

# 埋め込み境界法を用いた 複雑形状における流れの シミュレーション



## Simulation of Flow in Complex Geometries by Immersed Boundary Method

住友化学株式会社

生産安全基盤センター

八重樫 優 太  
村 松 宏 起  
島 田 直 樹

Sumitomo Chemical Co. Ltd.

Production and Safety Fundamental Technology Center

Yuta YAEGASHI

Hiroki MURAMATSU

Naoki SHIMADA

Simulation plays a critical role in the design of chemical equipment and the optimization of process conditions, as it enables the analysis of physical quantities distributed in three dimensions within the equipment. However, conventional grid-based and particle-based methods face various challenges when handling fluid flow in complex geometries. The immersed boundary method has emerged as a promising alternative to address these challenges. This method offers several advantages, including simplified mesh generation using orthogonal grids, ease of modifying geometries, and reduced computational costs. This report specifically focuses on the volume force-based immersed boundary method, presenting application examples including the simulation of Newtonian fluids, non-Newtonian fluids, porous media flow, and turbulent flow.

### はじめに

化学装置などの複雑な形状の内部における流れを把握することは、化学装置の設計やプロセス条件の最適化などに必要不可欠である。特に、化学装置内部の流れの特性を理解することは、効率的な化学反応を実現し、製品の品質や収率を向上させるためにも欠かせない要素である。しかし、実験では条件ごとに装置を製作する必要があること、また、装置内部の3次元に分布する多くの量を観測することが困難であることから、シミュレーションを用いて装置内部における流れを把握することが広く行われている。シミュレーションを用いることで、実験に比べてコストや時間を大幅に削減することができ、さらに、装置内部の詳細な流れの挙動を可視化することが可能となる。従来の計算手法では、格子の歪みによる計算精度の悪化や不安定化、メモリアクセスの低下などの問題がある。これに対して当社では、装置内部流れの効率的なシミュレーションのため、埋め込み境界法（Immersed Boundary Method）に基づくプログラム開発を行っている。埋め込み境界法は、適切な外力を付加することにより、直

交格子を用いて複雑な物体を表現する手法である。直交格子を用いることでメッシュ生成が容易になる、形状変更も容易になる、計算コストを削減できるなどさまざまな利点がある。この手法を用いることで、複雑な形状を持つ装置内部の流れを簡便に計算することが可能となり、設計の最適化やトラブルシューティングに大いに役立つ。今回は、埋め込み境界法の紹介とその計算例を示す。

### 複雑形状における流れのシミュレーション法

#### (1) これまでに開発された手法

複雑形状における流れをシミュレーションするために、これまでさまざまな手法が開発、適用されてきた。例えば、領域をメッシュに分割して計算を行う格子法では、境界に沿った座標に基づく境界適合格子や、領域を多角形のセルに分割する非構造格子がある。また、領域をメッシュに分割せずに、流体の速度で移動する離散点を用いて計算を行う粒子法もある。これらの手法に対しては、以下のような課題が知られている。境界適合格子においては、形状が複雑な場

合、領域を分割する必要や、格子が大きく歪み、安定に計算できなくなる場合がある。また、方程式の形が非常に複雑になるため、プログラム開発のコストが上昇する。非構造格子においては、メッシュの生成に多大な労力がかかる、セルの隣接点が一般には隣接するメモリに格納されないためメモリアクセスが悪く演算コストがかかる、ポアソン方程式の行列の形が悪く収束性が悪い、高次解法を適用することが難しい、ということが知られている。粒子法においては、離散点が領域を動き隣接関係が常に変化するため、メモリアクセスが悪い、ポアソン方程式の行列の形が悪く収束性が悪い、粒子の粗密をコントロールするのが難しく精度を向上させることが難しい、ということが知られている。そこで、近年注目を浴びているのが埋め込み境界法である。

