

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 26 年 4 月 9 日現在

機関番号：13201

研究種目：基盤研究(C)

研究期間：2011～2013

課題番号：23560190

研究課題名(和文) 微視的挙動解析に基づく懸濁液の界面不安定の発生メカニズムの解明

研究課題名(英文) Microscopic investigation of Rayleigh-Taylor instability in a sedimenting suspension

研究代表者

瀬田 剛 (Seta, Takeshi)

富山大学・大学院理工学研究部(工学)・准教授

研究者番号：50308699

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 4,000,000円、(間接経費) 1,200,000円

研究成果の概要(和文)：懸濁液の沈降時に生じる界面不安定の発生メカニズムを、粒子と流体の微視的な挙動解析に基づく数値計算により解明することを目的とした。並列計算効率の高い格子ボルツマン法にGPGPU専用計算機を用いたことで、粒子分散系の計算が高速化された。ただし、本計算手法特有の固液界面近傍に発生する流速の滑りにより数値誤差が生じることが明らかになった。格子ボルツマン法の衝突則に適用させた二種類の緩和時間に対し、固液界面に発生する流速の滑りを除去するための関係式を解析的に導出し、更に、陰解法を用いることで、固液境界面への流体の漏れの問題も同時に解決できることを実証した。

研究成果の概要(英文)：We investigate Rayleigh-Taylor instability in a sedimenting suspension by the numerical calculation of the microscopic particle and fluid dynamics. Because of the availability of very fast and massively parallel machines of the lattice Boltzmann method combined with the immersed boundary method, the GPU accelerates particle-based mesoscale hydrodynamic simulations. When we use the immersed boundary-lattice Boltzmann method, we observe the boundary slips on the solid-liquid interface that cause the significant error in the computation of the suspension system. In order to solve the velocity slip problem, we apply two relaxation times collision operator to the lattice Boltzmann method, and demonstrate that our numerical method based on the implicit correction method with the two relaxation times succeeds in preventing the flow penetration through the solid surface as well as unphysical velocity slips.

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：懸濁液 格子ボルツマン法 埋め込み境界法

1. 研究開始当初の背景

(1) 流路内での懸濁液の浸透は、汚染物質の拡散、用廃水処理での沈降分離、多孔質媒体中での物質移動など多くの化学プロセス工業をはじめ自然現象で観察される現象である。濃度の高い懸濁液が液体の上に重なっているとき、重力の影響により、界面で Rayleigh-Taylor 不安定と同様の界面不安定が濃度界面に発生し、粒子全体がスラリーとして運動することが知られている。また、界面の finger 幅は、チャンネルの幅に依存することが、線形安定性解析に基づく理論および実験により明らかにされている。

(2) 格子ボルツマン法 (Lattice Boltzmann Method, LBM) は等間隔のデカルト座標上に配置された粒子速度分布関数の運動により NS 方程式が解析される。デカルト座標上に任意形状の境界を簡単に設定できる埋め込み境界法 (Immersed Boundary Method, IBM) を LBM に適用した IB-LBM の研究が、近年盛んに行われ、メッシュを再設定する必要はなく、高速に固気二相流を解析出来ることが示された。また、GPGPU を用い高速化された IB-LBM は、流路内での懸濁液の沈降時の濃度界面不安定における粒子および液体の微視的挙動解析に対し、有効な手法として期待されている。背景を以下にまとめる。

分散系の界面不安定に対する分散質と分散媒の詳細な挙動は不明である。

LBM は多孔質媒体に代表される狭小流路内の流動解析に有効である。

LBM に IBM を適用した IB-LBM は固気二相流解析に有効である。

LBM は GPGPU による並列計算に適している。

2. 研究の目的

懸濁液の沈降時に生じる界面不安定の発生メカニズムを、粒子と流体の微視的挙動解析に基づき解明することを目的とする。連続体モデルに基づく線形安定性理論から導出される理論解において濃度界面の支配波長がチャンネル幅に依存する原因を、実験では計測不可能な懸濁液内の微粒子および液体の挙動を詳細に解析出来る数値解析を用い明らかにする。数値計算手法として、流体計算に格子ボルツマン法を、微粒子計算に埋め込み境界法を用い、低消費電力で高速計算が可能な GPGPU 対応の HPC を採用し、低コストで高速な大規模固液混相流計算に対応したシステムをソフトウェアとハードウェアの両面で構築することも目指す。

