

jh190032-NAH

## 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

継続課題として取り組んだ本課題において、昨年度開発したシミュレーションコードを改良した。まず、複雑構造の二相流シミュレーションにおいて課題となっていた、接触線の非物理的滴挙動ならびに相体積の現象の原因を突き止め、これを解決した。これは、格子ボルツマン法で物理構造を表現する際の階段状近似に起因する、物理界面法線方向の不連続的な配列が接触線の表面張力分布に影響を及ぼしていることがわかった。そこでレベルセット関数を利用した物理形状捕獲を応用することで、なめらかな分布にすることで解決できた。以上より、三次元構造二相流 LBM においてもなめらかな物理形状を表現し、高精度に解析するための補間アルゴリズムを開発できた。さらに、気液界面で生じる熱マランゴニ効果ならびに蒸発に伴う液滴収縮の実装に取り組んだ。その結果、液滴接触角に応じた蒸発速度分布を適切に再現することができ、さらに気相中の溶媒濃度分布も解析できるツールを開発した。液滴収縮をとまなう蒸発過程と温度分布に起因する液滴内部循環流を再現できた。

### 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

多孔体界面や内部で液滴が輸送する現象は、マイクロチャネルでの反応・インクジェット (IJ) 液滴の着弾後の挙動・凝縮器や粒子充填層内の液水挙動・土壌の液水浸透・燃料電池 GDL の液水排出・オイルミストトラップなど幅広く見受けられる。例えば IJ 液滴は液滴内部の移動現象が成膜形状の支配因子となるため、紙面印刷のみならず 3D プリンタや画素作製でも重要である。大量に配置・滴下された液滴は合一・分離・変形を伴いながら、多孔体性状および液体の物性に依存しつつ移動する。また工場内エアコンなどに用いられるオイルミストフィルターは発泡多孔体界面上でオイル滴をトラップし、繰り返し利用できることで省資源化に貢献している。このような現象は液滴内部の物質移動から複数液滴の挙動までを詳細に把握する必要があり、そのためには固気液それぞれの性状 (構造、濡れ性、密度比、粘性比、表面張力の温度・物質依存性など) を正確に考慮する

必要があるのは言うまでもない。それらが予測できれば、例えば薬品の高品質化・印刷における高精細化・反応器の性能向上といった技術発展にまで資することができる。

そのためには、格子解像度に影響を受けないレベルでの固液界面アルゴリズムの開発・検証、および複数の液滴と多孔体による大規模数値解析、および解析高速化手法が必要であり、マイクロ～マクロスケールの気液二相現象を総合的に解釈できるようになる点で、大規模解析から得られる学術的な意義もあると考える。

多孔体界面ならびに内部で液滴が関与する工業製品を概観すると、オイルミスト捕集機やインクジェット印刷、ヒートパイプのウィック内の液滴・液膜生成、固体高分子形燃料電池のガス拡散層内の液水排出、エマルジョンからの油水分離などが挙げられ、そのいずれもミリメートルオーダーかそれ以下の現象に分類される。これらにおいて要求される性能は様々であるが、いずれも液滴の挙動が性能を左右するため、その把握が求められる。液滴の挙動は連続相と分散相の物性ならびに分散相が接する固相（多孔体）の濡れ性や構造由来の物性（空隙率、透過率）が大きく影響するため、これらを含めた総合的な現象理解が求められる。さらに、支配パラメータが多いことから、数値解析によるアプローチが有効となる。ここで液滴と多孔体の代表径について考慮する必要がある。たとえば発泡金属多孔体の孔径は 0.2 mm～1.5 mm と多岐にわたる。また微小液滴の場合、多孔体構造が液滴挙動に直接影響を及ぼすと考えられる。したがって、多孔体構造を直接考慮できる二相流解析ツールの開発とそれをを用いた液滴の浸潤現象に関する検討が必要となる。これらを満足するためには、複雑構造の作成が容易で、二相流解析も適用できる格子ボルツマン法に (LBM) よる手法が効果的であることがわかる。そこで昨年度課題において多孔

