

等密度の二相系格子ボルツマン法を用いたトポロジー最適化

TOPOLOGY OPTIMIZATION USING THE LATTICE BOLTZMANN METHOD FOR
TWO-PHASE FLUIDS WITH THE SAME DENSITY矢地 謙太郎¹⁾, 山田 崇恭²⁾, 吉野 正人³⁾, 松本 敏郎⁴⁾, 泉井 一浩⁵⁾, 西脇 眞二⁶⁾

Kentarou YAJI, Takayuki YAMADA, Masato YOSHINO, Toshiro MATSUMOTO, Kazuhiro IZUI and Shinji NISHIWAKI

- | | | | |
|-------------------|-------------|---------------|---|
| 1) 京都大学大学院 工学研究科 | (〒 615-8540 | 京都市西京区京都大学桂, | E-mail: yaji.kentarou.74v@st.kyoto-u.ac.jp) |
| 2) 京都大学大学院 工学研究科 | (〒 615-8540 | 京都市西京区京都大学桂, | E-mail: takayuki@me.kyoto-u.ac.jp) |
| 3) 信州大学学術研究院 工学系 | (〒 380-8553 | 長野市若里 4-17-1, | E-mail: masato@shinshu-u.ac.jp) |
| 4) 名古屋大学大学院 工学研究科 | (〒 464-8603 | 名古屋市千種区不老町, | E-mail: t.matsumoto@nuem.nagoya-u.ac.jp) |
| 5) 京都大学大学院 工学研究科 | (〒 615-8540 | 京都市西京区京都大学桂, | E-mail: izui@me.kyoto-u.ac.jp) |
| 6) 京都大学大学院 工学研究科 | (〒 615-8540 | 京都市西京区京都大学桂, | E-mail: shinji@prec.kyoto-u.ac.jp) |

This paper presents a topology optimization method that deals with two-phase fluids with the same density for the design of a flow channel. The aim of the optimization problem is to maximize the efficiency of the extraction function that is commonly utilized to extract necessary products from mixtures flowing through microchannels. The extraction process typically depends on the use of multiphase fluid phenomena and the components of the mixture have different mass diffusivities. In this study, the lattice Boltzmann method (LBM) is employed to compute the multiphase flow field during the optimization process. Numerical examples of a flow channel design problem are provided to confirm the utility of the proposed method.

Key Words : Topology Optimization, Two-Phase Fluid Flows, Lattice Boltzmann Method, Extraction Efficiency

1. 緒言

トポロジー最適化⁽¹⁾は、構造の形状変更のみならず、構造内部に新たな境界が生成するような形態変更をも許容する最も設計自由度の高い構造最適化手法であり、これまでに構造力学問題を始めとして様々な物理問題へ展開されている。

流体問題への適用は、Borrvall と Petersson⁽²⁾ によってその方法論が初めて提唱されており、これまでに圧力損失最小化を目的とした流路設計⁽³⁾、熱交換効率最大化を目的としたヒートシンク的设计⁽⁴⁾、攪拌効率最大化を目的としたマイクロミキサ的设计⁽⁵⁾等に関する研究が報告されている。これらの研究は、種々の流路デバイスの高性能化に繋がる新たな設計手法として注目を集めており、Koga ら⁽⁶⁾はトポロジー最適化によって得られた流路構造を有する液冷式ヒートシンクの試作器を作成し、その性能を実験的に評価することで、流路デバイスの設計におけるトポロジー最適化の有用性を示している。

他方、流体問題を対象としたトポロジー最適化に関する研究では、これまでに混和性の溶媒を扱った研究は成されて

いるものの、不混和性の溶媒、すなわち溶媒間において界面が存在する混相流を扱った研究は未だ報告されていない。混相流はマイクロ流路を用いた化学分析で広く利用されており、その代表的な化学的分離操作として液液抽出がある。液液抽出は不混和性の二つの溶媒を用いることで、一方の溶媒に含まれる成分をもう一方の溶媒へ選択的に分離する操作であり、二相の界面を介して特定の成分のみが移動する。したがって、このような現象を考慮した上でトポロジー最適化を行うためには、二相の界面を捉えながら流れ場の数値計算を行う必要がある。

混相流の数値計算手法として、格子ボルツマン法 (Lattice Boltzmann Method: LBM)⁽⁷⁾が近年注目されている。LBMは気体分子運動論におけるボルツマン方程式に基づく数値計算手法であり、流体を仮想粒子の集合体と考え、その粒子の速度分布関数から巨視的な物理量である流速や圧力を算出する。一般に、非圧縮性粘性流体の数値計算では、流れ場の質量保存を満足させるよう、圧力に関するポアソン方程式を解く必要があるが、LBMではこのような手続きを必要とせず、速度分布関数に関する時間発展方程式を解くだけで良

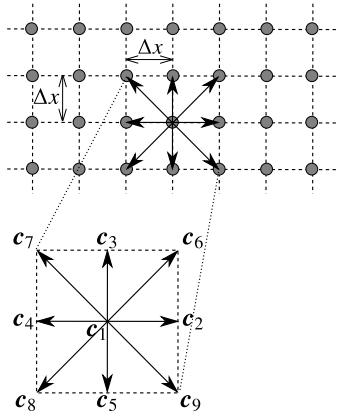


Fig. 1 Discretization using a square lattice with spacing Δx (upper) and particle velocities c_i ($i = 1, 2, \dots, 9$) of the D2Q9 model (lower).