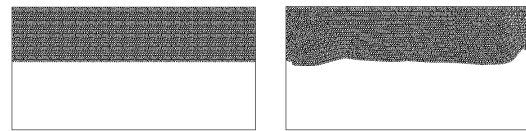
3. 研究の方法

埋め込み境界法を格子ボルツマン法に適用し、狭小流路内での懸濁液の沈降による濃度界面不安定を解析する。膨大な数の粒子数と計算グリッド数が必要になるため、並列効率の高い格子ボルツマン法を採用し、GPGPU による計算の高速化を図る。円柱周

り流れや移動球状粒子周りの流れなどのベンチマーク問題により、埋め込み境界法の格子ボルツマン法への適用性を検証する。IB-LBM の計算効率に対する GPGPU の適用性を検証した後、懸濁液のチャンネル内の沈降現象解析を行う。微粒子がクラスター化し、懸濁液として界面を形成し、finger が発達する際の粒子と流体の微視的挙動を数値実験により明らかにする。線形安定性解析から得られる界面変動の支配長に対する理論解と、計算から得られた finger 幅とを比較し、本計算手法の有効性を検証する。

4. 研究成果

(1) 並列効率の高い格子ボルツマン法に埋め込み境界法を適用することにより、GPGPU 専用計算機による、図 1 に示される懸濁液の沈降の計算の高速化に対する有効性を実証した。ただし、粒子数を増大させると、埋め込み境界法を適用した格子ボルツマン法 (IB-LBM) による計算では、図 1(b) に示される懸濁液の沈降時に生じる界面不安定は観測されるが、finger が十分に発達前に、数値的不安定性により計算が発散する問題が生じた。



(a) $t = 0.00001$ [s] (b) $t = 1.6021735$ [s]
図 1 GPGPU による懸濁液沈降の計算結果

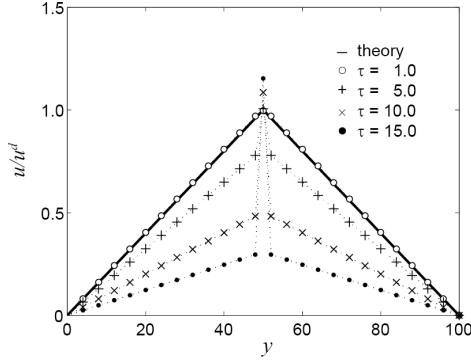
IB-LBM で生じる数値的不安定の原因に対し、粒子相互作用力の問題以外に、図 2 に示されるように、緩和時間 τ が増大した場合に発生する固液界面近傍における流速の歪も関係することが明らかになった。図 2(a) と (b) の比較から明らかのように、緩和時間 τ が大きい場合、IB-LBM では、図 2(b) に示されるような流速の歪が発生する。



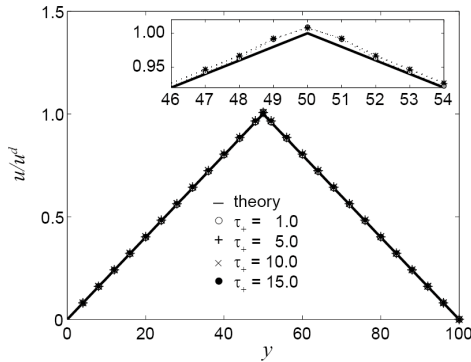
(a) $\tau = 1$ (b) $\tau = 5$
図 2 固液界面に発生する流速の歪

(2) 格子ボルツマン法の衝突則に二種類の緩和時間を用いることによって、図 2 に示される固液界面に発生する流速分布の歪が除去されることを、せん断流れの計算によって実証した。埋め込み境界法によって設定した二つの境界それぞれに、逆向きの速度を与えることで発生するせん断流れに対する速度分布を図 3 に示す。1 つの緩和時間を用いた衝突則を用いた SRT direct forcing method で

は、緩和時間が大きくなるにつれ、誤差が発生することが図 2 (a)から分かる。単一緩和時間近似衝突則 (Single Relaxation Time, SRT) では、流速の滑りが発生するが、二種類の緩和時間を用いる TRT 衝突則 (Two Relaxation Times, TRT) を適用した TRT implicit correction method では、流速の滑りを除去出来ることが図 3 (b)から分かる。