体浸潤液滴の解析を実施し、接触角の閾値の存在を明らかにした。しかしながら、これまでの研究から、相体積の保存性（時間の進行に従って液滴体積が変化）や複雑構造での二相流解析（構造が格子線に沿わない場合に非物理的な液滴挙動が生じる）に問題を抱えていることがわかった。

さらに、上述のデバイスやプロセスには相変化に伴う液滴内の熱物質移動を伴うものが多い。IJ 成膜では溶質の輸送が薄膜形状に影響を及ぼすことがわかっているし、燃料電池などでは温度依存の表面張力が液滴挙動に影響を及ぼすことが予想される。そしてこれらは蒸発に伴う溶媒の分布までも関連する。したがって、液滴内外の熱物質輸送を包括的に解析できるツールも必要となる。

以上の背景から上述の要求を満たすツールが開発できれば産業機械の数値解析による二相流挙動の予測が可能になり、高精度の現象観察と装置設計が可能となる。そこで複雑構造の二相流解析が高精度に可能となるツールの開発を引き続き実施し、さらに液滴内外の移動現象解析手法も実装した。

### 3. 当拠点公募型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。特に本研究では 1 ノード当たり 27 の速度成分を持つ分布関数を 2 種類使用した。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

・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。

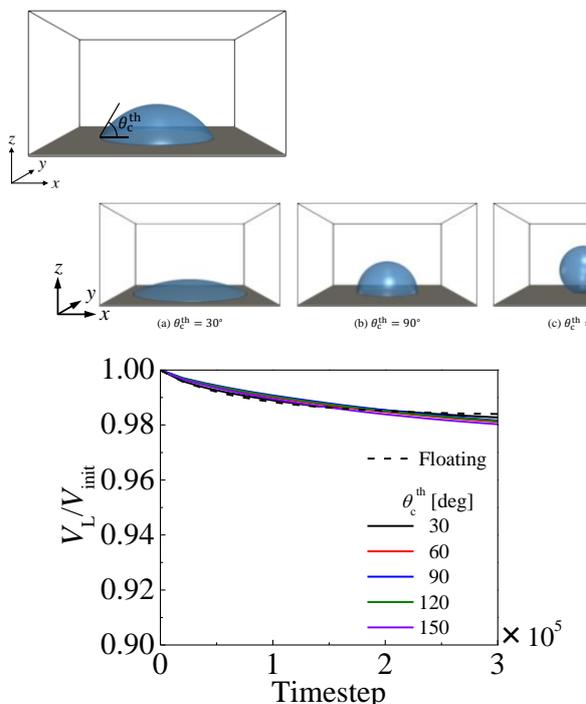


図 1：各種濡れ性における平板上三次元液滴の形状ならびに相体積の継時変化。接触角の依存性が小さく、浮遊液滴の場合と比しても変化がないことから、濡れ面での保存性が向上したことがわかる。

