

jh180044-NAJ

圧力発展格子ボルツマン法による大規模気液二相流 GPU コードの開発ならびに多孔体浸潤液滴シミュレーション

金田昌之（大阪府立大学）

概要 本研究では①複雑構造境界条件にも耐えうる濡れ性境界条件アルゴリズムの開発 ②局所細密格子（AMR）を接触線を含む気液界面に導入する ③計算安定性に優れた三次元 27 速度モデルの開発を行うことで、液滴内部の移動現象をも含むマイクロスケール気液二相流から複雑構造内液滴の合一分離により形成されるマクロスケールの移動現象まで幅広く理解できる大規模解析手法の開発及び実証を目的としている。昨年度いっばいで①については完了し、接触角の再現性ならびに液滴相の体積保存について検証した。さらに③について、多孔体代表径と液滴径が同等の場合の解析を実施した。その結果、液滴浸潤には多孔体界面の濡れ性の閾値が存在することがわかった。この閾値は多孔体界面構造に依存することも確認された。さらに、液滴が浸潤せずに界面上で保持される場合、多孔体界面の構造に応じた濡れ広がりパターンが観察され、多孔体セルごとに濡れに関与することがわかった。

1. 共同研究に関する情報

(1) 共同研究を実施した拠点名

東京工業大学

(2) 共同研究分野

- 超大規模数値計算系応用分野
- 超大規模データ処理系応用分野
- 超大容量ネットワーク技術分野
- 超大規模情報システム関連研究分野

(3) 参加研究者の役割分担

金田昌之：研究総括

青木尊之：GPU チューニング

須賀一彦：気液二相流解析

桑田祐丞：多孔体構造作成・評価

杉本真：気液二相流解析

比嘉竜也：局所細密格子実装

長谷川雄太：カーネル作成

渡辺勢也：D3Q27 モデルの GPU 実装

瀬田剛：濡れ面境界条件構築

2. 研究の目的と意義

液滴が多孔体界面や内部に濡れ広がる現象は、土壌の雨滴、インクジェット（IJ）印刷やペーパークロマトグラフィーのように産業界から自然界でのナノスケールからマク

ロスケールにわたって見受けられる現象である。本現象には多孔体構造や固液の物性が絡み合う複雑な現象であり、上述の高性能化（例えば高精細 IJ 印刷やより少ない試料によるクロマトグラフィー）には多孔体界面・内部での現象理解が必須となる。

そのためには二相流数値解析が重要なツールとなり、複雑な多孔体構造を直接模擬できる格子ボルツマン法（LBM）とフェーズフィールド法を組み合わせた手法が発展してきた。本手法はポアソン方程式を解く必要が無いために大規模並列高速解析が可能な代わりに、高密度比解析に劣り、相の体積保存性が悪く、時間の進行に伴い水滴部が数値的に収縮するなどの問題を抱えている。また、表面張力を数値解析に導入すると、現実には生じない疑似流れ（spurious current）が生じるため、特に移動速度の遅い液滴の内部流れは誤って解釈されてしまう。

近年、上述手法を発展させた圧力発展 LBM が発表された。本手法は物性値を秩序変数と紐づけするため、従来手法と異なり収縮が起きにくく、疑似流れも無視できるほど小さい。

したがって密度や粘性を考慮しつつ LBM の利点を生かした高速解析が可能となる。しかしながら、平板上液滴のように固液界面の濡れ性を考慮したとたんに液相の体積変動が顕在化し、相の収縮が発生する。これが多孔体界面のように複雑な界面となるとその収縮はさらにひどくなり、実用に耐えない。これはとりわけ接触線付近での化学ポテンシャルや秩序変数の勾配計算精度が悪いためであり、当然ながら気液界面での格子解像度も体積変動に影響する。