(a) SRT direct forcing method



(b) TRT implicit correction method

図 3 せん断流れの流速分布

(3)格子ボルツマン法の衝突則に適用させた二種類の緩和時間に対し、固液界面に発生する流速分布の歪を除去するための関係式を解析的に導出し、数値計算によって本手法の有効性を実証した。

固体境界に対する設定速度 u^d に対する、TRT implicit correction method の流速の滑り u^s 、流速の勾配 du/dy 、境界における流速 u の理論解は、それぞれ、

$$\frac{u^s}{u^d} = \frac{-\frac{7}{24} - \frac{\tau_+}{6} - \frac{\tau_-}{6} + \frac{\tau_+\tau_-}{3}}{h - \frac{13}{4} - \frac{\tau_+}{32} - \frac{\tau_-}{8} + \frac{\tau_+\tau_-}{4}}, \quad (1)$$

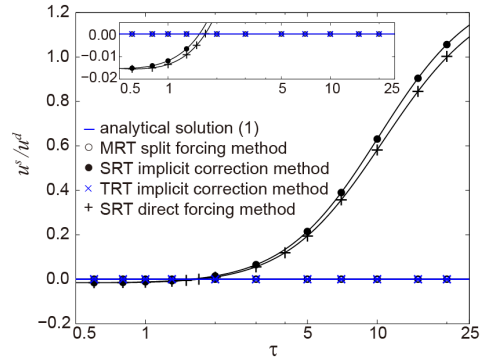
$$\frac{du}{dy} = \frac{h}{4}, \quad (2)$$

$$\frac{2u}{h\delta_x} = \frac{h}{4} - \frac{13}{32} - \frac{\tau_+}{8} - \frac{\tau_-}{8} + \frac{\tau_+\tau_-}{4},$$

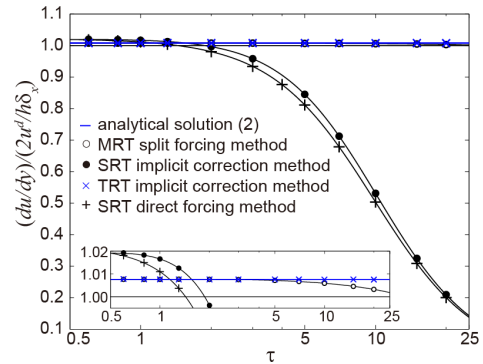
$$\frac{u}{u^d} = \frac{h}{4} - \frac{7}{24} - \frac{\tau_+}{6} - \frac{\tau_-}{6} + \frac{\tau_+\tau_-}{3}, \quad (3)$$

で与えられる。流速の滑りが発生しない条件

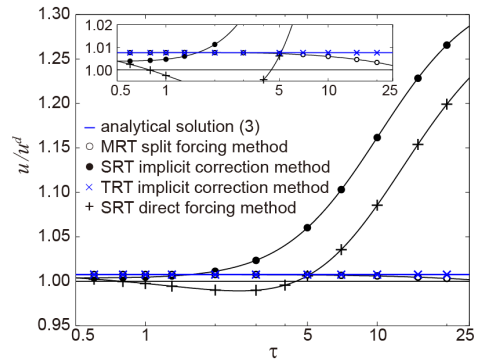
を満足するためには、式 (1) より $\tau_- = (4\tau_+ + 7)/(8\tau_+ - 4)$ が成立する必要がある。図 3(b)から得られた計算結果と、理論式(1) - (3)を図 4 に示す。図 4 には参考のため、Lu によって提案された MRT split forcing method の結果と単一緩和時間衝突則を用いた SRT implicit correction method の結果も示す。陰解法を用いる Implicit correction method に、TRT 衝突則を適用することにより、流速の滑りだけでなく、速度勾配と速度のずれに対する誤差も減少したことが図 4 から分かる。ただし、図 4(c)に示されるように、境界値 u と設定値 u^d とが一致しないという問題点が残された。



