

「相変化を伴う3次元気液二相流解析プログラムの研究開発」 ～科学技術振興機構A-STEP採択課題の成果～

技術第4部 杉中 隆史

2014年6月10日（火）
アドバンスソフト株式会社

1

内容

1. A-STEP(研究成果最適展開支援プログラム)
2. A-STEPシーズ顕在化タイプの開発の背景
 - 2.1 開発するソフトウェアの利用分野
 - 2.2 開発するソフトウェアの波及効果
 - 2.3 解析対象とする気液二相流挙動の例
 - 2.4 市販ソフトの問題点
3. A-STEPシーズ顕在化タイプにおける開発目的
4. A-STEPシーズ顕在化タイプにおける開発内容
 - 4.1 乱流挙動の予測精度の向上
 - 4.2 気泡径分布の変化の取り扱い
 - 4.3 気泡合体のソースタームの取り扱い
 - 4.4 3次元構成方程式、計算時間の短縮化、計算安定性の調査
5. A-STEP実用化挑戦ステージの提案
 - 5.1 目標
 - 5.2 開発するソフトウェアの内容

2

1. A-STEP(研究成果最適展開支援プログラム)

科学技術振興機構(略称JST)は、イノベーションの創造を推進します。知の創出から研究成果の社会還元とその基盤整備を担うわが国の中核的機関です。

A-STEPは、JSTによる研究成果最適展開支援プログラムで、社会経済や科学技術の発展、国民生活の向上に寄与するため、大学や公的研究機関等の優れた研究成果の実用化を通じた、イノベーションの効率的・効果的創出を目的とした技術移転事業です。(引用元: <http://www.jst.go.jp/a-step/>)



引用元: <http://www.jst.go.jp/a-step/outline/index.html>

2. A-STEPシーズ顕在化タイプの開発の背景

2.1 A-STEPシーズ顕在化タイプ(平成25年度の採択課題)

- ・「相変化を伴う3次元気液二相流解析プログラムの研究開発」
- ・実施期間 平成25年9月～平成26年8月(実施中)

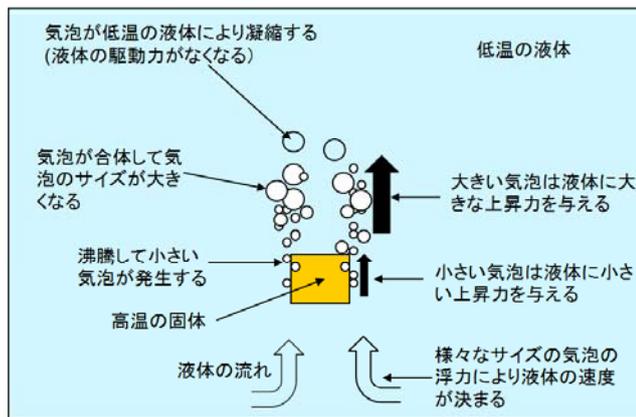
2.2 開発するソフトウェアの利用分野

- ・発電システム、熱交換器、熱処理(焼入れ)、冷熱機器、環境技術、燃料電池、輸送機器、化学装置、水資源管理など気液二相流を伴う幅広い分野で利用できる。

2.3 開発するソフトウェアの波及効果

- ・機器の研究開発や設計の高度化
- ・機器の高品質化
- ・開発期間の短縮
- ・コストダウン
- ・国際競争力の強化
- ・エネルギー利用の高効率化
- ・CO₂の削減に貢献

2.4 解析対象とする気液二相流挙動の例



相変化を伴う気液二相流の例 (焼入れ過程)

- 液体の過熱が進むと、気泡核をもとに蒸気泡の成長が始まる。
- 気泡の成長に伴って浮力が増大し、これが表面張力による付着力を越えたときに、小さい気泡が過熱面から離脱する。離脱する気泡径は条件により異なる。
- 膜沸騰→遷移沸騰→核沸騰 と沸騰形態が替わる温度(最小安全膜沸騰温度と限界熱流束温度)や各沸騰域での壁面熱伝達率は条件により異なる。
- 液体の種類により、膜沸騰は物体のエッジで蒸気膜が振動しながら崩壊する。
- 気泡は合体して大きくなると、浮力が大きくなり、液体を大きく駆動させる。
- 気泡の浮力によって押し上げられる液体は、鉛直方向の乱流強度が卓越する。
- 気泡が存在しない液体単相領域の乱流挙動の予測精度を上げる。