本研究では、これらの問題を解決するために ①複雑構造境界条件にも耐えうる濡れ性境界条件アルゴリズムの開発 ②局所細密格子 (AMR) を接触線を含む気液界面に導入する ③計算安定性に優れた三次元 27 速度モデルの開発を行うことで、液滴内部の移動現象をも含むマイクロスケール気液二相流から複雑構造内液滴の合一分離により形成されるマクロスケールの移動現象までを幅広く理解できる大規模解析手法の開発及び実証を目的とする。

3. 当拠点公募型共同研究として実施した意義

LBM は各ノードにおける離散方向速度成分ごとに分布関数を持つため、とりわけメモリの使用量が多い。そのため大規模解析には複数 GPU を MPI で構成される TSUBAME は最適といえる。事実本解析では、大規模多孔体構造ならびにその上に配置した液滴の解析には単一 GPU ではとても対象領域をカバーできず、上述の構成により初めて液滴挙動の詳細が判明する。以上より、東工大 TSUBAME での共同研究は十分意義のあることといえる。

4. 前年度までに得られた研究成果の概要

本研究で開発するコードのプロトタイプであるフェーズフィールド LBM の評価を行い、固液界面の評価を実施した。また、本 LBM コードを用いて小規模構造多孔体内への液滴浸潤解析を行い、内部への進行特性を議論し

た。

5. 今年度の研究成果の詳細

・濡れ性アルゴリズムの改良・評価

固液界面において物理量の勾配が必要である。これを差分により算出するが、従来手法では一次精度であるために固液界面に起因する相体積の減少が確認されていた。そこで三次精度まで考慮した境界条件に変更して精度検証したところ、相体積保存性が向上した。また、接触角再現性においても良好であった。

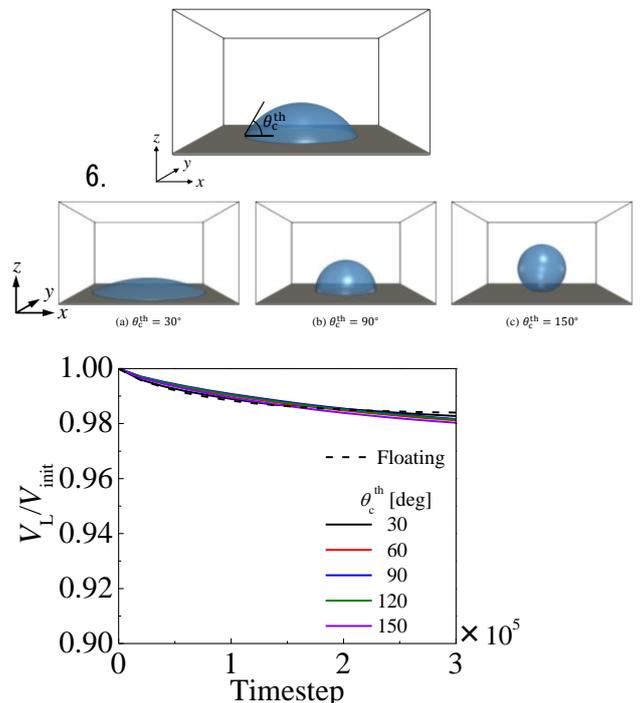


図 1：各種濡れ性における平板上三次元液滴の形状ならびに相体積の継時変化。接触角の依存性が小さく、浮遊液滴の場合と比しても変化がないことから、濡れ面での保存性が向上したことがわかる。