(a) Boundary slip velocity



(b) Velocity gradient



(c) Fluid velocity at boundary

図 4 理論解と解析解の比較

(4)図 4(c)に示された、境界値 u と設定値 u^d とが一致しないという問題について、内挿

関数として用いられているデルタ関数に対し、平滑化処理を排除すると、TRT implicit correction method の計算において、速度の滑りも発生せず、境界値 u と設定値 u^d とが一致することが判明した。図 4(c)で観察された境界値の誤差は、デカルト座標系上の外力とラグランジュ座標系上の外力との補間で用いられるデルタ関数の平滑化に原因であったことが解析的に証明された。これにより、二種類の緩和時間を用いる簡単な本手法は、既存の多数の緩和時間を用いる複雑な衝突則と等しい精度で、固液界面近傍に発生する流速分布の誤差を完全に取り除くことに成功した。

(5)レイノルズ数 $Re = 10, 20, 40$ における円柱周り流れの計算を本手法により行った。 $Re = 40, 20, 10$ に対し、それぞれ、緩和時間 τ を 1.25, 2.0, 3.5 に設定する。 $Re = 10$ に対する、半分の計算領域の流れ関数分布を図 5 に示す。図 5(a)から、SRT direct forcing method では、円柱表面への流れの漏れが発生することが分かる。図 5(b)に示されるように、MRT split forcing method では流れの漏れを減少させられるが、後流渦が十分に発達出来ていない。TRT implicit correction method では流れの滑りが除去され、図 5(c)で観察された流れ関数の歪みが除去されたことが、図 5(d)から分かる。TRT implicit correction method によって計算された抗力係数 C_D 、渦長さ L 、剥離点 θ_s を表 1 に示す。ここで、 D は円柱の直径である。本計算結果は、参照解と良い一致を示している。

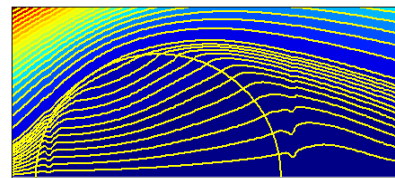
(6)埋め込み境界法を適用した格子ボルツマン法において境界条件と計算された流速とが一致しない問題に対し、陰解法を用いることで解決されることも理論的に証明した。陰解法を用いることで、固液境界面への流体の漏れの問題も同時に解決され、円柱周り流れの計算において、抵抗係数、渦長さ、剥離点について参照解と比較検証し、本手法の有効性を実証した。これにより、懸濁液を粒子と流体の微視的な挙動解析に基づく数値計算手法が確立され、GPGPU による高速化にも成功した。

表 1 抗力係数、渦長さ、剥離点の比較

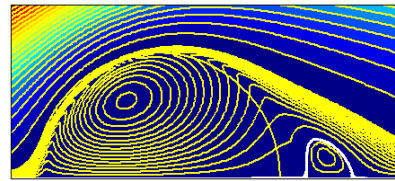
Re	References	C_D	$2L/D$	θ_s
40	FDM ⁽¹⁾	1.522	4.69	53.8
	LBM ⁽²⁾	1.499	4.490	52.84
	Present	1.568	4.640	50.38
20	FDM ⁽¹⁾	2.045	1.88	43.7
	LBM ⁽²⁾	2.152	1.842	42.96
	Present	2.104	1.900	40.78
10	FDM ⁽¹⁾	2.846	0.53	29.6
	LBM ⁽²⁾	3.170	0.474	26.89
	Present	2.920	0.520	26.36

FDM⁽¹⁾: S. C. R. Dennis and G. Z. Chang, J. Fluid Mech. 42, 471 (1970).

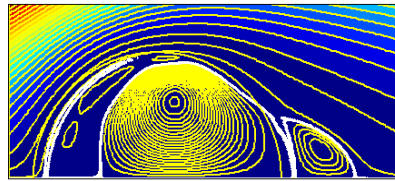
LBM⁽²⁾: X. He and G. Doolen, J. Comput. Phys. 134, 306 (1997).



