社会ニーズにこたえるマルチフィジックス 流体シミュレーション*

大 島 伸 行^{*1}

Contribution of Multi-Physics Flow Simulation to Social Problems

Nobuyuki OSHIMA^{*2}

^{*2} Division of Mechanical and Space Engineering, Hokkaido University,
Kita-13, Nishi-8, Kita-ku, Sapporo-shi, Hokkaido, 060-8628 Japan

Flow simulation is growing up as Computational Fluid Dynamics to an important field of engineering and research of fluid dynamics. In order to contribution to society demands, it has been developed for various problems including complex phenomena such as turbulence, sound, multi-phase materials, reaction and so on. The trends of these development are discussed by the categories of society demands on energy, material and human and their specific research topics on Computational fluid dynamics.

Key Words: Computational Fluid Dynamics, Multi-Physics

1. はじめに

近年、地球環境問題への関心が高まっており、とりわけ CO₂ 排出量低減は科学的・工学的観点からも 21 世紀の課題の一つといえよう。CO₂ 排出の問題は、その重大な結果の一つとされる地球温暖化問題に限定されるものではなく、人間の社会活動、とりわけエネルギー消費が、生物界の炭素循環システムに擾乱を与える規模に達したことを示す指標と考えられる。よって、21 世紀の大きなトレンドとしては、エネルギー消費の増加を抑えつつ、石油に代表される炭素循環システムによらない技術へのパラダイムシフトが求められる。また、高度医療・遺伝子技術やグローバルネットワークなどに関する問題にもまた、社会に大きなインパクトを与える同様のパラダイムシフトが起こることを予感させる。

社会ニーズにこたえることが工学の本質と考えると、次世代ペタ・コンピューティングにおけるグランドチャレンジに代表されるような流体シミュレーションの将来もその方向にあらう。以下に、最近の流体シミュレーションの研究動向と社会ニーズに照らした将来への期待をいくつか挙げてみたい。

2. 乱流・音・流体振動

エンジン効率や車両抵抗などの例を挙げるまでもな

く、エネルギーの効率利用の観点から「乱流の制御」はつねに重要な課題であった。厳しい社会ニーズの淘汰のもとでエネルギー技術に対してはさらに臨界に近い制御を求めるとき、安全性や環境保全とのトレードオフを生じる。たとえば、原子炉の混相流設計、希薄燃焼の制御、車両空力などの諸問題に共通する問題として、乱流の非定常な挙動の予測が挙げられよう。これに対してラージ・エディ・シミュレーションの実用化研究が盛んに行われている⁽¹⁾。

図 1 に一例として乗用車空力安定性の非定常シミュレーションの事例を示す⁽²⁾⁽³⁾。ここでは、車体各所から発生する渦による非定常的な相互干渉が走行安定性を支配することが指摘されている。また、風洞試験や走行試験では実測困難な床下整流効果の検証や横風過渡応答の解析にも成果を上げつつある。

さらに、安全性、環境保全により直接的に係わるならば、未解決の重要な課題として流体音・流体振動の予測がクローズアップされる。この問題は次世代ペタ

Fig. 1 Prediction of unsteady flow around vehicle body⁽³⁾

* 原稿受付 2010 年 1 月 4 日。

^{*1} 正員、北海道大学工学研究科(〒060-8628 札幌市北区北 13 西 8)。

E-mail: oshima@eng.hokudai.ac.jp

コンに向けての「ものづくり」基盤研究分野にも取り上げられている⁽⁴⁾。これを流体シミュレーションの技術としてみると「非圧縮性流れ」と「圧縮性流れ」の境界領域とも捉えられる。従来、理論的にも技術的にも「非圧縮性流れ」と「圧縮性流れ」の2つの流体力学は並列して議論されることが多かったが、この社会ニーズは両者のいずれでもない成果を求めている。一方、反応や相変化を伴う問題などでは、「非圧縮性流れ」で密度変化を扱うための低マッハ数近似に基づく解析法⁽⁵⁾や、「圧縮性流れ」で超音速領域を扱うために解行列に前処理を施す解析法⁽⁶⁾などが研究応用されており、両者の理論・技術の交流にブレークスルーを期待する。

