

格子ガスオートマトン法を用いた装置内流動の均一化の試みと並列計算への適応性評価

日岡, 英一
九州大学工学府化学システム工学専攻

松隈, 洋介

峯元, 雅樹

<https://doi.org/10.15017/1470415>

出版情報 : 九州大学情報基盤センター広報 : 全国共同利用版. 2 (2), pp.137-147, 2002-07. 九州大学
情報基盤センター
バージョン :
権利関係 :

格子ガスオートマトン法を用いた装置内流動の均一化の試みと 並列計算への適応性評価

日岡英一[†]・松隈洋介・峯元雅樹

緒 言

現在、エネルギー・環境問題が注目されている。世界人口の増加、生活レベルの向上から引き起こされるエネルギー不足、またこれに伴う SO_x 、 NO_x 、 CO_2 などの環境汚染物質の排出が問題視されている。現在の限りある資源を有効に使い、排出される環境汚染物質を最小限にするためには、各種化学プロセス装置の性能向上を図る必要がある。

現在の各種化学プロセス装置では触媒反応器、吸着装置、充填式蒸留塔などのハニカムや粒子状の充填物中を流体が流れる場合が多い。これらの装置では、内部に均一な流動が生じていると仮定した解析が多く行われている。しかし実際の装置内部の流動状態は不均一となっている場合が多く、この流れの不均一さによって装置性能の低下を引き起こすことがある。例えば、工業化学反応の3/4が触媒反応といわれ、その反応器への触媒の充填・交換には手間がかかる。さらに流動状態が不均一なために滞留時間に分布が生じ、これにより反応器内の触媒の寿命に差が現れ、装置の性能を低下させることになり、また触媒の充填・交換の時期の判断を難しくしている。

そこで本研究では、このような装置内流動の不均一さを解消することにより、装置性能を高めることを最終的な目的とし、その第一段階として、 CO_2 吸着除去に適応が検討されているハニカム形状の吸着塔の断面を単純化したモデル流路を考え、数値解析と実験から装置内の流動を把握、検討する。さらに流体と固体壁を連成して解くことで、流動が均一となる最適な流路形状を自動的に設計する手法を提案する。なお数値解析には装置内部の複雑な形状を忠実に再現できるように格子ガスオートマトン法を用い、大規模体系の計算を並列計算機で行うとともに、並列計算機への格子ガスオートマトン法の適応性を同時に評価することとした。

[†] 九州大学工学府 化学システム工学専攻 E-mail : ehioka@chem-eng.kyushu-u.ac.jp

1. 数値解析

1. 1 格子ガスオートマトン法

格子ガスオートマトン法は流れを連続体とみなして Navier-Stokes などの巨視的方程式を解く代わりに、原子・分子の集合体である仮想粒子を用いてメソスケールから流れを再現する手法の一つである。Fig.1 は正三角形の格子を持つ FHP モデル

(Frish, et. al. 1986) である。この格子を用いて空間を離散化し、この格子の上に単位質量を持つ仮想粒子を多数配置する。粒子は各 6 方向と静止を含めた 7 つの速度方向を持つことが出来る。各格子に存在する粒子が一斉に質量と運動量を保存するように衝突し、衝突によって新たな速度方向を得た粒子がその方向に 1 格子長さだけ進む並進過程を繰り返すことで時間発展する。そして複数の格子状態を平均化することで流速や圧力などの巨視量を得る。格子ガスオートマトン法は、この粒子の挙動を追跡することによって流れを再現するものである。

FHP モデル [1] は音速よりも十分に小さい流速場で二次元单相流を計算でき、Poiseuille 流れや Couette 流れ等の典型的問題における厳密解や差分解とオートマトン解の比較がなされ、両者のよい一致が報告されている。