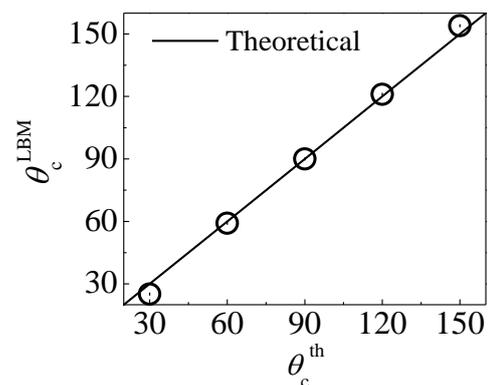


図 2：基板上液滴の接触角再現性。横軸がパラメータとして与えた接触角。親水壁から撥水壁までの接触角を良好に再現できていることがわかる。

・多孔体構造の作成

既往の研究では、発泡多孔体を BCC セルで模擬する手法が主流であった。その後の研究により、より実際の発泡多孔体に近い Kelvin セルや Weaire-Phelan 構造が提唱された。本研究では Kelvin セルを配置するアルゴリズムを開発し、多層構造を計算ドメイン上に構築することができた。

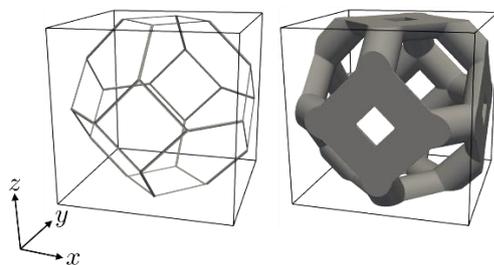


図 3：Kelvin セルの骨組み構造と、それを肉付けすることで表現できるユニットセル。ここではリガメントを円柱で表現しているが、三角柱で表現することも可能である。

・多孔体上の液滴挙動

上述の Kelvin 多孔体上に液滴を滴下した際の挙動について大規模解析を実施した。解析系を図 4 に示す。

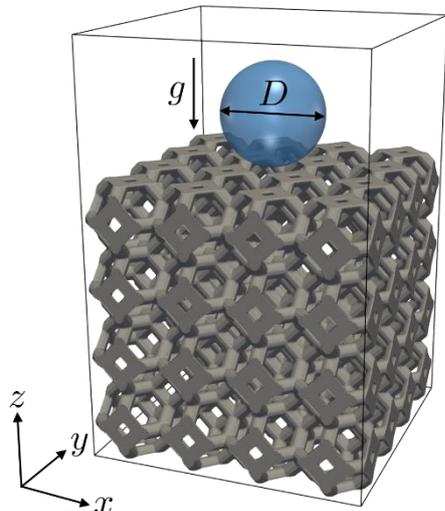
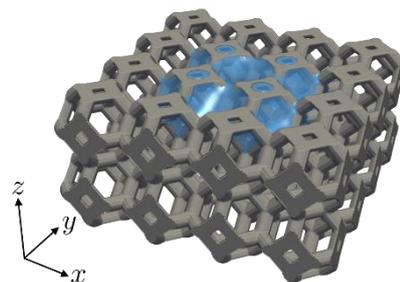


図 4：多孔体構造とその直上に配置した液滴

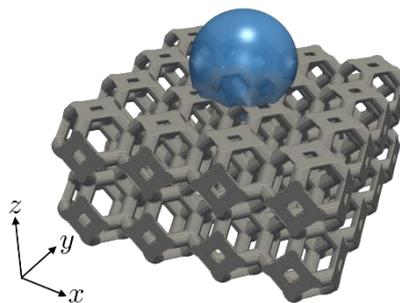
の一例。解析条件として、多孔体の濡れ性、多孔体界面の位相、液滴体積を中心に解析した。多孔体の空隙率についても調査したが、計算が発散しやすいため、ここでは割愛する。

・多孔体接触角の影響

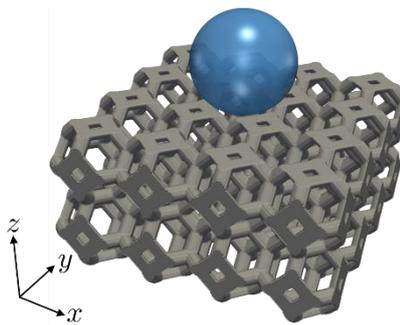
各種濡れ性で解析を行った結果を図 5 に示す。図に示すように、液滴の浸透が多孔体の濡れ性に依存することを確認した。特に、浸潤接触角に閾値が存在することがわかった。



(a) $\theta_c^{\text{th}} = 30^\circ$.