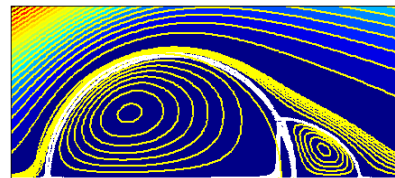
(a) SRT direct forcing method



(b) MRT split forcing method



(c) SRT implicit correction method



(d) TRT implicit correction method

図 5 円柱周り流れの計算結果 ($Re = 10$)

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 9件)

Takeshi Seta, Roberto Rojas, Kosuke Hayashi, and Akio Tomiyama, Implicit-correction-based immersed boundary-lattice Boltzmann method with two relaxation times, Physical Review E, 査読有り, Vol.89, 2014, 023307 [22 pages]

DOI: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevE.89.023307>

荒木志帆、吉田秀典、瀬田剛、亀裂形状が亀裂内浸透に及ぼす影響に関する数値解析的研究、日本数理工学論文集、査読有り、Vol.13, 2013, 31-36

<http://gspsun1.gee.kyoto-u.ac.jp/JASCOME/denshi-journal/13/JA136.pdf>

Roberto Rojas, Takeshi Seta, Kosuke Hayashi, and Akio Tomiyama, Immersed Boundary-Finite Difference Lattice Boltzmann Method Using Two Relaxation Times, Journal of Fluid Science and Technology, 査読有り, Vol. 8, No. 3, 2013, 262-276

DOI:10.1299/jfst.8.262

Takeshi Seta, Implicit temperature-correction-based immersed-boundary

thermal lattice-Boltzmann method for the simulation of natural convection, Physical Review E, 査読有り, Vol.87, 2013, 063304 [16 pages]
DOI:http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevE.87.063304

Roberto Rojas, Kosuke Hayashi, Takeshi Seta, and Akio Tomiyama, Numerical Simulation of Flows about a Stationary and a Free-Falling Cylinder Using Immersed Boundary-Finite Difference Lattice Boltzmann Method, The Journal of Computational Multiphase Flows 査読有り, Vol.5, No.1, 2013, 27-42

DOI:10.1260/1757-482X.5.1.27

瀬田剛、内田洋助、Roberto Rojas、林公祐、富山明男、Two-Relaxation-Time を用いた IB-LBM による熱流動解析、日本数理工学論文集、査読有り、Vol.12、2012、37-42

<http://gspsun1.gee.kyoto-u.ac.jp/JASCOME/denshi-journal/12/JA127.pdf>

Kosuke Hayashi, Roberto Rojas, Takeshi Seta, and Akio Tomiyama, Immersed Boundary-Lattice Boltzmann Method Using Two Relaxation Times, The Journal of Computational Multiphase Flows, 査読有り, Vol.4, No.2, 2012, 193-210

DOI:10.1260/1757-482X.4.2.193

Roberto Rojas, Takeshi Seta, Kosuke Hayashi, and Akio Tomiyama, Immersed Boundary-Finite Difference Lattice Boltzmann Method for Liquid-Solid Two-Phase Flows, Journal of Fluid Science and Technology, 査読有り, Vol.6, No.6, 2011, 1051-1064

DOI:10.1299/jfst.6.1051

金森拓哉、瀬田剛、Smoothed Profile Method を適用した Lattice Boltzmann Method による熱流動解析、日本数理工学論文集、査読有り、Vol.11、2011、35-40

<http://gspsun1.gee.kyoto-u.ac.jp/JASCOME/denshi-journal/11/JA117.pdf>

[学会発表](計19件)

中川由孝、山口暢春、瀬田剛、IB-LBM による多孔質体内の円柱周りの自然対流解析、日本機械学会北陸信越支部第51期総会・講演会、2014年3月8日、富山県立大学

荒木志帆、吉田秀典、瀬田剛、亀裂形状が亀裂内浸透に及ぼす影響に関する数値解析的研究、計算数理工学シンポジウム2013、2013年11月29日~2013年11月30日、洞爺観光ホテル

瀬田剛、ソース項を考慮した熱流動格子ボルツマン法に対する精度解析、日本混相流学会混相流シンポジウム2013、2013年8月9日~2013年8月11日、信州大

学長野キャンパス

山口暢春、山口銀河、奥村弘、瀬田剛、GPGPU による連立方程式の高速化、日本機械学会北陸信越学生会第42回学生員卒業研究発表講演会、2013年3月8日~2013年3月8日、福井大学

山口銀河、山口暢春、瀬田剛、埋め込み境界法を用いた multi-block 格子ボルツマン法、日本機械学会北陸信越学生会第42回学生員卒業研究発表講演会、2013年3月8日~2013年3月8日、福井大学

吉田秀典、村宮諒哉、荒木志帆、瀬田剛、格子ボルツマン法に基づく岩盤の亀裂内浸透解析、第13回岩の力学国内シンポジウム、併催：第6回日韓ジョイントシンポジウム (The 13th Japan Symposium on Rock Mechanics & The 6th Japan - Korea Joint Symposium)、2013年1月9日~2013年1月11日、沖縄コンベンションセンター