い。そのため、アルゴリズムが単純でありながら、質量および運動量保存性に優れており、これまでに多孔質内流れ⁽⁸⁾のように複雑な境界を持つ流れや、二相流⁽⁹⁾のように界面が複雑に変化する流れの数値計算に適用されている。

著者ら⁽¹⁰⁾は、単一の流体で構成される流れ場の圧力損失最小化問題を対象として、LBMを用いたトポロジー最適化手法を提案している。そこで本研究では、二相流を用いた液液抽出の高効率化を目的として、著者らがこれまでに構築した方法論に基づき、二相流を考慮した新しいトポロジー最適化手法を構築する。

以下2章では、二相流の数値計算のために本研究で用いる等密度の二相系LBM⁽⁹⁾の概要を述べる。3章では、LBMを用いた液液抽出のモデル化方法について説明する。4章では、抽出効率の向上と圧力損失の低減を同時に考慮したトポロジー最適化問題を定式化する。5章では、最適化問題の定式化に基づき、本研究における最適化アルゴリズムを構築する。最後に数値計算例を示し、本研究で提唱する方法論の有用性を検証する。

2. 等密度の二相系 LBM

使用する物理量はすべて、代表長さ L 、粒子の代表速さ c 、時間スケール $t_0 = L/U$ (U : 流れの代表速さ)、秩序変数の基準値 ψ_0 、代表密度 ρ_0 を用いて無次元化されたものとする。本研究では、等密度の液液二相流を対象として、Inamuroら⁽⁹⁾が提唱する等密度の二相系LBMを用いて界面を捉えながら流れ場を計算する。格子気体モデルとして、図1に示す2次元9速度(D2Q9)モデルを用いる。このモデルにおける仮想粒子の速度 c_i ($i = 1, 2, \dots, 9$) は、次式で与えられる。

$$\begin{aligned} & [c_1, c_2, c_3, c_4, c_5, c_6, c_7, c_8, c_9] \\ & = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 \end{bmatrix} \quad (1) \end{aligned}$$

位置 x 、時刻 t において、二相を識別する秩序変数 $\psi(x, t)$ 、

圧力 $p(x, t)$ 、流速 $u(x, t)$ をそれぞれ次式を用いて計算する。

$$\psi = \sum_{i=1}^9 f_{Ai} \quad (2)$$

$$p = \frac{1}{3} \sum_{i=1}^9 f_{Bi} \quad (3)$$

$$u = \sum_{i=1}^9 f_{Bi} c_i \quad (4)$$

ここで、 $f_{Ai}(x, t)$ 、 $f_{Bi}(x, t)$ は、式(2)–(4)の巨視的な物理量を計算するための速度分布関数を表し、次の格子ボルツマン方程式に従う。

$$f_{Ai}(x + c_i \Delta x, t + \Delta t) - f_{Ai}(x, t) = -\frac{1}{\tau_A} \{f_{Ai}(x, t) - f_{Ai}^{\text{eq}}(x, t)\} \quad (5)$$

$$f_{Bi}(x + c_i \Delta x, t + \Delta t) - f_{Bi}(x, t) = -\frac{1}{\tau_B} \{f_{Bi}(x, t) - f_{Bi}^{\text{eq}}(x, t)\} \quad (6)$$

ここで、 Δx は正方形格子の間隔、 Δt は仮想粒子が隣の格子点に移動するまでに要する時間と等しくなるように選ばれた時間刻みを表し、 τ_A および τ_B は無次元の単一緩和時間と呼ばれるものであり、 $O(1)$ のパラメータである。 $f_{Ai}^{\text{eq}}(x, t)$ 、 $f_{Bi}^{\text{eq}}(x, t)$ は局所平衡分布関数を表し、漸近理論⁽¹¹⁾を適用することで、式(2)–(4)が移流項を含むカーン-ヒリアード方程式、非圧縮性流体の連続の式およびナビエ-ストークス方程式を満たすように決定される⁽⁹⁾。D2Q9モデルの場合、 $f_{Ai}^{\text{eq}}(x, t)$ 、 $f_{Bi}^{\text{eq}}(x, t)$ はそれぞれ次式で与えられる。

$$\begin{aligned} f_{Ai}^{\text{eq}} &= H_i \psi + F_i (p_0 - \kappa_f \psi \nabla^2 \psi) + 3E_i \psi c_i \cdot u \\ &+ E_i \kappa_f G : (c_i \otimes c_i) \quad (7) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} f_{Bi}^{\text{eq}} &= E_i \left\{ 3p + 3c_i \cdot u - \frac{3}{2} |u|^2 + \frac{9}{2} (c_i \cdot u)^2 \right\} \\ &+ E_i \kappa_g G : (c_i \otimes c_i) \quad (8) \end{aligned}$$