(b) $\theta_c^{\text{th}} = 90^\circ$.



(c) $\theta_c^{\text{th}} = 150^\circ$.

図 5：多孔体上の液滴。接触角に応じて浸潤挙動が異なる。また、界面での液滴の濡れ広がりには表面構造に依存する。

接触角と液滴浸潤体積の関係を図 6 に示す。接触角の閾値が 60-90°の間に存在することが

わかった. さらにここでは, 接触角界面の構造の影響を調査するために, 図 7 に示す界面相における各計算結果も追加してある.

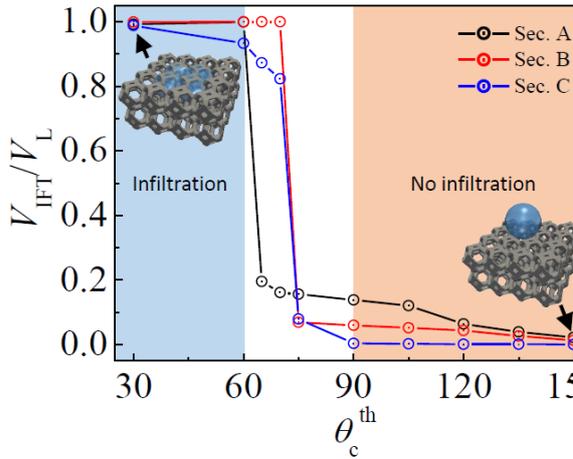


図 6 : 多孔体接触角と液滴浸潤体積の関係. 縦軸が 1.0 の場合, 液滴は完全に浸潤している. 接触角が閾値を超えると液滴は多孔体界面で保持される.

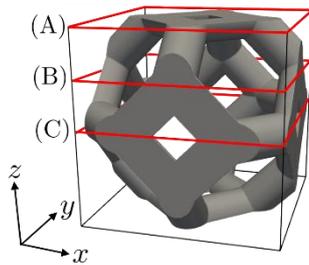


図 7 : 多孔体界面相

図 6 により, 界面の相による依存性は小さいことがわかる. 空隙率の影響に関しては, 解析が不安定になるなどの問題が生じたため, さらなる検討が必要であることがわかった.

・撥液多孔体上の液滴の濡れ広がり

多孔体が撥液性を有する場合, すなわち図 6 の θ が概ね 90° 以上の場合, 液滴は多孔体界面にトラップされ多孔体界面を挟んだ領域に存在する. 浸潤せずに多孔体界面より上に存在する液滴形状は多孔体構造に依存するため, 界面上で観察される接触角は多孔体そのものの接触角とは異なる.

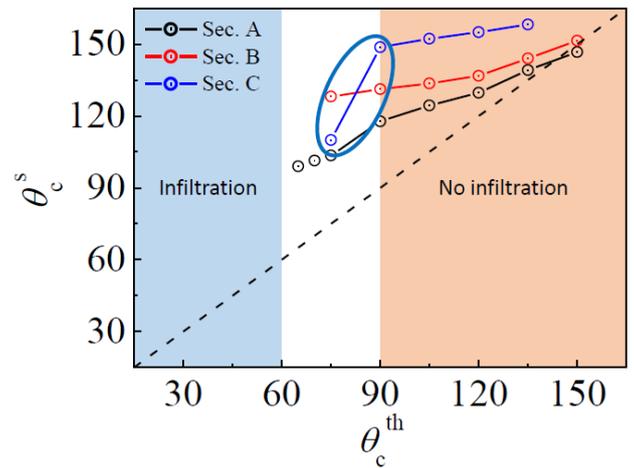


図 8 : 界面上液滴の見かけの接触角. 撥水性が高くなるにつれて平板上の接触角に遷移していく. 換言すれば, 比較的接触角が低い場合は多孔体構造による疑似的な撥水性を有することができるがわかる. 青線で囲っている箇所では見かけの接触角が急激に変化している.

