in microchannel.

マイクロスケール流路内の自由界面多相流に関する実験を行い、数値モデル検証するためのベンチマークデータセットを整備する。具体的には、産総研との共同研究によって Fig. 3 に示す実験装置を作成し、マイクロスケールの複雑流路内の自由界面多相流に関する実験を行う。T字型及びFlow Focus型のマイクロチップを作成し、水を連続相、シリコンオイルを分散相としたマイクロドロップレットの生成実験を行い、様々な条件における画像データを取得する。これらの実験データを用いて前述の数値モデルの検証を行う。

4. 研究成果

研究期間において以下主な研究成果が得られた。

4.1 任意形状要素を持つハイブリッド非構造格子における高性能流体ソルバーの確立

我々が独自に考案した高性能数値解法 (MMFVM 法) を用いて、実用性の高い汎用非構造格子流体ソルバーの開発に成功した。

粘性流れの Taylor 渦ベンチマークテストにおいて非構造格子を用いて検証計算を行った。計算精度 (数値誤差, 収束率) 及び計算負荷 (CPU 時間) について、MMFVM と既存の広く使われている有限体積法 (FVM) との比較結果を Tab. 1 に示す。MMFVM 法は、流れ

場の計算にはほぼ3次精度を達成し、数万メッシュ要素以上の格子において従来FVM計算誤差の1%以下まで精度向上を達成した。また、計算量においてもFVMより大幅な増加が見られず、他の既存手法に比べ、MMFVM法は計算精度、ロバスト性、計算効率などの面から総合的な優位性を備え持っており、実用性の高い非構造格子流体ソルバーといえる。

複雑形状流路を持つ検証テストとして三角形キャビティ粘性流れの計算結果を Fig. 4 に示す。渦構造を正しく捉えたことがわかる。

球周りの3次元粘性流れの計算結果を Fig. 5 に示す。また、それに対応する抵抗力係数, 揚力係数, Strouhal 数などにおける定量的評価も他の高精度計算手法の計算結果とよく一致することを確認できた。

	3604 Elements	14362 Elements	57670 Elements	
FVM	L_2 error of $ u $	2.219×10^{-2}	6.920×10^{-3}	1.642×10^{-3}
	Rate		1.69	2.07
	L_2 error of p	2.436×10^{-1}	6.743×10^{-2}	2.582×10^{-2}
MM-FVM	Rate		1.86	1.38
	Time(s)	12.43	47.78	226.32
	L_2 error of $ u $	8.837×10^{-4}	1.265×10^{-4}	1.780×10^{-5}
MM-FVM	Rate		2.81	2.82
	L_2 error of p	5.941×10^{-3}	1.075×10^{-3}	2.623×10^{-4}
	Rate		2.47	2.03
	Time(s)	13.04	57.22	281.25

Tab.1 Comparison between conventional FVM and MMFVM (Taylor vortex benchmark test).

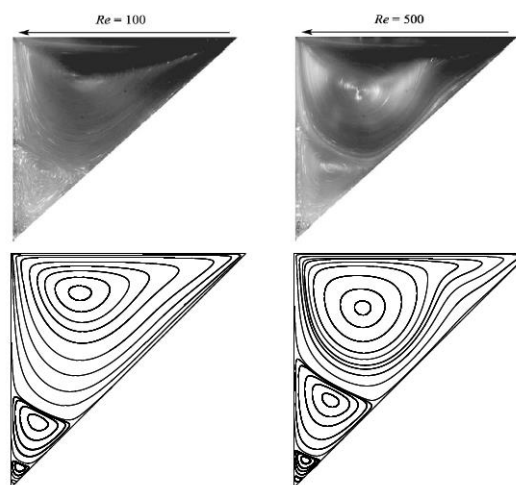


Fig.4 Lid-driven viscous flow in a triangular cavity with different Reynolds numbers. Top: experiment results; Bottom: numerical results of MMFVM.