埋め込み境界法は、適切な外力を付加することにより、直交格子を用いて複雑な物体を表現する手法であり、メッシュ生成が容易である。埋め込み境界法は、直交格子を用いるため、直交格子の持つメリットを享受できる。具体的には、方程式の形がシンプルである、メモリアクセスがよい、ポアソン方程式の行列の形が良い、高次解法が使える、などである。直交格子を用いるため形状変更が容易であり、シミュレーションのリードタイムの短縮が見込める。また、多孔質体のような複雑な形状を扱うことを考える場合、非構造格子を用いることも考えられるが、まず多孔質体の画像からCAD (Computer Aided Design) 等を生成することが非常に難しい。もし可能であるとしても、一般に人力による手直しを要する。また、CADをもとにメッシュを生成する際に、とがった境界などメッシュの品質を維持したまま分割を行うことは非常に難しく、生成されたメッシュを再び人力で手直しする必要があるなど多大な時間を要する。埋め込み境界法を用いると、画像から直接多孔質体の体積率を求め、メッシュの品質等に気を遣うことなくそのまま計算を行うことが可能となるため、計算の事前準備が非常に効率化できる。Table 1に複雑形状における流れのシミュレーション法の比較を示す。こうした比較をもとに、当社では、埋め込み境界法を採用したプログラム開発を行っている。

## (2) 埋め込み境界法の種類

埋め込み境界法は、血管の流れをシミュレーションするためにPeskinにより開発された手法であり、適切な外力を付加することにより、直交格子を用いて複雑な物体を表現する手法である<sup>1)</sup>。埋め込み境界法には、大きく分けてcontinuous forcingタイプとdiscrete forcingタイプがある<sup>2)</sup>。continuous forcingタイプとは、離散化前の方程式に物体を模擬するための外力を追加する手法である。一方、discrete forcingタイプとは、離散化後に物体を模擬するための外力を追加する手法である。discrete forcingタイプにもさまざまな種類があり、カットセル、ゴーストセル、体積力を用いるものなどがある。このように、埋め込み境界法は群雄割拠の状態であり、どの手法を用いるのが適切なのか自らよく検討して適用する必要がある。

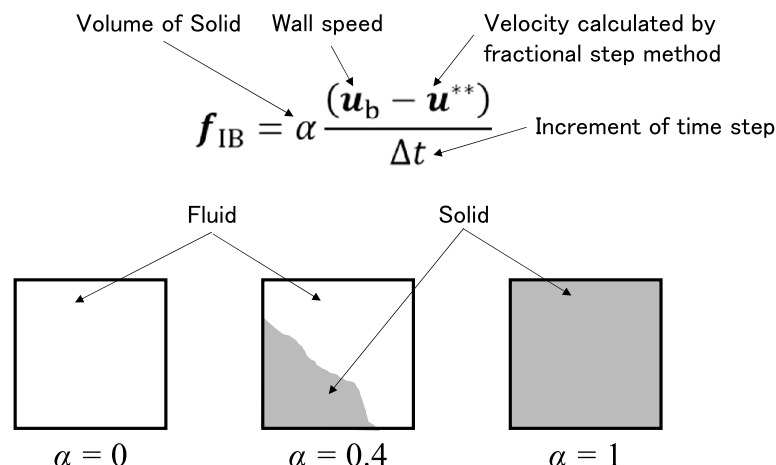
## (3) 体積力型埋め込み境界法

体積力型の埋め込み境界法は、梶島によって開発されたdiscrete forcingタイプの埋め込み境界法の一種であり、各セルを占める物体の固相率に応じて速度にペナルティーをかける手法である<sup>3)</sup>。体積力型埋め込み境界法は広く応用されている。例えば、固気液三相流<sup>4)</sup>、フィルターによる油水分離<sup>5)</sup>、気液二相流を含む攪拌<sup>6)</sup>、固気二相流の熱伝達<sup>7)</sup>などの例がある。Fig. 1に体積力型埋め込み境界法の概略を示す。体積力型埋め込み境界法では、ナビエ・ストークス方程式に外力を付加して複雑な境界を模擬する。その外力の大きさは、次の時間ステップで、境界条件に整合するような速度を実現するために必要な大きさになっている。このように、体積力型埋め込み境界法による計算手順は、最後に外力を追加する以外は非圧縮性流体の速度・圧力カップリング手法としてよく用いられる、格子法で従来から用いられているフラクショナル・ステップ法<sup>2)</sup>と同じである。また、必要なパラメータは固体体積率だけであり形状情報から求めることができるため、直交格子に対するプログラムをベースに修正するだけでよく、非常に開発を行いやすいという利点を有する。しかしながら、体積力型埋め込み境界法にはいくつかの課題が残されている。まず、時間刻みが十分に小さくないと、圧力損失が合わないなどの問題点