Takeshi Seta, Yosuke Uchida, Roberto Rojas, Kosuke Hayashi, and Akio Tomiyama, Numerical analysis of thermal-hydraulics by immersed boundary-lattice Boltzmann method using two-relaxation-time, ICOME/JASCOME 2012, December 12-14, 2012, Rakuyuu Kaikan, Kyoto University, Kyoto, Japan

Roberto Rojas, Takeshi Seta, Kosuke Hayashi, Akio Tomiyama, Immersed Boundary-Finite Difference Lattice Boltzmann Method Using Two Relaxation Times, Ninth International Conference on CFD in the Minerals and Process Industries CSIRO, December 10-12, 2012, Melbourne, Australia

瀬田剛、Roberto Rojas、林公祐、富山明男、Two-Relaxation-Time による IB-LBM の速度のすべりの除去、日本混相流学会年会講演会2012、2012年8月9日~2012年8月11日、東京大学柏キャンパス

Roberto Rojas, Takeshi Seta, Kosuke Hayashi, and Akio Tomiyama, Immersed boundary-finite difference lattice Boltzmann method using two-relaxation times, 日本混相流学会年会講演会2012、2012年8月9日~2012年8月11日、東京大学柏キャンパス

向井健二、瀬田剛、森口浩明、外山智也、内田洋助、金森拓哉、多緩和時間格子ボルツマンモデルによる異方性多孔質体内自然対流解析、第49回日本伝熱シンポジウム、2012年5月30日~2012年6月1日、富山国際会議場

内田洋助、外山智也、瀬田剛、埋め込み境界法を適用した格子ボルツマン法による円柱周りの熱流動解析、日本機械学会北陸信越支部第49期総会・講演会、2012年3月10日~2012年3月10日、金沢工

業大学

金森拓哉、森口浩明、瀬田剛、熱輸送を伴う移動境界流れ解析に対する Smoothed Profile Method の適用、日本機械学会北陸信越支部第 49 期総会・講演会、2012 年 3 月 10 日～2012 年 3 月 10 日、金沢工業大学

瀬田剛、Smoothed profile-lattice Boltzmann method による濡れ性を考慮した混相流の数値解析、第 25 回数値流体力学シンポジウム、2011 年 12 月 19 日～2011 年 12 月 21 日、大阪大学

金森拓哉、瀬田剛、Smoothed Profile Method を適用した Lattice Boltzmann Method による熱流動解析、計算数理工学シンポジウム 2011、2011 年 12 月 16 日～2011 年 12 月 16 日、香川大学

Takeshi Seta, Immersed Boundary-Thermal Lattice Boltzmann Method Based on the Implicit Correction Method for the Simulation of Natural Convection, The Third Asian Symposium on Computational Heat Transfer and Fluid Flow 2011, September 22-26, 2011, Kyoto, Japan

瀬田剛、Implicit Correction Method に基づく埋め込み境界法を適用した格子ボルツマン法による自然対流解析、第 47 回北陸流体力学研究会、2011 年 9 月 3 日～2011 年 9 月 3 日、金沢工業大学

瀬田剛、Implicit correction method に基づく埋め込み境界法を用いた熱流動格子ボルツマン法、日本混相流学会年会講演会 2011、2011 年 8 月 6 日～2011 年 8 月 8 日、京都工芸繊維大学

Takeshi Seta, Particulate Flow Simulation by the Immersed Boundary Lattice Boltzmann Method, ASME-JSME-KSME Joint fluids Engineering Conference 2011, July 24-29, 2011, ACT CITY Congress Center, Hamamatsu, Japan

〔図書〕(計 1 件)

川井昌之、瀬田剛、鈴木雄二、大須賀公一、丸善出版株式会社、JSME テキストシリーズ 機械工学のための数学、2013、248 (15-42)

〔産業財産権〕

出願状況 (計 0 件)

取得状況 (計 0 件)

〔その他〕

ホームページ等

<http://www3.u-toyama.ac.jp/seta/>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

瀬田 剛 (SETA, Takeshi)

富山大学・大学院理工学研究部 (工学)

・准教授

研究者番号 : 50308699