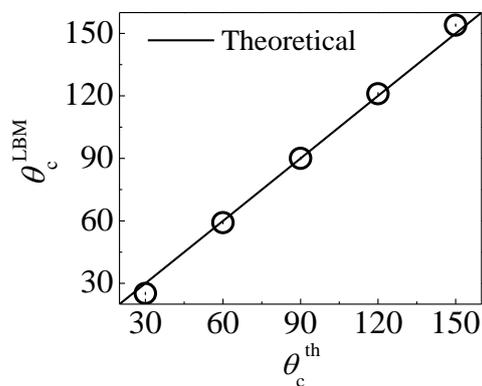


図 2：基板上液滴の接触角再現性。横軸がパラメータとして与えた接触角。親水壁から撥水壁までの接触角を良好に再現できていることがわかる。

・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。

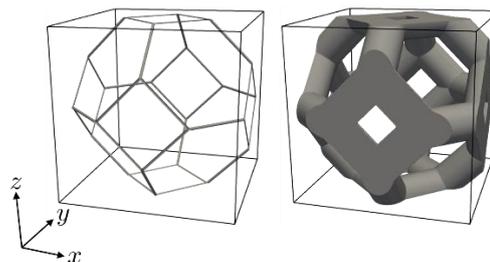


図 3：Kelvin セルの骨組み構造と、それを肉付けすることで表現できるユニットセル。ここではリガメントを円柱で表現しているが、三角柱で表現することも可能である。

・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。

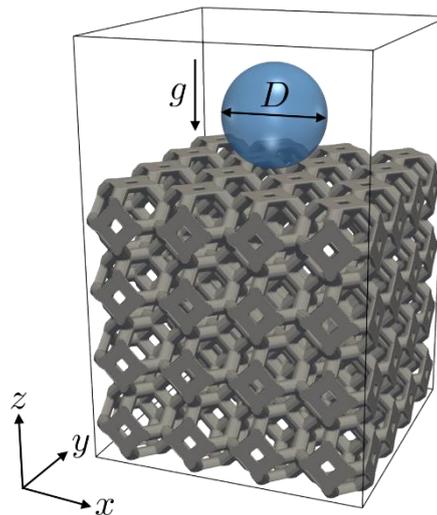
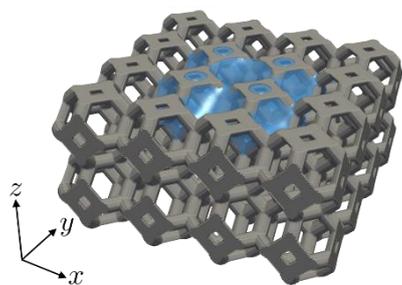


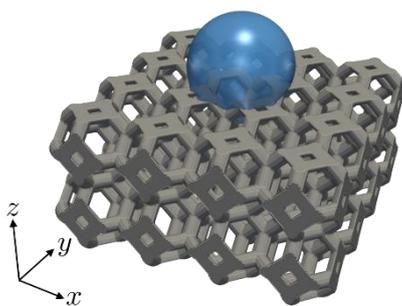
図 4：多孔体構造とその直情に配置した液滴の一例。解析条件として、多孔体の濡れ性、多孔体界面の位相、液滴体積を中心に解析した。多孔体の空隙率についても調査したが、計算が発散しやすいため、ここでは割愛する。

・多孔体接触角の影響

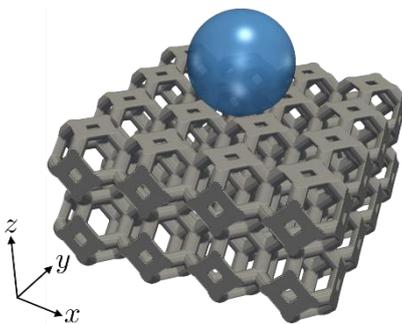
各種濡れ性で解析を行った結果を図5に示す。図に示すように、液滴の浸透が多孔体の濡れ性に依存することを確認した。特に、浸潤接触角に閾値が存在することがわかった。



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



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



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

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°の間が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。