3. 界面と粒子

実際の社会ニーズにこたえようとするとき、解くべき現象は必ずしも単純ではない。問題解決に際して、これを単に個々の要素技術に専門化するだけでなく、複雑系として全体システムを捕らえることも必要とされる。そこで、流体シミュレーションにおいてはマルチスケールの考え方が盛んに議論されており、それを代表するものが界面と粒子のモデルといえる。いずれも、複数の流体(実態は化学物質、相、微構造など)からなる系を扱うもので、界面は各流体がマクロに分割される状態、粒子は一方が微細な小領域に分散される状態を捉えている。混相流、燃焼火炎、非ニュートン流、流体構造連成などの複雑系とされる様々な流体現象が界面か粒子のモデルによって表現されている。

これらを扱う流体シミュレーション技術として、界面に対してはレベルセット法に基づく方法が、粒子に対しては質点近似に基づくラグランジュ的方法が共通のアプローチとして工学的にも広く応用されており、前者では気液界面⁽⁷⁾や火炎⁽⁸⁾などが、後者では固気混相流⁽⁹⁾やスプレー流れ⁽¹⁰⁾などが例として挙げられる。また、流体シミュレーション技術としての共通性では、前者には物体境界を扱うイマースドバウンダリー(Immersed Boundary)法⁽¹¹⁾と一連の衝撃波捕獲スキーム⁽¹²⁾、後者には渦法⁽¹³⁾、粒子法⁽¹⁴⁾などが関連付けられよう。これらはいずれも界面や粒子に対してマクロ観点からの定式を与えている。

工学的問題への応用例として、図2にレベルセット法に基づく火炎モデルによるガスタービン燃焼器の予混合乱流火炎のLESの事例を示す⁽¹⁵⁾。ここでは、LES非定常乱流シミュレーションによって乱流混合による燃焼速度の増大効果が予測されている。また、

乱流火炎中の瞬時、局所の温度、濃度場予測と連成することでNO生成の予測にも適用が張られつつある⁽¹⁶⁾。

また、ラグランジュ的手法による粒子運動モデルとレベルセット法に基づく火炎モデルの連成応用として、図3に液滴燃料による燃焼シミュレーションの事例⁽¹⁷⁾を示す。ここでは、乱流噴流中に混合された数十 μm 径の噴霧液滴燃料が気流中で拡散、蒸発しつつ、周囲空気との燃焼火炎を形成する過程が予測されている。同様の数値手法が微粉炭燃焼シミュレーションにも応用が試みられている⁽¹⁸⁾。

一方、界面や粒子として認識されるものは、複数の流体の不均一な混合を生じる何らかのメカニズムを内在しており、それによって、基礎となる物質・物性には見られなかった界面や粒子をマクロレベルで見たときの新たな物理を生じている。ここで、界面や粒子が形成されるメカニズムの具体的な内容を知るには、基礎となる物質・物性の第一原理に基づきミクロ観点に立ちいった議論が必須となる。あるものは連続体近似(ナビエ・ストークス)の範疇で扱われ、あるいは分子・原子の理論に遡る必要もある。

Fig. 2 Prediction of turbulent flame in gasturbine combustor⁽¹⁵⁾

Fig. 3 Prediction of turbulent flame in gasturbine combustor⁽¹⁷⁾

たとえば、気液界面は一般に連続体近似の限界に近いナノオーダーの厚みをもつとされ、その形成には分子動力学シミュレーションが理論的かつ有用な知見をもたらしている⁽¹⁹⁾。また、界面の形成に関しての統計力学的な定式には界面自由エネルギーの評価に基づくphase field法が固体結晶界面など界面物理一般に広く成功を収め⁽²⁰⁾、数学的にも大きな関心⁽²¹⁾が払われているが、流体シミュレーションにおいては臨界点近傍の流体现象⁽²²⁾や火炎面のモデル化などへの適用が試みられている⁽²³⁾。これらのマクロ・ミクロ両者の理論と技術の融合がこの分野へのブレークスルーを期待させる。

4. 材料・化学と流体力学

CO₂排出量低減の基本技術として炭素から水素および原子力へのエネルギーシフトが必須なものと考えるとき、水素インフラ、燃料電池の触媒、放射能物質の処理技術など、材料・化学の分野をコアとした技術のパラダイムシフトがこれまで以上に重要となろう。