5

2.5 市販ソフトの問題点

市販ソフトが産業界で活用できていないのは、以下の①から⑤の課題が解決されていないためと考えられる。

- ①乱流挙動の予測精度が低い。
- ②気泡径分布の変化が適切に取り扱えない。
- ③相変化を伴う場合に適切な3次元の構成方程式が実装されていない。
- ④計算時間が莫大である。
- ⑤計算が破綻しやすい。

6

3. A-STEPシーズ顕在化タイプにおける開発目的

・気泡流を対象として

- ①乱流挙動の予測精度が低い。
- ②気泡径分布の変化が適切に取り扱えない。

という課題をAdvance/FrontFlow/MPを使用して改善する。

・伝熱面から生成される気泡の大きさに着目した実験を重点的に実施する。

・次の③から⑤の課題を解決する方法を調査・検討する。

- ③相変化を伴う場合に適切な3次元の構成方程式が実装されていない。
- ④計算時間が莫大である。
- ⑤計算が破綻しやすい。



4. A-STEPシーズ顕在化タイプにおける開発内容

4.1 乱流挙動の予測精度の向上

乱流の予測精度を上げるために考慮すべき現象

- ・気泡は合体して大きくなると、浮力が大きくなり、液体を大きく駆動させる。
- ・気泡の浮力によって押し上げられる液体は、鉛直方向の乱流強度が卓越する。
- ・気泡が存在しない液体単相領域の乱流挙動。



Advance/FrontFlow/MPに、ラージ・エディ・シミュレーション
(ダイナミックSGSと標準Smagorinsky)を実装して、
ラージ・エディ・シミュレーションの適用を検討する。



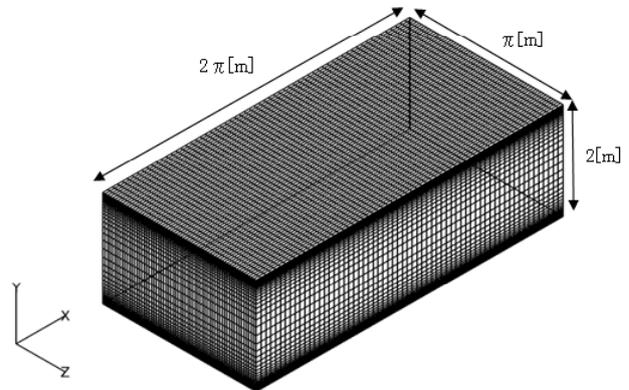
ダイナミックSGSモデルの検証

(1)概要

Advance/FrontFlow/MPに実装したダイナミックSGSモデルを検証するために、二流体モデルで1相と2相の物性値を同じにして平行平板間乱流の計算を実施

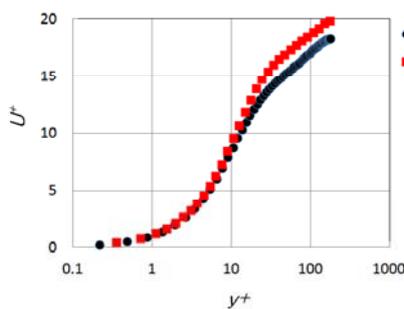
(2)計算条件

- ・壁面間距離: 2 [m]
- ・主流方向距離: 2π [m]
- ・スパン方向距離: π [m]
- ・摩擦レイノルズ数: 180(外力で設定)
- ・レイノルズ数: 5600程度
- ・壁面の境界条件: no-slip条件
- ・主流方向の境界条件: 周期条件
- ・スパン方向の境界条件: 周期条件
- ・節点数: 246,078
- ・要素数: 258,048
- ・乱流モデル: ダイナミックSGSモデルによるラージ・エディ・シミュレーション
- ・時間刻み: 0.001秒で一定
- ・時間積分法: クランク・ニコルソン法
- ・対流項の離散化スキーム: 中心差分

