

論文の内容の要旨

論文題目 攪拌槽解析のための数値計算手法の開発

氏名 松永 拓也

ラグランジュ的記述に基づく離散化を利用した数値計算手法である粒子法は、複雑な境界変化を伴う物理現象の解析に適した計算技術として様々な分野から注目を集めている。粒子法は、流れに追従して移動するラグランジュ的な粒子を計算点として定義するため、計算領域が動的に変化する問題すなわち移動境界問題に適するという性質をもっている。粒子法が得意とする問題の代表例としては、自由表面変形を伴う流れや移動固体壁面を含む問題が挙げられるが、これらは特に化学工学分野において多く見られる体系である。化学反応装置として広く利用されている攪拌槽はその一例であり、攪拌槽内で起こる現象を予測するための数値解析技術を確立することは大きな意義をもつものである。そこで、本研究では攪拌槽において重要な混合および流動の現象に着目し、粒子法を用いた攪拌槽解析を実現するため (1) 流体混合解析、(2) 複雑形状固体壁境界表現、(3) 計算高速化 という3つの大きなテーマについて研究を行った。

1 流体混合解析

格子法は有限体積法、有限差分法等に代表されるような、メッシュを用いた離散化に基づく計算手法である。格子法の長所としては、高い数値安定性と、商用ソフトに採用されていることから利用し易いという点が挙げられるが、数値拡散が発生することが短所となる。粒子法は移動境界問題に適しており、数値拡散が発生しにくいという性質をもっている。短所としては、流れの解析において数値安定性に劣ることが挙げられる。そこで、本研究では、格子法と粒子法を組み合わせることにより両者の利点を活かした高 Péclet 数流体混合に適したハイブリッド型計算手法の開発を行った。

本提案手法は、流れの解法に格子法を、濃度の解法に粒子法を使用するハイブリッド型の計算手法である。長所として、大きな時間ステップで安定に計算できること、濃度場の数値拡散が発生しにくく高 Péclet 数に適すること、格子と粒子に対して異なる解像度を適用することで高 Schmidt 数

に対応できること、が挙げられる。

流れの解法においては、有限体積法を使用する。濃度の解析では、移流拡散方程式 (支配方程式) を移流方程式と拡散方程式に分離して取り扱う。移流方程式は粒子移動に関する式であり、ホイーン法を用いて数値積分を実施する。このとき粒子速度は移動最小二乗法を用いて格子から内挿するものとする。拡散方程式に現れるラプラシアン演算子は、テイラー展開と重み付き最小二乗法に基づく standard LSMPS scheme type-A を用いて離散化を行う。数値安定性を確保するために、particle shifting に基づいて粒子分布の均一化補正を行うものとする。

基礎検証として1次元非定常拡散問題の解析を行い、理論値との比較を行った。本手法はランダム粒子な粒子配置を用いた場合も解析解と良く一致し、ラプラシアン離散化スキームの高い精度を確認することができた。続いて、 $Re = 1$ 、 $10^2 \leq Pe \leq 10^6$ におけるジグザグ流路内混合を解析し、有限体積法および、数値拡散の発生しない Monte Carlo 法の結果と比較を行った。得られた混合強度の結果を比較した。有限体積法を用いた場合には、 $Pe \leq 10^4$ において数値拡散の発生により混合強度を過大評価する。一方、本手法では高 Péclet 数においても Monte Carlo 法との間に大きな相違は見られなかった。

以上の結果から、本ハイブリッド型計算手法は数値拡散が極めて小さく、高 Péclet 数の流体混合問題を妥当に評価可能な手法であることが確認された。

2 複雑形状固体壁境界表現

攪拌槽内の流動は一般にインペラーの回転によって駆動されるが、このような移動固体壁を伴う流れは粒子法に適した問題である。しかしながら、粒子法における複雑形状の固体壁境界の取り扱いに課題がある。これまでに、様々な手法が考案されており、代表的なものを上げれば、壁粒子を用いる方法、ポリゴンモデルを用いる方法、ミラー粒子を用いる方法などがある。しかしながら、これら既存の手法は、任意形状を取り扱うことができない。

本研究では、複雑形状に対して適用可能なミラー粒子境界表現の開発を行った。本提案手法は、ミラー粒子を用いる手法であるが、凸ポリゴンの集合として表される任意の境界形状に対して同一のアルゴリズムを用いて計算することができる。ポリゴンは面要素、線要素、点要素に分割して考えるものとし、面要素には、それぞれ1つの法線方向ベクトルが定義される。従って、境界の両側を考慮する場合は、表面と裏面に対して異なる面要素を割り当てる必要がある。また、本ミラー粒子境界表現では、視線判定を導入する。視線判定はミラー粒子生成と近傍粒子選択に使用される。