**Table 1** Comparison of numerical methods for flow in complex boundaries

Method	Mesh generation	Form of equation	Memory access	Poisson equation	High order scheme
Particle method	Not required	Unchanged	Slow	Difficult to solve	Slightly difficult
Boundary-fitted grid	Difficult	Complex	Fast	Normal	Applicable
Unstructured grid	Difficult	Unchanged	Slow	Difficult to solve	Difficult
Immersed boundary method	Easy	Unchanged	Fast	Easy to solve	Applicable

$$\rho \left( \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \nabla \cdot (\mu (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T)) + \rho \mathbf{f}_{IB}$$



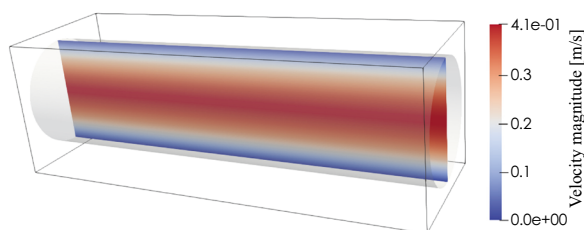
**Fig. 1** Outline of volume of solid type immersed boundary method

があるため、予備計算において時間刻みの大きさを確認しておくことが重要である。また、池野<sup>8)</sup>が指摘するように、内部反復を行わず、discrete forcingタイプの埋め込み境界法をナイーブに適用した場合、ソレノイダル条件（非圧縮条件）と壁面におけるすべりなし条件が一般には同時に満たされないことが述べられている。この誤差は、層流の場合は比較的小さいが、乱流の場合は注意しなければならないことも指摘されている。また、混相流などの密度差がある流れにおいては、こうした誤差は体積保存性に悪影響を及ぼすことも知られている。

## 社内における取り組み事例

### (1) ニュートン流体に対する計算例

埋め込み境界法をニュートン流体に適用した例を紹介する。計算領域として直方体領域を取り、その中に水平に円管を埋め込む。流れは左側から流入し、右側から流出している。簡単にするため、流入部と流出部は周期境界条件とし、初期に静止している流体に、圧力勾配をかけて流れが十分に発達するまで計算を行った。Fig. 2に定常状態における円管における速度場の大きさを示す。計算結果を見ると、流れが発達し最

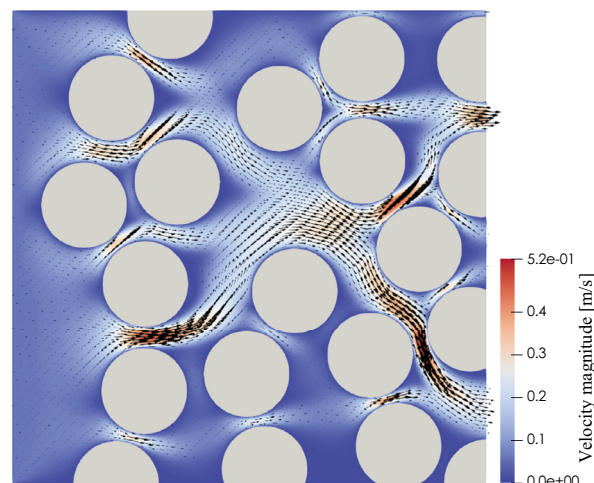


**Fig. 2** Velocity magnitude of laminar flow in pipe

終的にポアズイユ流れになることがわかる。本結果から、埋め込み境界法を用いると、円管のように曲率を持った境界面を扱うことが可能となることがわかる。

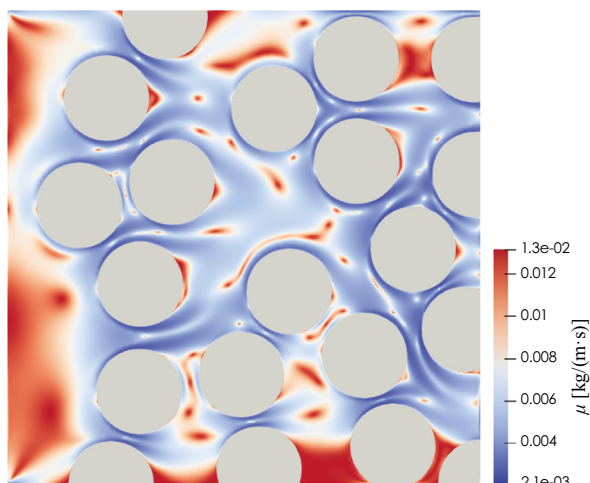
### (2) 非ニュートン流体に対する計算例

次に、埋め込み境界法と非ニュートン流体に対する数値計算手法を組み合わせた例を紹介する。非ニュートン流体として、粘度が剪断速度に応じて減少するshear-thinning流体を用いる。多孔質体を模擬した円柱が含まれる正方形の2次元領域を計算領域とする。領域上面と下面は壁面、左面を流入面、右面を流出面とする。Fig. 3に多孔質体を模擬した円柱の間を流れる非ニュートン流体の速度場の大きさ（コンター図）と向き（ベクトル）を示す。また、Fig. 4に粘度の大きさを示す。Fig. 3によると、円柱が接近している箇所