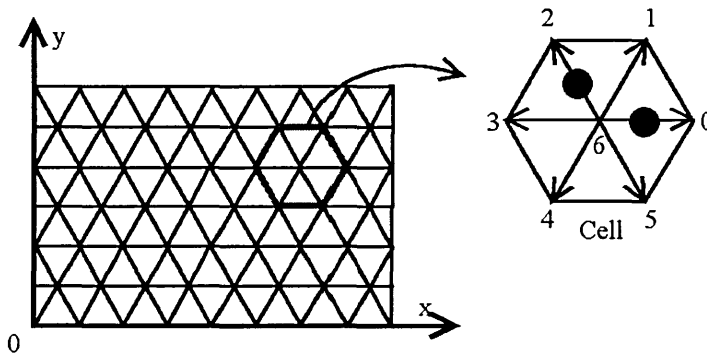


Fig.1 FHP モデル

1. 2 解析モデル

Fig.2 に本研究で用いた解析モデルを示す。ここでは排ガス中の CO₂ の吸着除去などへの適応が検討されているハニカム形状を対象とした。図中の灰色部分は障害物である。このモデルは装置内部に 8 本のチャンネルを持ち、図の左下から一定流量で流入した流体が 8 本の各チャンネルに分岐して流れ込み、上部で再び合流した後に右上から流出する。各チャンネルと障害物の幅を d 、流入・流出部の長さを $3d$ とした。ま

たチャンネル部の長さは $18d$ である。このモデルに対して解析を行い、8本のチャンネルの流量分布を調べた。

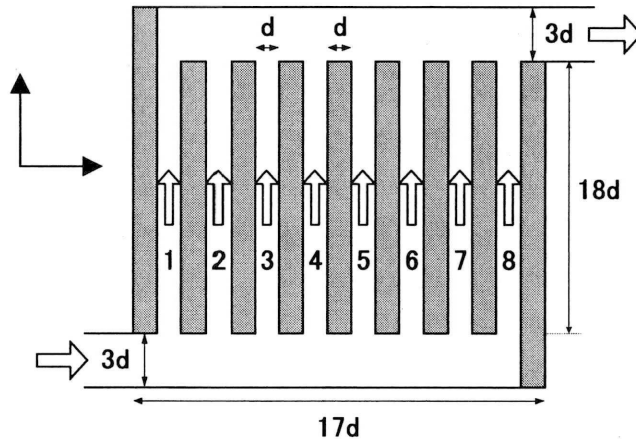


Fig.2 解析モデル

1. 3 紙面垂直方向にある壁面の影響の考慮

対象としたハニカム形状は紙面垂直方向にも壁面があるため、Fig.2での流路モデルに対して紙面垂直方向にある壁面の影響について考える必要がある。しかし、FHPモデルは二次元単相流を解析するモデルのため、このままでは紙面垂直方向の壁面の影響を取り入れることができない。そこで本研究では、擬似的に紙面垂直方向の壁面の影響を取り扱うことのできる新たなモデルをFHPモデルに組み込むこととした。

Fig.3(a)のように z 方向の両端を壁面とした場合の x 、 y 平面での流動を考え、流動域厚さ H と流路幅 D との比をアスペクト比 $a = D/H$ とし、 $x-z$ 平面内では放物型の流速分布が形成されるとすると、紙面垂直方向の壁面から受ける粘性力を考慮した $x-y$ 平面での x 方向の運動量収支はEq.(1)のように表すことができる。

$$\frac{\partial v_x}{\partial t} + v_x \frac{\partial v_x}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_x}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{1}{\text{Re}} \left(\frac{\partial^2 v_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_x}{\partial y^2} \right) - \frac{1}{\text{Re}} \frac{12v_x}{a^2} \quad (1)$$

この右辺第3項が紙面垂直方向の壁面の影響を表し、Reynolds数とアスペクト比 a が一定であれば x 軸方向の流速 v_x に比例していることが分かる。そこで、FHPモデルでこの壁面の影響を考慮するためにFig.3(b)のように仮想粒子を流速 v_x に比例した確率 P で進行方向と逆方向に向けることで紙面垂直方向の壁面の影響を表現することとした。