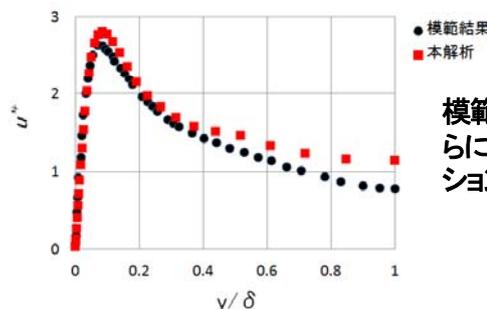


解析領域と計算格子

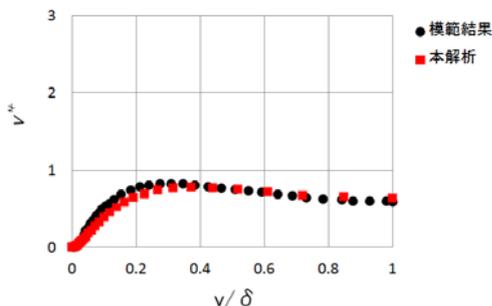
(3)Kim,Moin&Moser(1987)らによるダイレクトシミュレーションの計算結果(*)との比較



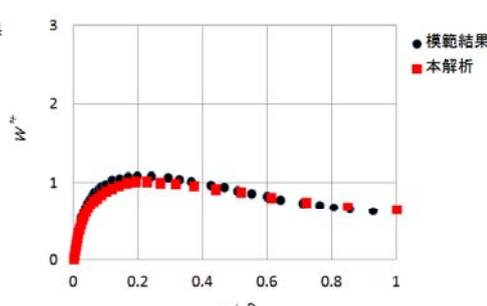
主流方向平均速度



主流方向変動速度のrms



壁面方向変動速度のrms



スパン方向変動速度のrms

模範結果はKim,Moin&Moserらによるダイレクトシミュレーションの計算結果を表す。

(*)参考文献: Kim,Moin&Moser, 'Turbulence statics in fully developed channel', J.Fluid Mech,177(1987)133.

A-STEPシースズ顕在化タイプの開発では、気液間相互作用に関する Subgrid Scale モデリングを考慮しないで、以下の計算で比較する。

- ・ラージ・エディ・シミュレーション(ダイナミックSGS)
- ・ラージ・エディ・シミュレーション(標準Smagorinskyモデル)
- ・k- ϵ モデル
- ・乱流モデルなし

気液間相互作用に関するSubgrid Scaleモデリングの取り扱いに関する課題(A-STEP実用化挑戦ステージでの開発を提案)

単相流

- (1)乱れエネルギーは、カスケード機構により、低波数(大きい渦)から高波数(小さい渦)へ伝達する。
- (2)その伝達は乱流エネルギー散逸率 ϵ に支配され、高波数で(分子)粘性係数によって粘性散逸する。
- (3)上記を考慮した乱流統計理論などからSubgrid Scaleモデルは確立していると思われる。

気泡流

- (1)気泡径が大きくなるにつれて浮力が大きくなり、液体を大きく誘起する。誘起された液体の流動は長波長の流動に成長する逆エネルギーカスケード機構が存在することが知られている。また、気泡径が小さくなるにつれて浮力が小さくなり、気泡は液体に追従するだけになり、液体の乱れエネルギーを減衰させることが考えられる。
- (2)気泡近傍の伴流の影響。
- (3)気泡界面の変形と変動の影響。
- (4)上記の(1)から(3)は、気泡の分布に応じて、離散的に乱れエネルギーを発生させたり吸収させたりする。
- (5)二流体モデルでは気相を連続相として扱うため、格子サイズを、乱れの最小サイズであるコルモゴロフスケールや気泡径や気泡間距離より大きくすることが望ましいが、その範囲を越えた時の影響。
- (6)上記の考慮できる実用的なSubgrid Scaleモデリングを開発する。

4.2 気泡径分布の変化の取り扱い

Advance/FrontFlow/MPに導入されている「気泡合体を考慮したポピュレーション・バランス・モデルによる気泡群解析モデル」を相変化に適用できるように改良する。