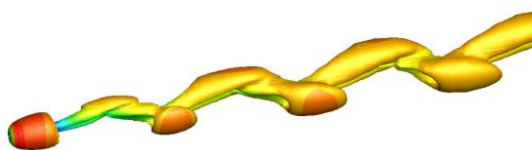


Fig.5 The vortical structure of a viscous flow pass a sphere (Re=300).

4.2 任意非構造格子における高性能自由界面捕獲法

任意形状要素・混合要素を持つ非構造格子における自由界面捕獲法である THINC/QQ (THINC method with quadratic surface representation and Gaussian quadrature)

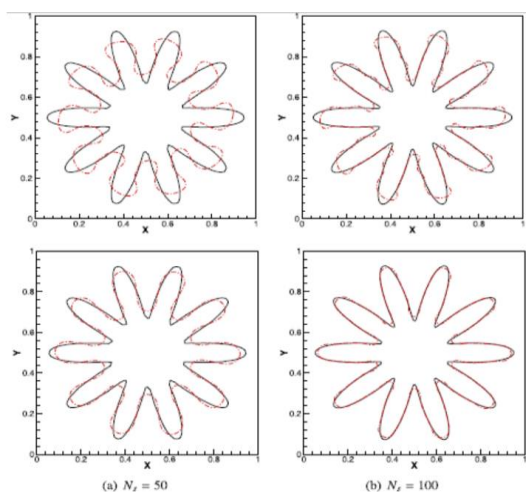


Fig.6 Solid-rotation of an asterisk moving interface computed by schemes using plane (top) and quadratic (bottom) interface representations.

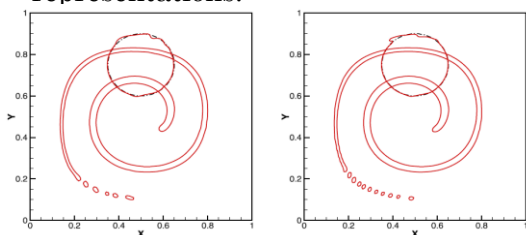


Fig.7 Vortical shearing transport of moving interface.

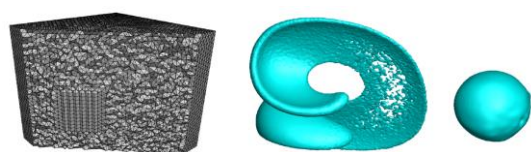


Fig.8 3D deformational transport test on hybrid unstructured grid. Displayed are computational grid (left), deformed moving interface (middle) and reversed sphere of the interface surface (right).

の開発に成功した。この手法は既存手法の平面による界面再構築と異なり、2次曲面を用いて界面を表現する。平面による界面再構築に比べ、2次曲面による界面再構築法は数値解の対称性や幾何形状の保存性など自由界面捕獲法に非常に重要で性質が大きく改善された (Fig. 6)。非構造格子における変形流れ場による移動界面のベンチマークテスト結果を Fig. 7 に示す。数値誤差の定量評価によると、THINC/QQ 法は既存の幾何再構築

に基づく VOF (構造格子) に遜色のない計算精度を有することを確認できた。

THINC/QQ 法の計算アルゴリズムは簡単であるため、3次元非構造格子にも容易に拡張できる。Fig. 8 に三次元混合非構造格子における変形流れ場による自由界面の移流計算結果を示す。この結果及び定量的な誤差評価から、本手法の精度は既存の VOF 法より優れることが実証された。

4.3 自由界面多相流数値モデルの構築

上述の MMFVM 法と THINC/QQ 法を基軸とする新しい多相流数値モデルを構築した。実用に向けて、運動量の移流計算において保存型数値定式化を開発した。これによって密度差の大きい多相流問題の計算精度が大きく改善された。また、表面張力や重力など外力の計算について Balanced force の定式化を開発し、表面張力が支配的であるマイクロスケール多相流の計算に伴う擬似流れを防ぐことに成功した。