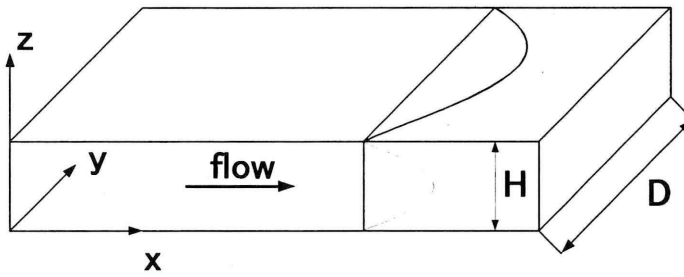


Fig.3(a) 狭い流路内の流れ

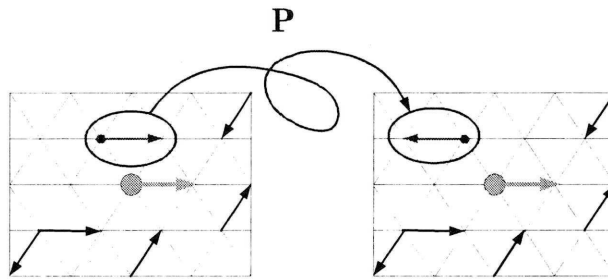


Fig.3(b) 壁面の影響を考慮したオートマトンモデル

2. 実 験

Fig.4に装置全体の模式図を示す。装置は送風機、ダクト及びテストセクションより構成され、テストセクションは Fig.2 と同形状で流路、壁ともに幅 10mm とし、流入径を 30mm、流路の高さを 150mm、厚さ方向の幅を 150mm とした。Fig.4において左から右に空気を流す。左の送風機から送られた空気は、整流の目的のため設けたシリコンチューブを詰めた図中の灰色の整流部を抜け、ダクトをとおりテストセクションで各チャンネルに分岐し、再び合流し開放される。このテストセクション内部の各チャンネル出口での空気の流速を熱線流速計を用いて測定した。

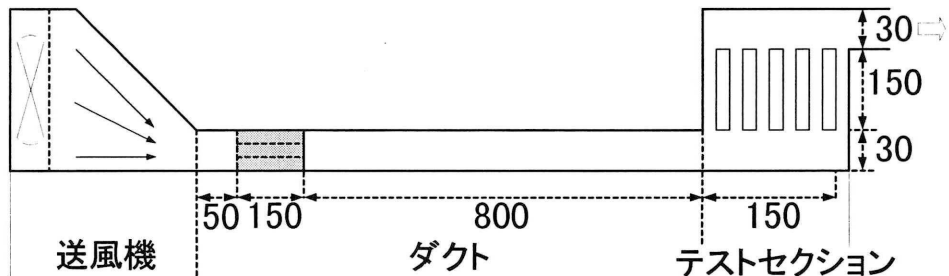


Fig.4 装置模式図

3. 解析・実験結果

3. 1 壁面の影響を考慮しない場合

Fig.5 に壁面の影響を考慮しない場合の解析による $Re=330$ の流れの様子を示す。図中の矢印はその点での流速ベクトルを表している。これより流出側のチャンネルほど流速が大きく、流入側は小さいといったことが分かり、各チャンネルごとに流量の分布に偏りがあることが分かる。また体系の右下、左上の部分には流れがほとんどなく、よどんでいる箇所がみられる。さらに、各チャンネルの入口付近には渦の存在も確認でき、これは流入側ではっきりと現れた。

この流量の偏りを定量的に確認するために、**Fig.6** に解析結果及び実験結果の流速分布の比較を示した。プロット□が格子ガスオートマトン法による解析結果を、プロット●が実験の結果を示す。なお **Fig.6** 中の channel number は **Fig.2** に示したチャンネルの番号と一致しており、縦軸は8本の各チャンネルの流速 U_i をチャンネルの平均流速 U_m で除した値である。**Fig.6** より $Re=330$ と層流域の低 Reynolds 数であっても流量の分布に約6倍もの大きな差が生じていることが分かる。また、計算値は実験値の傾向をよく捉えており、格子ガスオートマトン法がうまく流れを再現していることから、本解析モデルに対して有効であるといえる。

また、比較のため従来の Navier-Stokes 方程式を解く差分法による結果をプロット△で示した。格子ガスオートマトン法と差分法による解析結果は流入部側では差が生じているものの、良好に一致している。このことから、格子ガスオートマトン法が本研究のモデル流路に対して有効であることが分かった。

3. 2 壁面の影響を考慮した場合

次に壁面の影響を考慮した場合の解析結果をから流動状態を **Fig.7** に、流量分布を **Fig.8** に示す。壁面の影響を考慮しない場合とは異なり流入側で流量が増加して放物型の分布となっていることが分かる。これは紙面垂直方向にある壁面の影響で、粘性力が増大したためであると考えられる。このことから、**Fig.3** のモデルは紙面垂直方向の壁面の影響を扱うモデルとしての可能性が示された。また、**Fig.7** では2次元の場合と同様に図中の右下と左上の部分によどみ領域が確認できた。さらに **Fig.8** から壁面を考慮した場合も流量の分布に約1.6倍の偏りがあることが分かった。