ポピュレーションバランスモデルを解いて、各気泡グループの分布を求める



計算格子毎に、各気泡グループの界面積を合計して気相の界面積を求める



計算格子毎に、気相と界面間の熱伝達量を求める



計算格子毎に、相変化速度とエネルギー方程式のソース項を求める

4.3 気泡合体のソースタームの取り扱い

気泡合体のソースタームを表現するためには

- ①乱流運動による衝突頻度
 - ②気泡間に挟まれた液膜が臨界厚さに達するまで2つの気泡が接触している割合
- に対するモデルが必要。



乱流エネルギーの散逸率 ε がキーとなる。



ラージ・エディ・シミュレーションでは、乱流エネルギーの散逸率を直接求めることができないため、以下のモデルの研究開発を進めている。

- ①標準Smagorinskyモデル、または、ダイナミックSGSモデルで求められる乱流エネルギーとSGS渦粘性係数から乱流エネルギーの散逸率を算出するモデル
- ②ラージ・エディ・シミュレーションの考え方に基づいて、格子サイズと気泡径サイズを考慮するモデル

Prince&Blanch⁽¹⁾は、乱流運動による衝突頻度を

- ①気泡の個数濃度 n_i
- ②衝突面積 S_{ij}
- ③気泡の変動速度 u_j

の関数として次のように表現している。

$$\theta_{ij}^T = n_i n_j S_{ij} (\overline{u_j^2} + \overline{u_j^2})^{1/2}$$

この式に

- ①気泡の変動速度は、気泡径サイズと同程度の液体の変動速度に等しい。
- ②液体の小さい渦運動は、気泡の運動に影響を与えるだけのエネルギーを持たず気泡は、液体の大きい渦運動だけで輸送される。
- ③慣性小領域にある液体の渦運動は、等方性乱流とする。

という仮定を加えて、乱流エネルギーの散逸率を使ってモデル化を行っている。
本研究では、ラージ・エディ・シミュレーションに適用できるように元の式で定式化を検討している。

また、層流の速度ひずみによる衝突頻度で使用する平均速度の勾配の計算方法もラージ・エディ・シミュレーションで得られた瞬時速度を平均してモデルを構築することも検討している。



4.4 3次元構成方程式、計算時間の短縮化、計算安定性の調査

- ・沸騰などの相変化を伴う場合の3次元構成方程式については、大川富雄研究室でのこれまでの研究成果を中心に3次元構成方程式に適用する方法を検討する。
- ・特に伝熱面から生成される気泡の大きさに着目した実験を重点的に実施する。発表論文を以下に示す。

宮野直樹, 大川富雄, 杉中隆史、沸騰気泡の伝熱面離脱挙動の実験的
解明、関東学生会第53回学生員 卒業研究発表講演会、講演番号
1402 (2014.3).

宮野直樹, 大川富雄, 杉中隆史、サブクールプール沸騰における蒸気泡
挙動の実験観察、日本原子力学会春の年会、講演番号L27(2014.3).

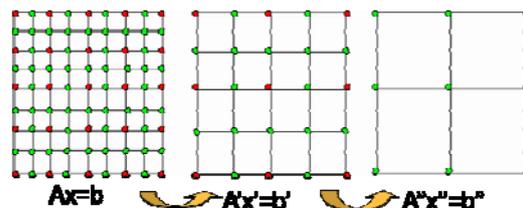


- ・本研究開発で開発するAdvance/FrontFlow/MPのベースコードである Advance/FrontFlow/redにアドバンスソフト株式会社の実装した計算時間の高速化とロバスト性向上の手法と、大川富雄研究室での気液二相流の解析技術に関するこれまでの研究成果から、計算時間の高速化とロバスト性向上のための検討を行う。また、最近の計算高速化技術を調査する。いくつかの例を以下に示す。

AMG(代数的マルチグリッド)法

AMG法は離散化方程式を解く際に、本来の格子を間引いた仮想格子を作成して、仮想格子系と本来の格子系を交互に計算して、全体の計算速度を速くする方法。以下にAMGの特長を示す。