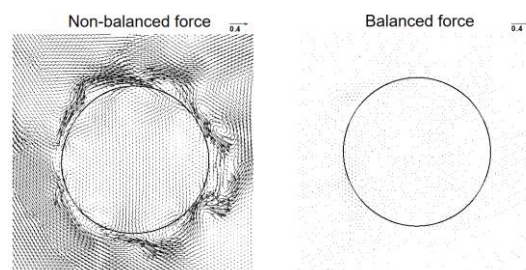


Fig.9 Numerical results for Young-Laplace problem. Velocity fields computed from the unbalanced-force (left) and the balanced force (right) formulations.

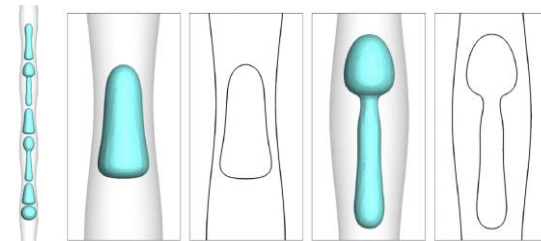


Fig.10 Drop rising through an expanded/constricted channel.

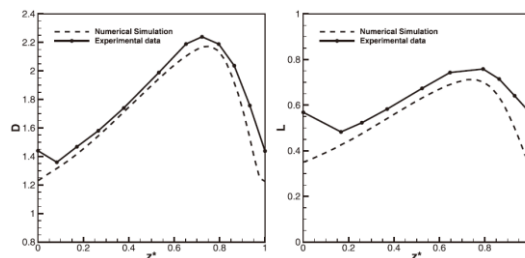


Fig.11 The characteristic length and width of the rising drop in comparison with experimental results.

Fig. 9 に示されるように、Balanced force の定式化に基づく表面張力モデルを用いるこ

とで界面近傍に発生する疑似流れを完全に解消した。本モデルは Capillary 効果が非常に顕著なマイクロ流路内の多相流数値解析にも適用可能である。

Fig. 10 に示すように、拡大・収束管内上昇する液滴の収縮部と拡大部における形状をよく捉えた。また、液滴の特徴長さとおける定量的な評価として実験値との比較結果を Fig. 11 に表す。複雑流路内の自由界面多相流現象を再現できることが分かる。

さらに、表面張力効果の強い自由界面多相流の検証問題として液体ジェット分裂および Plateau-Rayleigh 不安定性問題を計算した。Fig. 12 に示すように、液体ジェットの

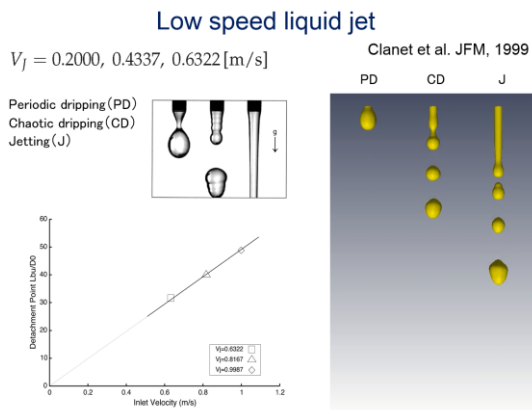


Fig.12 Surface instability of liquid jets of different velocities.

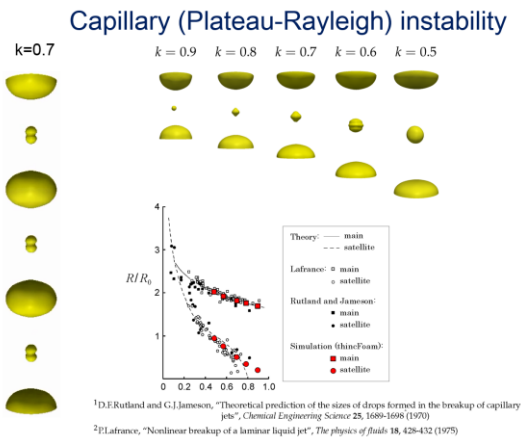


Fig.13 Plateau-Rayleigh instability.