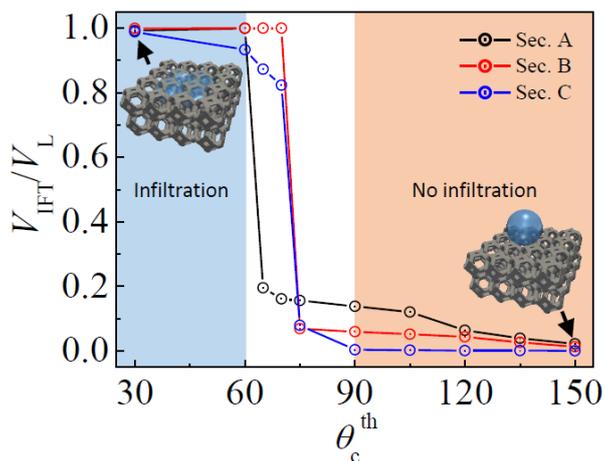


図6：多孔体接触角と液滴浸潤体積の関係。縦軸が1.0の場合、液滴は完全に浸潤している。接触角が閾値を超えると液滴は多孔体界面で保持される。

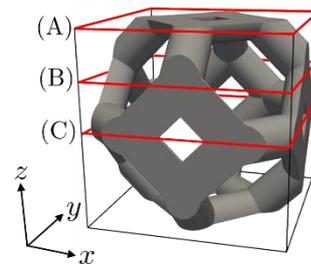


図7：多孔体界面相

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 $\theta$ 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。

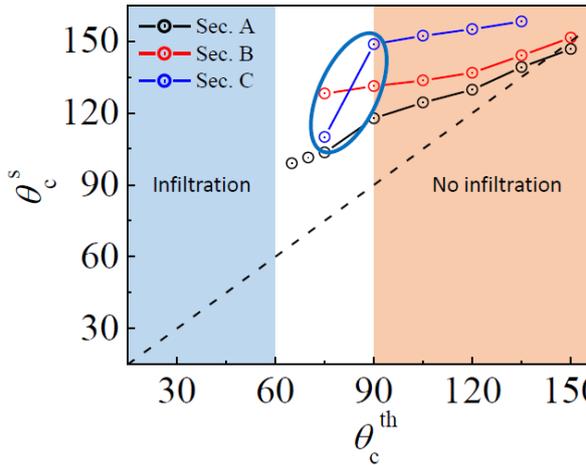


図 8：界面上液滴の見かけの接触角。撥水性が高くなるにつれて平板上の接触角に遷移していく。換言すれば、比較的接触角が低い場合は多孔体構造による疑似的な撥水性を有することができる事がわかる。青線で囲っている箇所では見かけの接触角が急激に変化している。

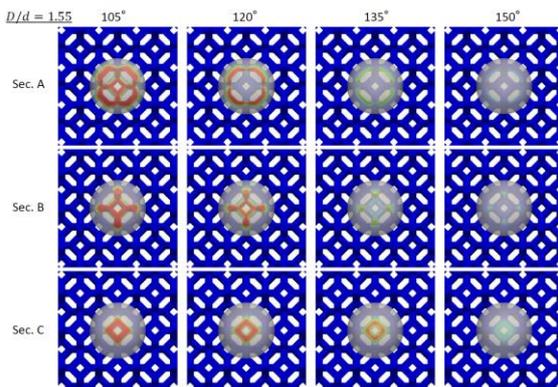


図 9：多孔体が撥液の場合において、液滴を支持する濡れの範囲。界面構造が異なるため濡れる範囲も異なる。図 8 で示す急激な接触角の変化はこの濡れ面の構造に依存することがわかった。