**Fig. 3** Velocity magnitude and velocity vector of shear-thinning non-Newtonian fluid in porous media



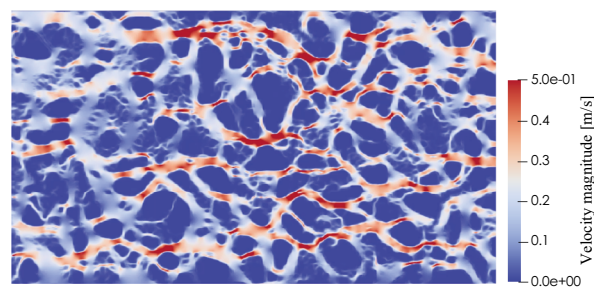


**Fig. 4** Viscosity of shear-thinning non-Newtonian fluid in porous media

質体内において、流れが集中して流れている箇所を確認できる。**Fig. 4**によると、壁面近傍では滑りなし条件が課されているため剪断速度が大きくなり粘度が低くなっていることがわかる。一方、流路の中央では、速度勾配が小さく結果として剪断速度が小さくなるので粘度が高い。このように、複雑な流路における粘度場を詳細に把握することが可能となった。既往の非構造格子を用いてこのような円柱群に沿った格子を作る場合、格子が大きく歪むため、精度や安定性が低下する、計算時間が増大する、場合がある。

### (3) 多孔質体に対する計算例

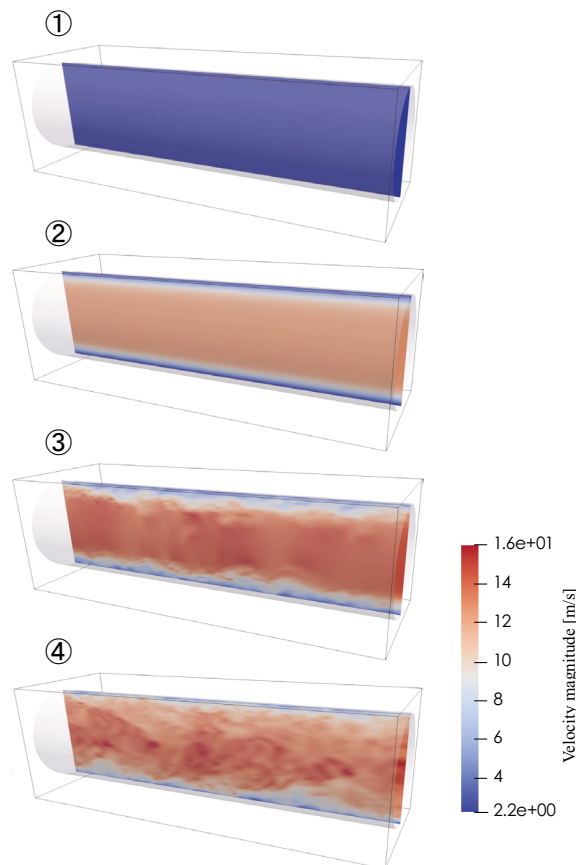
既存の非構造格子や境界適合格子の適用が難しいケースにおいても、埋め込み境界法を用いれば容易にシミュレーションが可能となる場合がある。その一例として、円柱群より複雑な形状で構成される多孔質体流れの計算例を紹介する。多孔質体が含まれる長方形の2次元領域を計算領域とする。領域上面と下面は壁面、左面を流入面、右面を流出面とする。多孔質体の画像から直接固体の体積率を求め、それをもとに多孔質体を埋め込む。**Fig. 5**に多孔質体の間を流れる流体の速度場を示す。流速が0 m/sである青い部分が固体部であり、赤い部分が流体が流れている部分をあらわす。**Fig. 5**によると、流れが集中している箇所を確認できる。埋め込み境界法を用いると、こうした多孔質体の粗密による流れ具合の違いが圧力損失に及ぼす影響を計算することが可能である。埋め込み境界法を用いると、画像から直接多孔質体の体積率を求め、メッシュの品質等に気を遣うことなくそのまま計算を行うことが可能となるため、計算の事前準備が非常に効率化できる。こうした技術を用いることにより、今後触媒媒間の詳細な流れの把握や膜の設計への応用を見込んでいる。