境界要素から視線の通る全ての流体粒子に対して、ミラー粒子を生成する。ミラー粒子の位置は、面要素の場合は面対称位置、線要素の場合は線対称位置、点要素の場合は点对称位置に決定する。ここで、面要素のミラー粒子に対して、視線の通る面要素がある場合には、ミラー粒子のミラー粒子を生成する。ただし、3つ以上の異なる要素を介するミラー粒子生成は行わないものとする。

着目流体粒子から視線の通る粒子のみを近傍粒子として採用する。このように近傍粒子計算に視線判定を加えることで、過剰に存在するミラー粒子の一部と、相互作用すべきでない流体粒子を除去し、適切に境界条件を適用できる。

基礎検証として、静水圧問題の解析を行った。MPS 法において広く使用されている壁粒子を用いた固体壁境界表現による解析結果と静水圧分布を比較したところ、およそ定量的な一致が確認できた。更に、LSMPS 法に本境界表現を適用し、平行平板間流れ、および、物体後流にできる流れの解析を行った。その結果、平行平板間流れは理論値と、物体後流の流れは有限体積法の結果と一致した。

MPS法に本ミラー境界表現を適用し、攪拌槽内部流動の解析を行った。インペラ形状は、6枚翼の Rushton impeller とし、水槽には4つのバツフルを等間隔に配置した。攪拌槽およびインペラの境界形状を154個のポリゴンを用いて表現し、 $Re = 1$ における流れを約20万の粒子を用いて解析した。本計算結果を実験値と比較したところ、良好な一致が見られた。

以上の数値検証の結果から、複雑形状においても適切に固体壁境界を評価できることが示された。

3 計算高速化

化学工学において攪拌槽を用いて扱う流体は高粘性のことが多い。高粘性流れの解析では、着目現象の時間スケールに対して速度場の拡散時間スケールが極めて小さく、着目現象に合わせた時間ステップで計算を安定に実行するためには速度の陰的解法が必要になる。更に、非圧縮性流体解析においては圧力も陰的に扱われる。速度と圧力を解くための大規模連立一次方程式の解法のコストはシミュレーション全体の大部分を占めるものであり、線形ソルバーの高速化が求められている。そこで、代数的マルチグリッド法の導入を検討した。

粒子法におけるラプラシアンを離散化スキームは、多くの参照点を必要とする。従って、速度および圧力に関する方程式を離散化して得られる係数行列は非ゼロ要素を多くもつため、コースグリッド生成の自由度が大きく、安定した計算アルゴリズムが必要である。その一方で、計算点である粒子は時間の進行と共に移動し、係数行列は大きく変化する。そのため、毎時刻異なる係数行列に対してコースグリッドを計算し直さなければならず、なるべく小さな計算コストでコースグリッドを構築することが要求される。そこで、セットアップにかかる計算コストが比較的小さい plain aggregation-AMG 法 (PA-AMG) のアルゴリズムを適用する。Aggregates の計算アルゴリズムには、安定した coarsening ratio が得られる double pairwise aggregation を採用し、マルチグリッドサイクル法には K-cycle を用いる。本研究では、メインソルバーに BiCGSTAB 法を、前処理に本 PA-AMG 法を適用した解法を用いた計算の高速化の検討を行う。

基礎検証として、2次元ポアソン方程式をランダムな粒子配置で MPS ラプラシアンモデルを用いて離散化し、得られる連立一次方程式に対して性能検証を行った。求解にかかる時間を前処理なし BiCGSTAB 法と比較した結果、前処理なし BiCGSTAB 法による計算時間はおよそ問題サイズ n に対して $n^{1.5}$ に、PA-AMG 前処理付き BiCGSTAB 法では n^1 に比例する傾向が見られた。また、 $n < 10^4$ では前処理なし BiCGSTAB 法の方が高速であるが、 $n > 10^4$ では PA-AMG 前処理付き BiCGSTAB 法がより高速であるという結果を得た。なお、 $n > 10^6$ では前処理なし BiCGSTAB 法の10倍以上の速度が得られた。

続いて、2次元ダムブレイク問題を MPS 法を用いて解析し、圧力ポアソン方程式の解法に本解法を適用することで、実問題に対する有効性の検証を行った。シミュレーションに要する全体の計算時間の比較したところ、検証を行った粒子数範囲 ($> 7 \times 10^3$) では総じて PA-AMG 前処理付き BiCGSTAB 法の方が前処理なしの場合に比べ高速であった。また、特筆すべき点として、全体の計算時間に対する圧力ポアソン方程式解法が占める割合は粒子数が大きな問題に対してもおよそ一定に保たれる結果となった。

以上の結果、本解法はポアソン方程式の解法において高い計算速度を有し、圧力の解法に適用することで計算実行時間を大きく短縮できることを示した。