・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。

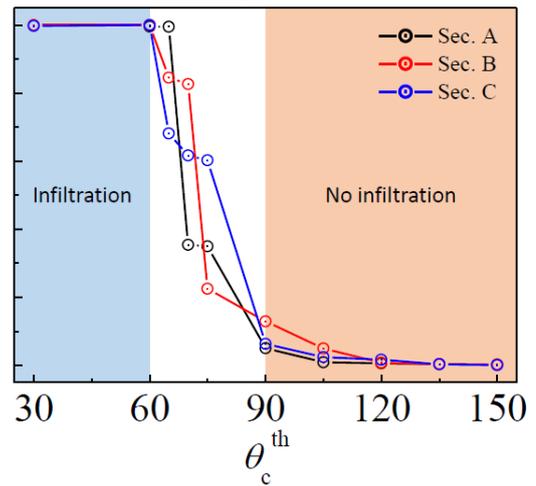


図 10：液滴直径を倍にした場合の浸潤比。閾値付近で段階的になっていることがわかる。

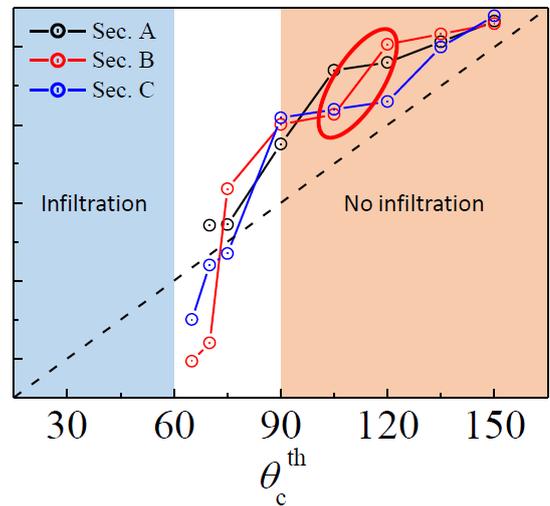


図 11：液滴直径が倍の場合の見かけの接触角。こちらも段階的に変化する。さらに、接触角 60° 付近では多孔体構造が親液性を誘起することがわかった。

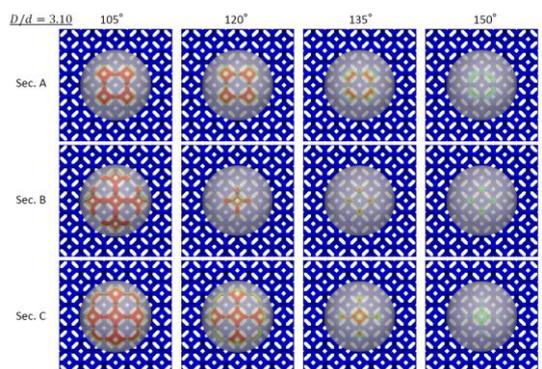


図 12：大きい液滴での界面での濡れ面。複数の多孔体セルにわたっているため、界面構造

と濡れに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、単純な単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。

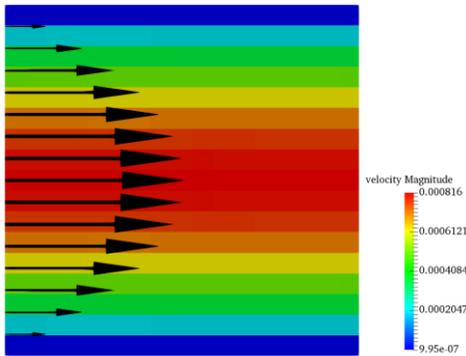


図 13: 二次元チャンネル流れの局所細密格子化した。上下壁近傍に細密格子を配置し、データの一次元配列化を行った。格子間隔の境目でも速度分布がスムーズになっていることがわかる。

5. 今年度の研究成果の詳細

・三次元 IPBB アルゴリズムの開発

任意の固相表面において濡れ性を再現するためには、固相表面法線方向の秩序変数勾配を境界条件として適切に与える必要がある。しかしながら、従来の Half-way bounce-back (HWBB) スキームによって固相を表現した場合では、図 1(a)に示す実際の固相表面が図 1(b)に示すような計算格子に沿った凹凸面として近似されるため、固相表面の適切な位置や法線ベクトルを規定することが困難であった。そこで、本研究では固相表面からの符号付き距離関数である Level set 関数 (Osher and Sethian, 1988) ならびに Interpolated bounce-back (IPBB) スキーム

(Bouzidi et al., 2001) を用いて表現した任意曲面上の濡れ性境界条件 (Fakhari and Bolster, 2017) を三次元解析に拡張した。