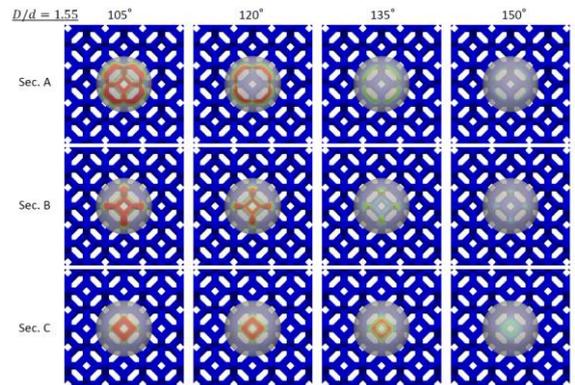


図 9 : 多孔体が撥液の場合において, 液滴を支持する濡れの範囲. 界面構造が異なるため濡れる範囲も異なる. 図 8 で示す急激な接触角の変化はこの濡れ面の構造に依存することがわかった.

・液滴体積を大きくした場合

比較検証用として液滴直径を倍にした場合の計算も実施した. 最も大きな違いとして, 液滴の浸潤が複数セルに及ぶため, 図 6 や図 8 にみられる傾向が段階的となることがわかった.

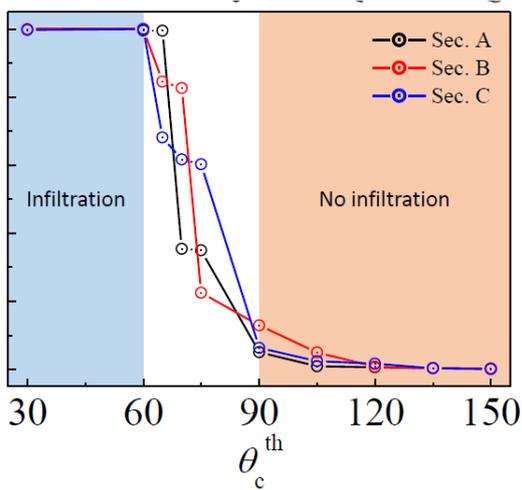


図 10: 液滴直径を倍にした場合の浸潤比. 閾値付近で段階的になっていることがわかる.

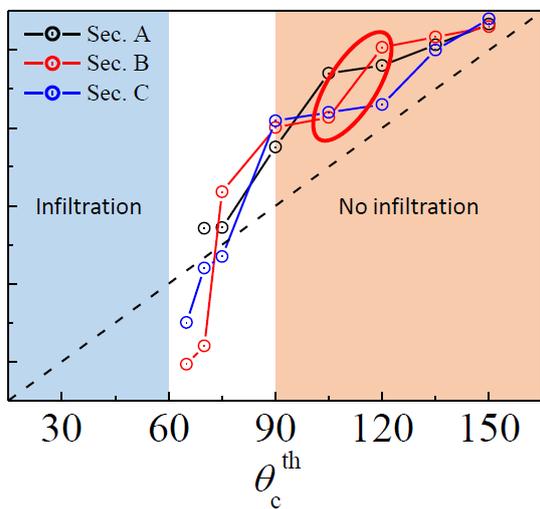


図 11: 液滴直径が倍の場合の見かけの接触角. こちらも段階的に変化する. さらに, 接触角 60° 付近では多孔体構造が親液性を誘起することがわかった.