3. 3 最適形状流路の自動設計

そこで流動状態の均一化、つまり各チャンネルへの流量配分割の一様化のために、

Fig.5 や Fig.7 にみられた流速の小さなよどみ領域を壁として埋めていくという操作を繰り返し行えば流量の均一化が行えると考えた。そこでこのようなモデルを作成し、最適形状の自動設計を行った結果を Fig.9 に示す。これは壁面を考慮したモデルで $Re=110$ に対して行った場合の結果である。Fig.9 の縦軸は、8本のチャンネルのうち、流量の最大値と最小値との比で、これが 1.0 であればすべて均一に流れていることを表す。また、横軸は計算回数である。また、そのときの形状も示しているが、Fig.5、Fig.7 でのよどんだ領域が壁となっていることが分かる。Fig.9 から、壁を埋めるに従って 1.6 程度であった縦軸の値が 1.15 と 1 に近づき、各チャンネルに分配される流量が均一になっていったことが分かる。均一化の前後での流量分布を Fig.10 に示す。この図から自動設計により均一化が行われていることがはっきりと分かる。この操作によって約 27%の均一化が行われた。

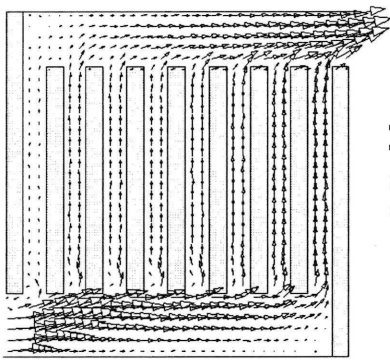


Fig.5 流動状態 $Re=330$
(壁面を考慮しない場合)

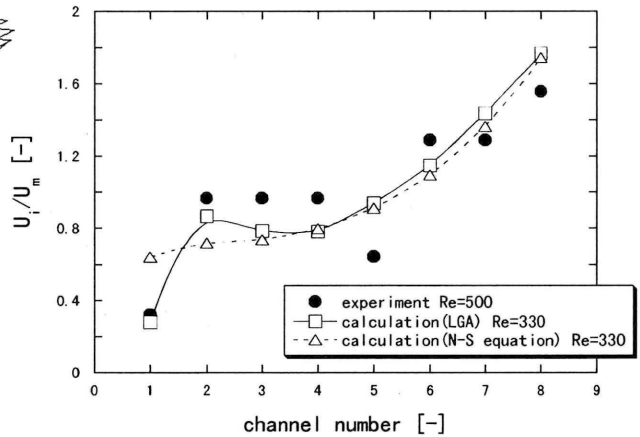


Fig.6 解析と実験結果の比較

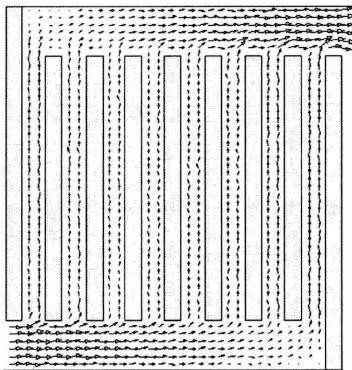


Fig.7 流動状態 $Re=110$
(壁面を考慮した場合)

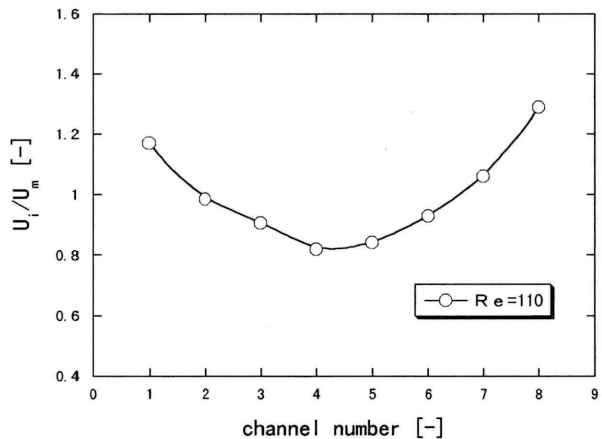


Fig.8 流量分布 $Re=110$
(壁面を考慮した場合)