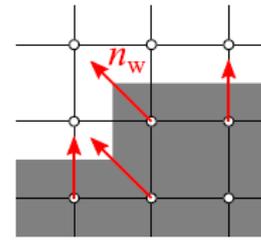


図 14 従来型の HWBB の場合の壁面法線ベクトル

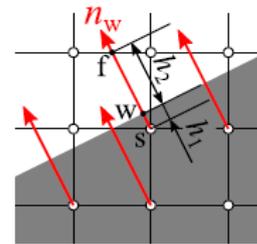


図 15 レベルセット関数を用いて壁面を平滑化してから算出した壁面法線ベクトル

秩序変数の境界条件に関する箇所では上記の手法を採用し、一方流体解析に用いる境界条件は HWBB にすることで、相体積の保存性を維持したまま、複雑構造の濡れ性を表現できる。このとき点  $f$  は格子点上に存在しないため、点  $f$  の秩序変数を求めるためには周囲の流体ノードの秩序変数から補間する必要がある。二次元解析では幾何形状から容易に求められるが、三次元解析においては平面による内挿補間が必要となる。そこで本研究ではセルの頂点で構成される三角形 (つまり各頂点が各座標軸方向に二格子以上離れていない三角形) による補間を採用した。また、この条件を満足する三角形が複数存在する場合には、三角形平面と固相表面法線ベクトルとの交点が三角形の図心に最も近いものを選択した。その結果、複雑構造に与えた既定の濡れ性に対して適切な接触線の移動が確認できた。以下に一例を示す。無重力場で球の上

に配置した液滴は、球の濡れ性（接触角）に応じて接触線位置が規定される。これを旧来の手法と、今回開発した手法で比較したところ、図中の理論接触線位置（白線）に対して改良手法の青色の線がほぼ同じ位置に来ることが確認できた。三次元界面で濡れを精確に表現するためには大変重要なアルゴリズムを開発、実装できた。

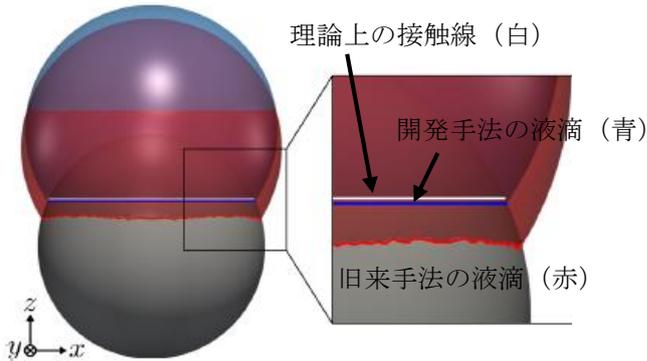
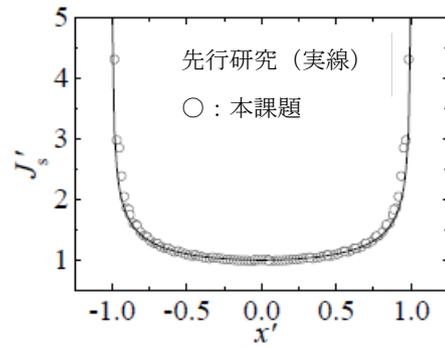
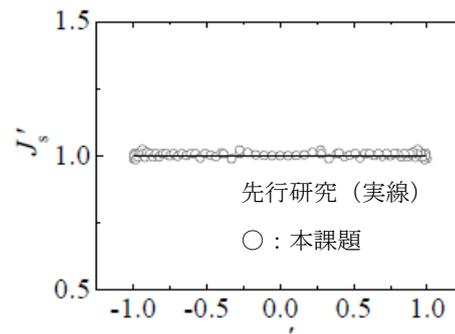