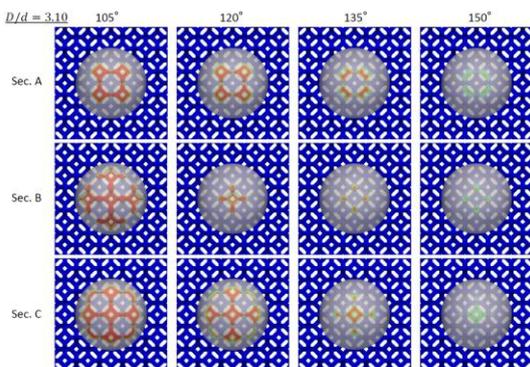


図 12: 大きい液滴での界面での濡れ面. 複数の多孔体セルにわたっているため, 界面構造

と濡れの関連性を掘り下げる必要がある.

・ AMR の取り組み

境界適合格子については「データの一次元配列化」および「粗格子の情報と細密格子の情報のやり取り」までは完了し, 単純な单相流において十分な精度を担保したまま高速に解析できることを確認した. 現状の二相流プログラム (2 次元版) にも組み入れられたが, 3 次元プログラムには実装できなかった. またアダプティブ化も必要である.

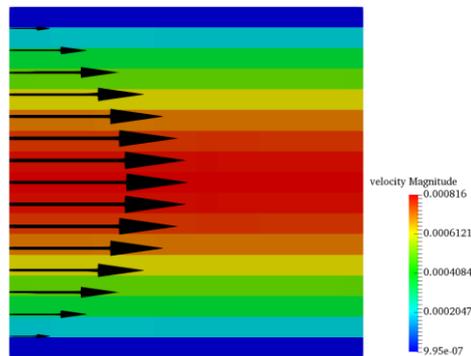


図 13: 二次元チャンネル流れの局所細密格子化した. 上下壁近傍に細密格子を配置し, データの一次元配列化を行った. 格子間隔の境目でも速度分布がスムーズになっていることがわかる.

6. 今年度の進捗状況と今後の展望

AMR に関すること以外は, 概ね順調に進展したといえる. 多孔体への液滴の滴下を解析するためには大規模多孔体構造が必要であり, 単一の液滴挙動から丁寧に解析する必要がある. 今後は複数液滴の挙動も含めて同様に解析を行い, 合一・分離を伴うマクロスケールの挙動までも明らかにする予定である. 複数液滴を配置するにはさらに大規模な解析領域が必要であることから, 今後は計算資源の消費量が増える見込みである. 本研究のように, 液滴の浸潤はかならずしもマクロ的な拡散として評価できるわけではないことがわかったので, 今後はその現象解釈について展開する予定である.

7. 研究成果リスト

(1) 学術論文

なし

(2) 国際会議プロシーディングス

M. Sugimoto, T. Higa, M. Kaneda, K. Suga, Numerical Simulation of Droplet on Porous Media by the Conservative Allen-Cahn Based Phase-Field LBM, Proc. International Symposium on Transport Phenomena (Honolulu, USA, Oct., 2018).

(3) 国際会議発表

M. Sugimoto, T. Higa, M. Kaneda, K. Suga, Numerical Simulation of Droplet on Porous Media by the Conservative Allen-Cahn Based Phase-Field LBM, Proc. International Symposium on Transport Phenomena, Oct., 2018.

M. Sugimoto, Numerical Simulation of a Droplet on a Porous Wall, The 2nd Joint Symposium on Advanced Mechanical Science & Technology (JSAMST-2) , (Sakai, Japan, November, 2018)

(4) 国内会議発表

杉本 真, 比嘉 竜也, 金田 昌之, 須賀 一彦, 圧力発展格子ボルツマン法による基板上液滴の数値解析, 第 31 回計算力学講演会 (2018 年 11 月, 徳島)

杉本 真, 金田 昌之, 須賀 一彦, 圧力発展格子ボルツマン法による多孔体表面の液滴挙動解析 (2018 年 12 月, 東京)

杉本 真, 金田 昌之, 須賀 一彦, 格子ボルツマン法による多孔体界面の液滴挙動解析, 日本機械学会関西支部第 94 期定時総会講演会 (2019 年 3 月, 滋賀)

(5) その他 (特許, プレス発表, 著書等)

なし