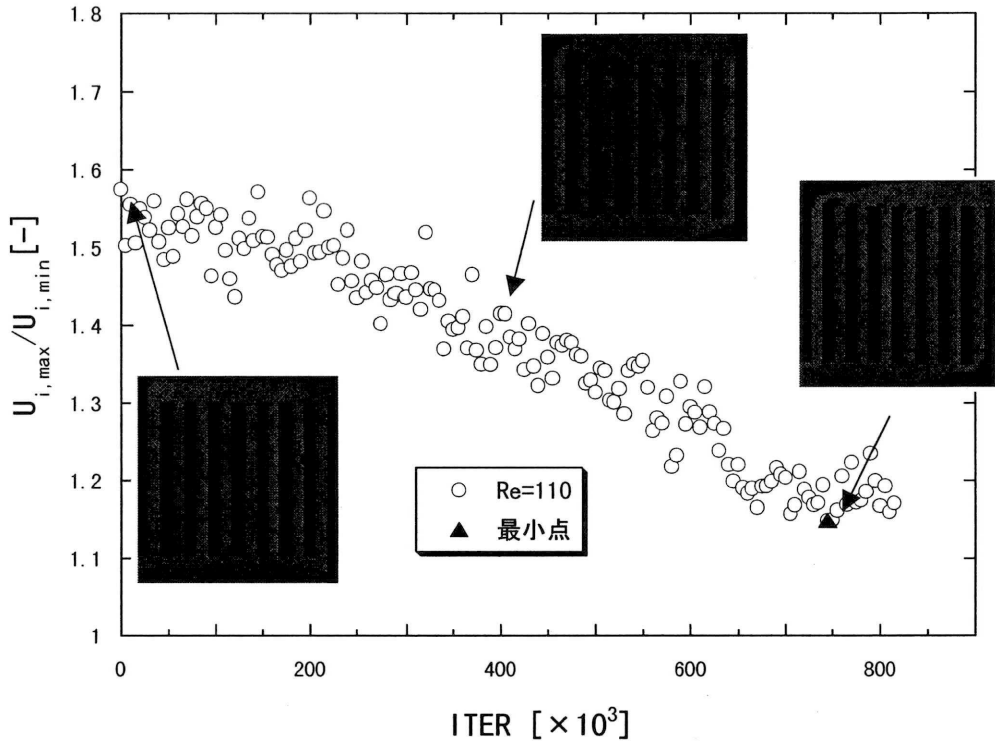


Fig.9 自動設計による偏りの変化

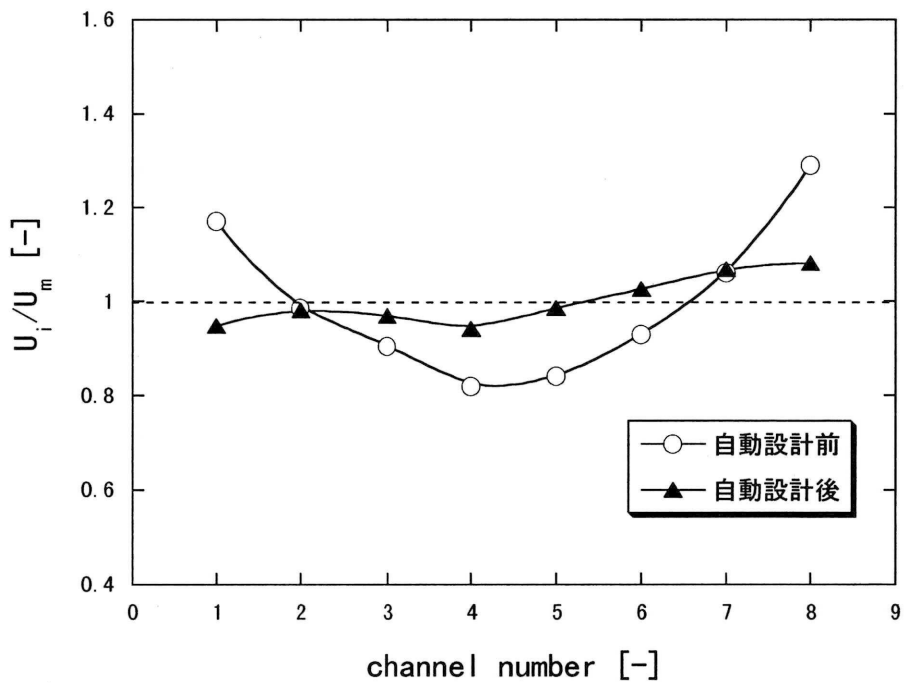


Fig.10 自動設計前後の流量分布

4. 格子ガスオートマトン法の並列計算への適応性の評価

4. 1 並列計算の必要性と適応性

格子ガスオートマトン法の圧力、流速等の巨視的物理量は複数の格子の微視的状态を平均する疎視化により求められる。そのため格子ガスオートマトン法を用いて精度よく解析を行うためには統計ノイズの少ない巨視的物理量を得る必要があり、格子の数を多くとり大規模な計算を行う必要がある。また、格子ガスオートマトン法により計算される巨視量の時間変化が Navier-Stokes 方程式の解と等価であるためには、密度・流速の値には上限がある。したがって、高 Reynolds 数の流れを解析するためには、Reynolds 数に応じて代表長さを大きくする、すなわち多数の格子点を使用する必要が生じる。この計算には多くの時間を必要とするため並列計算による計算時間の短縮が望まれる。

格子ガスオートマトン法では衝突による状態変化は各格子点で独立に行われ、並進においても必要となるのは隣接する格子点の情報のみであるから衝突・並進の計算に必要な情報が周囲 6 方向の格子の状態のみに限られている。このように格子ガスオートマトン法は局所性の高いデータ構造を持ち、並列計算に適していると考えられている。そこで、格子ガスオートマトン法の並列計算を行い、その適応性を評価した。

4. 2 並列計算の概略

並列計算の方式としてマスター・スレーブ方式を用いた。スレーブが計算を担当し、マスターはスレーブの計算時間を監視することとした。本研究ではマスターを 1 台、スレーブを 1~16 台用いて並列計算を行った。マスターは計算領域を横方向にスレーブの数に分割したあと、領域をスレーブに送信して計算を開始する。スレーブは粒子の衝突を計算した後、並進の計算で必要となる（隣のスレーブとの境界の）隣接格子のデータを隣のスレーブと通信する。この際に必要なデータは各スレーブが担当する計算領域の両端の格子情報のみである。スレーブは通信終了後に並進を計算し、衝突・通信・並進に要した時間をマスターに知らせて次のタイムステップの計算を行う。なお並列計算には、Parallel Virtual Machine(PVM)を用いて並列計算を行い、計算機には九州大学計算機センターの並列計算機 GS320 を用いた。