- ・AMG法が機能する問題に対して、未知数の数をNとすると計算量は $O(N)$ 。
- ・格子数に比例して並列数を増やせば、ほぼ一定時間で収束する。



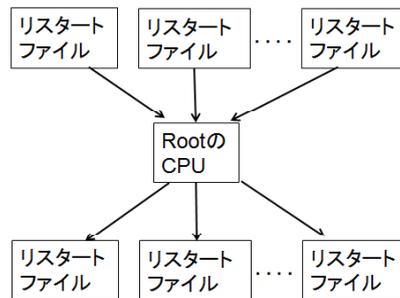
AMGの計算方法

AMG法は市販のソフトにも導入されている機能であり、Advance/FrontFlow/MPにも導入する。

リスタート計算で並列数を変える機能

並列数を変えたリスタート計算機能を作成して、空いているCPUを有効活用することにより計算を高速化する。

1度rootのCPUに全てのリスタートファイルの情報を読み込んでから次の全てのCPUにbroadcastするとメモリを大量に使用するため、複数回の反復により、リスタートファイルの情報を部分的に読みながらbroadcastして、ローカル変数への割り当て終了したら配列をdeallocateする方法でメモリ使用量を削減する。



リスタート計算で並列数を変える手法

前処理で壁面までの距離計算方法の改良

前処理において、空間から最も近い壁面までの距離を計算する手法は、現状では全てのControl Volume に対して、全ての壁要素との距離を計算し最短距離を計算している。

以下の手法に変更して計算を高速化する。

- ①解析領域全体を分割して直方体のブロックに分けて、一つのブロックに数100～1000程度のControl Volume が含まれるようにする。
- ②各壁要素と分割直方体との最大、最小距離を計算する
- ③直方体との最大距離が例えば10cmの壁要素があれば、その壁要素と直方体に含まれるControl Volume との距離はすべて10cm以下になるので、直方体との最小距離が10cmより大きな壁要素は距離計算するまでもなく計算対象から外す。
- ④直方体との最小距離が、上記の例では10cm以下の壁要素だけ取り出して、その直方体内部のControl Volume との距離計算をする。
- ⑤大規模になるほど高速化率がアップし、500万要素では現状から100倍以上の高速化が期待される。

前処理の省メモリ化

前処理においてmetis による領域分割計算時のメモリ使用量を削減することにより、1ノードだけ多くのメモリを搭載する必要がなくなる。

テストを行った結果、320万要素でメモリ使用量を6.4GBから0.76GBまで削減することができた。

このメモリ使用量は並列数には関係しない。

時間刻み、緩和係数、収束判定基準値、反復回数の最適化

時間刻みについては自動的に拡大する手法を構築する。

緩和係数の最適化を行う。

収束判定基準値(外部反復と行列解法の両方)の最適化を行う。

反復回数の最適化を行う。

数値パラメータに対するユーザーの負担をなくす。

ソースタームの線形化

ソースタームを線形化して、行列の優対角化を行うことによりロバスト性を向上させる。

相変化を伴う二流体モデルで使用する様々なソースタームについて、線形化の手法を検討する。

5. A-STEP実用化挑戦ステージの提案

5.1 目標

世界トップレベルの実用的な汎用3次元気液二相流解析プログラムを開発する。

5.2 開発するソフトウェアの内容

- ①計算速度を100倍短縮する。
- ②ロバスト性(計算安定性)が高く、必ず計算結果が出る。
- ③ユーザー企業が機器の設計や研究開発で活用できるまでの計算精度が保障される。
- ④流体解析の知識がないユーザーでも簡単に計算の実行と計算結果の可視化を行うことができる。
- ⑤物性値(温度や圧力の依存性)や構成方程式や数値パラメーターが自動で適切に設定される。

謝辞

ご清聴ありがとうございました。

科学技術振興機構様には、平成25年度A-STEPシーズ顕在化タイプ「相変化を伴う3次元気液二相流解析プログラムの研究開発」の申請を採択していただきまして、誠にありがとうございました。

ご来場の皆様ならびに科学技術振興機構様には、今後ともご支援の程何卒よろしくお願い申し上げます。