Fig.14 The primary breakup of liquid jet in a transverse wind field.

分裂は噴出速度に強く依存し、速度によって PD (periodic dripping), CD (chaotic dripping) および連続ジェットに分類される。本計算モデルは、異なる分裂の様子をよく再現している。Fig. 13 には、Plateau-Rayleigh 不安定性の計算結果を表す。表面張力の効果によりちぎれる液柱は体積不均等の液玉に分裂する。この検証を正しく模擬するためには、関わるすべての力の計算モデルに高い精度が求められる。本テストでは、分裂した大・小の液玉体積について定量的な評価を行った。既往研究とよく一致する結果が得られた。

噴霧現象の直接シミュレーションを行い、Fig. 14 に示すように横風を受け、液体ジェット分裂の様子を再現した。噴霧の広がり具合、界面不安定の発達過程、粒径の空間分布などにおいて理論および実験観測と一致する結果が得られた。

4.4 実験結果による数値モデルの検証

3.4 で述べた実験装置を用い、マイクロスケールの複雑流路内の自由界面多相流に関する実験を行った。T 字型及び Flow Focus 型のマイクロチップを作成し、水を連続相、シリコンオイルを分散相としたマイクロドロップレットの生成実験を行い、様々な条件における画像データを取得した。これらの画像データをもとに数値モデルの実証を行った。その一例を Fig. 15 に示す。flow-focus 型の

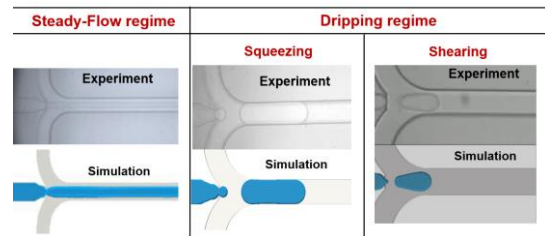


Fig.15 The experimental and numerical results of droplet of different regimes in micro-channel.

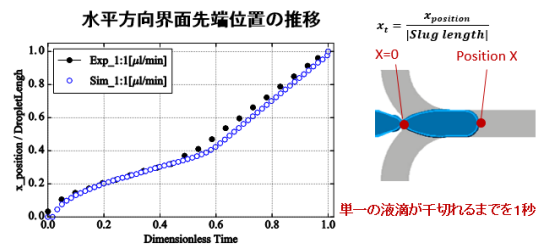


Fig.16 Validation for the position and size of generated droplet.

マイクロチャンネル内では分散相となる流体が中央の主流を左から右へ流れるのに対して、横方向左右から曲率をもって合流した連続相によって、おし切られる形で液滴が生成される。連続相と分散相の流量を調整することによって、チャンネル内流れの様子、生成する液滴の大きさを決める。様々な実験条件に合わせて数値シミュレーションを行い、

各流動パターン of 模擬に成功した。

さらに生成された液滴の位置および大きさに対して定量的に評価し, Fig. 16 に示すように, 実験とよく一致した結果が得られ, 本研究で開発した数値モデルが実現象をよく再現できることを実証した。

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 13 件)

(1) B. Xie and F. Xiao (査読有): Toward efficient & accurate interface capturing on arbitrary hybrid unstructured grids: The THINC method with quadratic surface representation and Gaussian quadrature, J. Comput. Phys., 349, 415-440 (2017).

(2) X. Deng, B. Xie and F. Xiao (査読有): Multimoment Finite Volume Solver for Euler Equations on Unstructured Grids, AIAA Journal, 55, 2617-2629 (2017).