4. 3 結果と考察

Fig.11 に並列処理の性能測定結果を示す。縦軸のスピード向上比 R は 1 台のノードでの計算時間を T_1 、 n 台での並列計算での計算時間を T_n として Eq.(2) より求めた。

$$R = \frac{T_1}{T_n} \tag{2}$$

また、理想値はノード数を2倍にすればスピード向上比も2倍になるというように直線で示している。凡例は計算格子数を表している。図をみると全体的にはほぼノード数に線形で良好な性能向上が達成されていることが分かる。ノード数が6まではどれも理想値とほぼ同じ値を示しているが、それ以降からは差が現れ、どれも近い値で理想値を下回る結果となった。これはノード数が増えるとその分スレーブ間の通信に時間がかかってしまうためと判断した。しかし理想値を下回りはしたもののノード数が8で約7.5倍、16で約14倍の性能向上がみられ格子ガスオートマトン法は並列計算に適しているといえる。

次に並列計算における計算時間に占める通信時間の割合を Fig.12 に示した。理論的にはノードが増えるにつれて1台あたりの計算時間は少なくなる。そして計算時間が大半を占めるため、通信時間はあまり変わらないと推測されるので通信時間と計算時間との比、COMM/CALCはノード数に比例すると考えられる。Fig.12ではノード数が6までは比例しているように見えるが7台の点で急激に大きくなっている。これはどの計算格子数に対してもいえるので、ノード数が増え通信の情報量が増えるために7台目を境にして計算機の通信能力の限界となったため、というだけでなくやりとりする情報の数が増えるのではないかと想像できる。また、Fig.11をみるとノード数が6台までは理想値にのっている。ゆえに、Fig.12から通信に要する時間が衝突と並進の計算に要した時間の2%以下であれば理想値とほぼ等しい結果が得られ、並列計算により十分に高速な計算環境を得ることができると予想される。