**Fig. 5** Velocity magnitude in porous media

### (4) 乱流に対する計算例

最後に、埋め込み境界法と乱流に対する数値計算手法を組み合わせた例を紹介する。乱流は工学的によく見られる現象であるが、生成された渦を正確に捉えるためには膨大な格子数を要する。このため、前述したメモリアクセスの悪い手法では実用性が低下する。埋め込み境界法はこうした点においても有効な計算手法として期待できる。計算領域として直方体領域を取り、その中に水平に円管を埋め込む。流れは左側から流入し、右側から流出している。簡単にするため、流入部と流出部は周期境界条件とし、初期に静止している流体に、圧力勾配をかけて層流から乱流へと発達する様子の計算を行った。**Fig. 6**にいくつかの時間における円管における速度場の大きさを示す。計算結果を



**Fig. 6** Velocity magnitude of turbulent flow in pipe

見ると、時間が経過するにつれて速度の変動が大きくなる、境界層が薄くなる、など層流から乱流へ遷移が起こっていることを示している。このように、埋め込み境界法と乱流に対する数値計算手法を組み合わせることで、円管における乱流への発達が再現できるようになった。本例では、周期境界条件を用いて計算を行ったが、流入部にサンプリングした流れ場のデータを、流出部に対流流出境界条件を適用することも可能である。さらに、埋め込み境界法の利点を生かして、温度計などの計装機器の流れに対する影響や弁などの駆動性などへの応用も期待できる。

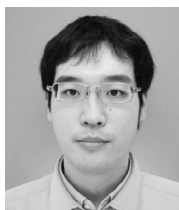
## おわりに

本稿では、埋め込み境界法の紹介とその計算例を示した。今回は、体積力型埋め込み境界法を紹介したが、どの埋め込み境界法を使うのが適切か？という問題を継続的に考えつつ、現在、乱流、反応や熱を含めたシミュレーションができるよう本手法を発展させている<sup>9)</sup>。他にも、混相流、粘弾性、粒子、輻射などのカップリングも考えている<sup>10)</sup>。埋め込み境界法をさまざまな物理モデルとカップリングすることは必ずしも自明ではないため、その検討も慎重に行っていきたいと考えている。将来的には、埋め込み境界法を基盤としたマルチ・フィジックスのシミュレーターを開発し、反応器や装置の設計、プロセス条件の最適化などに積極的に活用し、当社の事業を加速させていきたい。

## 引用文献

- 1) C. S. Peskin, J. Comput. Phys., 10(2), 252 (1972).
- 2) T. Kajishima and K. Taira, “Computational Fluid Dynamics: Incompressible Turbulent Flows”, Springer, (2016).
- 3) T. Kajishima *et al.*, JSME Int. J., Ser. B, 44(4), 526 (2001).
- 4) X. Sun and M. Sakai, Chem. Eng. Sci., 134, 531 (2015).
- 5) M. Ueda *et al.*, Ind. Eng. Chem. Res., 60(10), 4168 (2021).
- 6) D. Watanabe and S. Goto, Flow, 2, E28 (2022).
- 7) S. Takeuchi *et al.*, Comput. Therm. Sci.: Int. J., 7(5-6), 385 (2015).
- 8) 池野 勉, 梶島 岳夫, 日本機械学会論文集B編, 70(697), 2239 (2004).
- 9) Y. Yaegashi *et al.*, J. Chem. Eng. Jpn., 58(1), 2480827 (2025).
- 10) 八重樫 優太, “化学工学系流体シミュレーションの最前線 —基礎・実践・将来展望—”, 三恵社(2024), p.159 - 172.

## PROFILE



八重樫 優太 Yuta YAEGASHI

住友化学株式会社  
生産安全基盤センター  
研究員  
博士（農学）



島田 直樹 Naoki SHIMADA

住友化学株式会社  
生産安全基盤センター  
フェロー、数値計算工学統括、  
博士（工学）



村松 宏起 Hiroki MURAMATSU

住友化学株式会社  
生産安全基盤センター  
研究員