図 16 球上に静止する液滴解析

・液滴蒸発と熱マランゴニ効果の実装  
 秩序変数の輸送方程式に相変化に伴う付加項を考慮し、気液界面での蒸発フラックスを境界条件とした気相中の溶媒輸送方程式を追加することで、液滴の蒸発を実装した。さらに、系全体の熱輸送方程式を追加し、気液界面での温度差に依存する表面張力項を流動解析の LBM に組み入れることで、マランゴニ対流を考慮できる解析ツールへと発展させた。既往の研究から、気液界面での液滴蒸発速度は接触角に依存することが知られており、二次元解析系ではハイブリッド型の LBM（秩序変数の輸送方程式は LBM とは異なる手法で解析）での先行研究もあったが、全ての式を LBM で離散化すると蒸発速度分布を過大に評価するなどの問題が指摘されていた。本研究ではその問題点を解決し、これまで開発してきた二相流 LBM と組み合わせた。その結果、文献値と良好に一致する蒸発速度分布を得ることができた。



(a) 接触角 30°



(b) 接触角 90°

図 17 平板上液滴における気液界面蒸発速度分布.

液滴内外の温度分布ならびに気液界面の相変化に起因するマランゴニ対流についても、下図の通り妥当な結果を得ることができた。

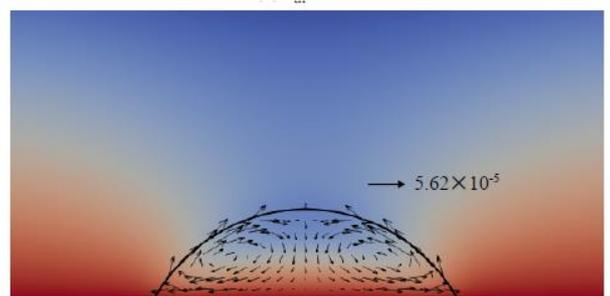


図 18 温度分布ならびに液滴内のマランゴニ対流

## 6. 今年度の進捗状況と今後の展望 進捗状況

- ・複雑物理境界上における二相系格子ボルツマン法の解析精度向上  
 球面や格子線に沿わない平板など、数値誤差

を誘発しやすい物理境界面において、固気液三相の交線である接触線の適切な挙動を表現できるツールを三次元解析に実装できたことは有意義である。また、今回開発したツールで昨年度に得た結果を再度検証したところ、大きな差異はなかったため、昨年度実績には影響を及ぼさないことも確認した。発泡多孔体のような形状ではあまり顕在化しなかったことが原因と考えられる。

・種々の多孔体での定量的解析

上述の問題解決に主眼を置いたため、燃料電池 GDL 等の二相流解析は実施しなかった。

・液滴蒸発ならびに熱マランゴニ効果の実装  
当初熱マランゴニのみを予定していたが、液滴蒸発と気相中の溶媒濃度分布予測まで可能となった点で、大きな進展があった。既に三次元化も完了している。

今後の展望

複雑形状に柔軟に対応できる二相流 LBM ツールが開発でき、さらに温度場とそれに依存する表面張力も解析できることから、熱交換を行う機器の冷却プロセスに応用できると考える。

三次元曲面上の濡れ性境界条件の改良、  
日本機械学会関西支部第 95 期定時総会  
講演会 2020.

(5) その他(特許, プレスリリース, 著書等)  
なし

## 7. 研究業績一覧(発表予定も含む)

### (1) 学術論文(査読あり)

杉本真, 金田昌之, 須賀一彦, ‘Phase-field LBM による等方多孔体への微小液滴浸潤数値解析’, 日本機械学会論文集 (86), p20-00014, 2020

(2) 国際会議プロシーディングス(査読あり) Makoto Sugimoto, Masayuki Kaneda, Kazuhiko Suga, Development of Two-Phase Lattice Boltzmann Method on Smoothed Surfaces, Proceeding of The 2<sup>nd</sup> Pacific Rim Thermal Engineering Conference, PRTEC-24118, 2019.

(3) 国際会議発表(査読なし) なし

(4) 国内会議発表(査読なし) 杉本真, 金田昌之, 須賀一彦, 二相系 LBM における