(3) X. Deng, B. Xie and F. Xiao (査読有): A finite volume multi-moment method with boundary variation diminishing principle for Euler equation on three-dimensional hybrid unstructured grids, Computers and Fluids, 153, 85-101 (2017).

(4) Z. Y. Sun, F. Xiao (査読有): A Semi-Lagrangian Multi-Moment Finite Volume Method with 4th-order WENO Projection, Int. J. Numer. Method in Fluids, 83, 351-375 (2017).

(5) B. Xie and F. Xiao (査読有): Accurate and robust PISO algorithm on hybrid unstructured grids using the multimoment finite volume method, Numerical Heat Transfer, Part B, 71, 146-172 (2017).

(6) X. Deng, Z. Y. Sun, B. Xie, K. Yokoi, C. G. Chen and F. Xiao (査読有): A non-oscillatory multi-moment finite volume scheme with boundary gradient switching, J. Sci. Comput., 72, 1146-1168 (2017).

(7) P. Zhang, C. Yang, C. G. Chen, X. L. Li, X. S. Shen and F. Xiao (査読有): Development of a hybrid parallel MCV-based high-order global shallow-water model, J. Supercomput., 73, 2823-2842 (2017).

(8) B. Xie, X. Deng, Z. Y. Sun and F. Xiao (査読有): A hybrid pressure-density-based Mach uniform algorithm for 2D Euler equations on unstructured grids by using multi-moment finite volume method, J. Comput. Phys., 335, 637-663 (2017).

(9) B. Xie, P. Jin and F. Xiao (査読有): An unstructured-grid numerical model for interfacial multiphase fluids based on multi-moment finite volume formulation and THINC method, International Journal of Multiphase Flow, 89, 375-398 (2017).

(10) B. Xie and F. Xiao (査読有): A multi-moment constrained finite volume method on arbitrary unstructured grids for incompressible flows, J. Comput. Phys., 327, 747-778 (2016).

(11) Z. Y. Sun, S. Inaba, F. Xiao (査読有): Boundary Variation Diminishing (BVD) reconstruction: a new approach to improve Godunov scheme, J. Comput. Phys., 322, 309-325 (2016).

(12) P. Smolarkiewicz, J. Szmelter and F. Xiao (査読有): Simulation of all-scale atmospheric dynamics on unstructured mesh, J. Comput. Phys., 322, 267-287 (2016).

(13) A. Ikebata and F. Xiao (査読有): GPU-accelerated large-scale simulations of interfacial multiphase fluids for real-case applications, Computers and Fluids, 141, 235-249 (2016).

[学会発表] (計 27 件, うち国際会議 18 件)

(1) F. Xiao (invited talk): Consistent and efficient BVD reconstructions for interfacial multiphase compressible flows, Workshop on numerical and physical modelling in multiphase flows: a cross-fertilisation approach, Feb 1-2, 2018, Paris, France

(2) F. Xiao (thematic plenary lecture): A robust and efficient CFD model for interfacial multiphase flows on arbitrary unstructured grids, 6th International Conference on Computational Methods (ICCM2015), July 14-17, 2015, Auckland, New Zealand.

(他 25 件)

6. 研究組織

(1) 研究代表者

肖鋒 (XIAO Feng)
東京工業大学・工学院・教授
研究者番号: 50280912

(2) 研究分担者

功刀 資彰 (KUNUGI Tomoaki)
京都大学・工学研究科・教授
研究者番号: 40301832
高田 尚樹 (TAKADA Naoki)
産業技術総合研究所・研究員(チーム長)
研究者番号: 60357358

山下 晋 (YAMASHITA Susumu)
日本原子力研究開発機構・研究員
研究者番号: 80586272
伊井 仁志 (Ii Satoshi)
大阪大学・基礎工学研究科・助教
研究者番号: 50513016

(4) 研究協力者

謝 彬 (XIE Bin)
東京工業大学・工学院・特別研究員