燃焼器や化学装置などを例にとるまでもなく、従来から流体シミュレーションの理論や技術の多くはこれらの分野と密接な関連性をもってきたが、どちらかといえば、流体力学研究は、物質の物性を直接扱うよりも、乱流や混相流など力学の一般原理を追求する方向に多くの関心を向けてきたといえる。エネルギーシフトという工学全般がかかわる大きな課題をまえに、これまでの流体力学の成果を具体的な材料・物質の開発につなげる試みを今まで以上に積極的に進めることが求められるであろう。先端医療や生体科学の分野では既にその先駆けに関心が集まりつつある。エネルギー分野においては、特に、水素インフラを含む燃料電池技術⁽²⁴⁾と放射能物質の循環サイクルを核とした原子力技術⁽²⁵⁾において材料・化学と流体力学のコラボレーションを必要としており、なかでも技術転換が比較的容易で分野の垣根を越えやすいであろう「シミュレーション」にそれらの橋渡し役が期待される。

図4に高分子形燃料電池の触媒層近傍における電気化学反応生成水の輸送シミュレーションの事例を示す⁽²⁶⁾⁽²⁷⁾。ここでは、高分子形燃料電池ではカソード(酸素)側電極における水分制御が重要な技術課題となっており、低電流密度の運転状態での電解膜、触媒層、多孔質ガス拡散層を通じた液水分布が、各層の材料特性だけでなく内部サブミクロスケール構造の影響を受けることが示唆されている。

これらの触媒反応に係わる問題では、固体と流体との界面のモデル化が重要な課題となる。量子論に基づ

Fig. 4 Prediction of water saturation in polymer electrolyte fuel cell⁽²⁶⁾

く大規模数値シミュレーション⁽²⁸⁾などによって固体表面での原子、分子レベルの化学的特性に関する知見は高まりつつある。しかし、燃料電池触媒層⁽²⁹⁾に見られるように多くの実用的な問題において固体表面にはサブミクロスケールの様々な構造が存在し、それらがマクロな特性にも大きな影響を与えることが予想される。これらの表面構造を考慮したメソスケール・シミュレーションがこの分野の鍵となろう。

5. 人とシミュレーション

シミュレーションの本質的な目的を考えるとナビゲーションのように人の思考や判断を「助ける」ことであり、あるいは結果としては感情や感性に「訴える」ことにもなろう。いずれにしてもシミュレーションの最終的な対象は「人」であるといえる。近年のIT化とグローバルネットワークの急速な展開のもとでは、シミュレーションの内容・結果がどのように表現され配信されるかによって、その情報にアクセスしうる人数が数人から数十億人にまで拡大しうる。工学シミュレーションも社会的ニーズにこたえようとするならば、好むと好まざるにかかわらず、表題の社会ニーズにこたえるシミュレーションについて考えるとき、シミュレーション内容・結果だけでなく、アクセスする人への伝達手段にも関心を向けざるを得ない。これらは、CFDが計算力学の学術シーズからCAE(Computer-Aided Engineering)の工学ニーズへの視点の展開であり、具体的にはPSE(Problem Solving Environment)の一環として議論されよう⁽³⁰⁾。

バーチャルリアリティや3次元CG技術などと流体シミュレーションを融合する試み⁽³¹⁾は様々に試行されているが、少数の専門家を対象とする限りにおいてその応用はいまだ限定的なものと思われる。この分野の展開は、ゲーム機用グラフィックボードやグローバ

Fig. 5 Concept of meso-scale modeling for mass transport simulation in the fuel cell catalyst layer

ルネットワークの発展とともに、むしろ、ゲームやPDAソフトなどのエンターテインメントで先行するものと思われる。これらと流体シミュレーションの融合技術として、グラフィックボード並列スーパーパソコンでの高速計算や iPod などの PDA 機でのインタラクティブシミュレーション⁽³²⁾などに将来性が期待される。

6. おわりに

社会ニーズへの貢献の観点から、流体シミュレーション研究に寄せる期待を思いつくままに挙げてみた。最近注目される流体シミュレーション研究シーズの多くがそれらの実現に向かっていることに、「流体シミュレーション」が工学の一分野として確立しつつあるものと心強く思う。今後は、その成果が理工学、社会ニーズへ広く開かれていくことを祈る。