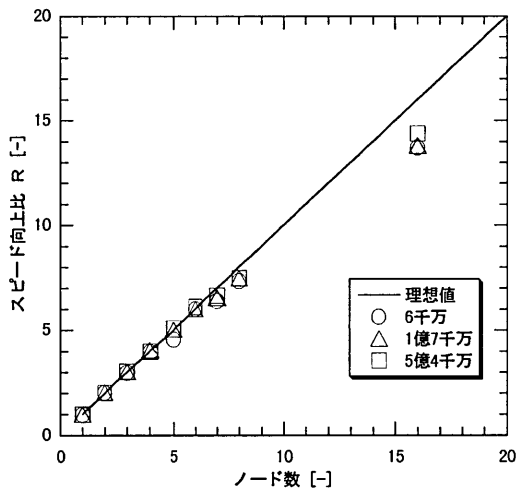


Fig.11 並列化効率

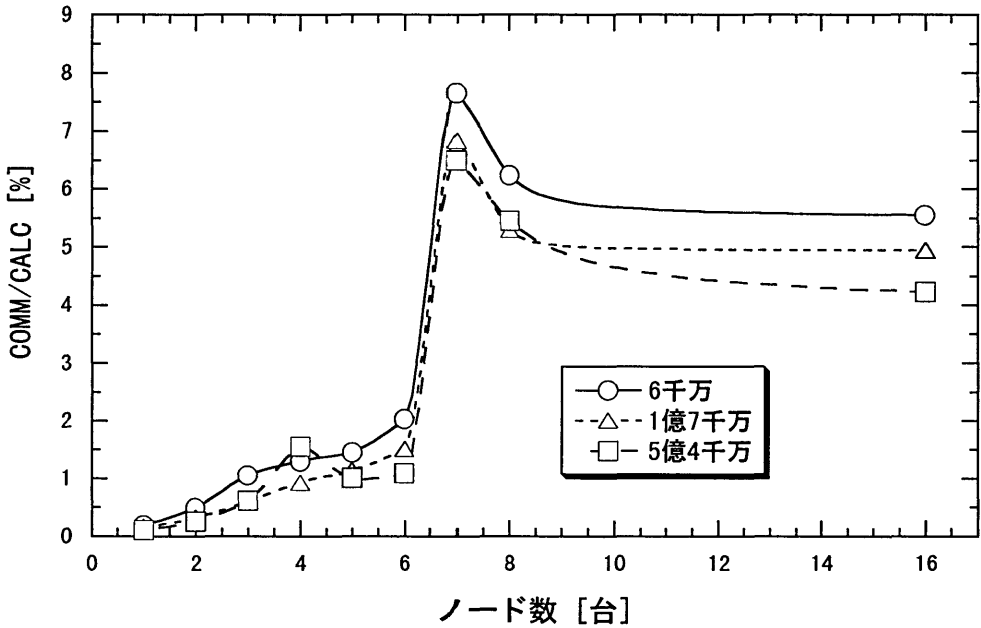


Fig.12 計算時間に占める通信時間の割合

結 言

解析と実験により対象とした形状には各チャンネルへの流量配分割合は一様ではなく分布を持つことが確認できた。また、格子ガスオートマトン法は本研究モデルに対して非常に有効であることも確認できた。さらに、形状の自動設計による流動の均一化の可能性が示された。格子ガスオートマトン法の大規模計算においては並列化は十分有用であり高速な計算環境を得られることが分かった。並列計算では通信時間が計算時間の2%以下であれば理想的な計算速度を得られることが分かった。

謝辞

本研究を行うにあたり並列計算機GS320を使わせていただきました九州大学情報基盤センターの 藤野 清次 先生、南里 豪志 先生に対し、ここに記して感謝の意を表します。

使用記号

a	=アスペクト比	[-]
D	=流入径	[m]
d	=チャンネル幅	[-]
H	=流動域厚さ	[-]
P	=確率	[-]
p	=圧力	[N/m ²]
R	=スピード向上比	[-]
Re	=Reynolds number	[-]
T	=計算時間	[s]
v	=流速	[m/s]
ρ	=密度	[kg/m ³]

参考文献

- [1] U. Frish, B. Hasslacher and Y. Pomeau, 1986, Lattice-gas automata for the Navier-Stokes equations, phys. Rev. Letters, 56-14,1505-1508.