文 献

- (1) Oshima, N., *Oyo buturi*, Vol. 74, No. 8 (2005), pp. 1087-1091 (in Japanese).
- (2) Tsubokura, M. et al., *SAE Transactions Journal of Passenger Cars: Mechanical Systems Section 6*, (2007), pp. 40-49.
- (3) Tsubokura, M. et al., *Computers & Fluids*, Vol. 38, No. 5 (2009), pp. 981-990.
- (4) Kato, C., Oral Discussion in Div. B, *Next-Generation Super-Computing Symposium*, (2009).
- (5) Rhie, C. M. and Chow, W. L., *AIAA J.*, Vol. 21, No. 11 (1983), pp. 1525-1532.
- (6) Tsuboi, N. and Shimada, T., *Proc. Asian Joint Conf. Propulsion and Power*, AJCPP 2010-088 (2010).
- (7) Suga, K. and Pan, Y., *Trans. Jap. Soc. Mech. Eng. B*, Vol. 69, No. 682 (2003), pp. 1321-1326.
- (8) Oshima, N. and Nakashima, T., *Journal of the Gas Turbine Society of Japan*, Vol. 35, No. 4 (2007), pp. 219-224, (in Japanese).
- (9) Lei, K. et al., *Progress in Computational Fluid Dynamics*, Vol. 8, No. 7-8 (2008), pp. 413-423.
- (10) Itoh, Y., Taniguchi, N. and Kobayashi, T., *Computational Fluid Dynamics Journal*, Vol. 13, No. 4 (2004), pp. 708-713, 1026-1035.
- (11) Kim, J. and Choi, H., *J. Mech. Sci. Tech.*, Vol. 18, No. 4 (2004), pp. 622-629.
- (12) Fujii, K., *Numerical Methods for Computational Fluid Dynamics*, (1994), University of Tokyo Press (in Japanese).
- (13) Kamemoto, K. and Miyasaka, K. T., *World Scientific*, (2000), pp. 133-145.
- (14) Arai, J. and Koshiduka, S., *Trans. Japan Society for Comput. Eng. Sci.*, No. 20080008 (2008).
- (15) Nakashima, T. and Oshima, N., *Proc. 9th Intern'l Gas Turbine Congress*, (2007), pp. 85-92.
- (16) Itoh, Y. and Oshima, N., *Journal of Thermal Science and Technology*, Vol. 4, No. 1 (2009), pp. 122-130.
- (17) Nishida, S. and Oshima, N., *Proc. 47th Combustion Symposium, Combustion Soc. Japan*, B 222 (2009), (in Japanese).
- (18) Watanabe, H., Kurose, R. and Komori, S., *J. Environment Eng.*, Vol. 4, No. 1 (2009), pp. 1-11.
- (19) Yaguchi, H. et al., *Trans. Jap. Soc. Mech. Eng. B*, Vol. 75, No. 752 (2009), pp. 658-667, (in Japanese).
- (20) Mohri, T., *Statistical Thermodynamics and Model Calculations in Alloy Physics* (ed. Pfeiler, W.), (2007), pp. 525-588, WILEY-VCH.
- (21) Giga, Y. and Chen, Y., *Ugoku Kaimen wo Oikakete*, (1996), Nippon-Hyoron-Sha.
- (22) Takada, N. and Tomiyama, A., *JSME Int. J. B*, Vol. 49, No. 3 (2006), pp. 636-644.
- (23) Inage, S., Abe, K. and Murota, T., *J. Combustion Soc. Japan*, Vol. 52, No. 159 (2009), pp. 60-67, (in Japanese).
- (24) Fuel Cell and Hydrogen Technologies, Outline of NEDO 2008-2009, <http://www.nedo.go.jp/>, (2009).
- (25) Kozaki, T., Liu, J. and Sato, S., *Phys. Chem. Earth*, Vol. 33 (2008), pp. 957-961.
- (26) Hagino, K., Liu, J. and Oshima, N., *Proc. 23rd Symposium Computational Fluid Dynamics*, C 1-15 (2009).
- (27) Tabe, Y., Takamatsu, H. and Chikahisa, T., *ECS Transactions*, Vol. 25, No. 1 (2009), pp. 39-47.
- (28) Yamamoto, T. et al., PHASE & CIAO, Advance-soft, (2004).
- (29) Koyama, M. and Kraines, S., *International Journal of Energy Research*, Vol. 29 (2005), pp. 1261-1278.
- (30) Miyachi, H. et al., *Proc. 1st Intern'l Conf. e-Science and Grid Computing*, (2005), pp. 530-535.
- (31) Yamazaki, T. et al., *Proc. 23rd Symposium Computational Fluid Dynamics*, C 7-4 (2009), (in Japanese).
- (32) AQUA FORET, Prometech software, (2009), <http://www.prometech.co.jp/>