ここで、記号 \otimes および \otimes はテンソルのスカラー積およびテンソル積を表し、 $G(\psi)$ は次式で定義される二階のテンソルである。

$$G = \frac{9}{2} \nabla \psi \otimes \nabla \psi - \frac{3}{2} |\nabla \psi|^2 \delta \quad (9)$$

ここで、 δ はクロネッカーのデルタとする。なお、式(7)、(8)において、 E_i 、 H_i 、 F_i は、 $E_1 = 4/9$ 、 $E_2 = E_3 = E_4 = E_5 = 1/9$ 、 $E_6 = E_7 = E_8 = E_9 = 1/36$ 、 $H_1 = 1$ 、 $H_2 = H_3 = \dots = H_9 = 0$ 、 $F_1 = -7/3$ 、 $F_i = 3E_i$ ($i = 2, 3, \dots, 9$) である。 κ_f 、 κ_g は界面の厚さ、界面張力をそれぞれ決定するためのパラメータであり、本研究では $\kappa_f = \kappa_g = 1.0 \times 10^{-2} (\Delta x)^2$ に設定する。また、 $p_0(\psi)$ はファン・デル・ワールス状態方程式において、温度を \bar{T} とした場合の圧力に相当し次式で与えられる。

$$p_0 = \psi \bar{T} \frac{1}{1 - b\psi} - a\psi^2 \quad (10)$$

ここで、 a 、 b 、 \bar{T} は、秩序変数 ψ のプロファイルを決定するためのパラメータである。本研究では $a = 1$ 、 $b = 1$ 、 $\bar{T} = 0.293$ に設定する。

また、流れ場に外力 $F(x, t)$ が作用する場合は、式(6)を次のように二段階に分けて計算する。

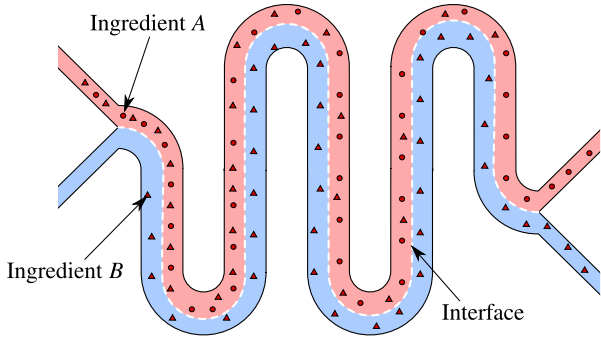


Fig. 2 Schematic diagram of liquid-liquid extraction in a microchannel device.

Step 1. 外力が作用していない状態の f_{Bi}^* を計算する:

$$\begin{aligned} f_{Bi}^*(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta x, t + \Delta t) \\ = f_{Bi}(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{\tau_B} \{f_{Bi}(\mathbf{x}, t) - f_{Bi}^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t)\} \end{aligned} \quad (11)$$

Step 2. f_{Bi} を次式によって修正する:

$$f_{Bi}(\mathbf{x}, t + \Delta t) = f_{Bi}^*(\mathbf{x}, t + \Delta t) + 3\Delta x E_i \mathbf{c}_i \cdot \mathbf{F}(\mathbf{x}, t + \Delta t) \quad (12)$$

3. 液液抽出のモデル化

抽出は液体もしくは固体の原料を溶剤と接触させることで、原料中に含まれる成分を選択的に分離する化学的操作である。液液抽出は不混和性の二つの溶媒を用いる化学的操作であり、図2に示すようなマイクロ流路を用いた化学分析装置として広く利用されている。液液抽出では、用いる二つの溶媒の分子拡散係数の違いを利用することで、図中の成分Aと成分Bが混在する溶媒から成分Bのみを抽出する。Žnidaršič-Plazl と Plazl⁽¹²⁾ は、数値計算および試作器を用いた実験によって、数学的モデルとしてこの現象をパッシブスカラー場の移流拡散方程式に帰着する方法を提案している。

そこで本研究では、前述の二相系 LBM と、移流拡散方程式を用いた液液抽出の数学的モデルを組み合わせることにより、効率的に抽出操作を可能とする流路構造の創成を目的としたトポロジー最適化手法を構築する。ここで、移流拡散方程式は差分法等の数値計算手法によって解くことができるが、前述の二相流の数値計算と同様に、LBM を用いて単純なアルゴリズムによって解くことができる。すなわち、格子気体モデルとして図1の D2Q9 モデルを用いれば、スカラー場 $T(\mathbf{x}, t)$ は次式で与えられる。

$$T = \sum_{i=1}^9 f_{Ci} \quad (13)$$

$f_{Ci}(\mathbf{x}, t)$ は $T(\mathbf{x}, t)$ に対する速度分布関数であり、次の格子ボルツマン方程式に従う。

$$f_{Ci}(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta x, t + \Delta t) - f_{Ci}(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\tau_C} \{f_{Ci}(\mathbf{x}, t) - f_{Ci}^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t)\} \quad (14)$$

ここで、局所平衡分布関数 $f_{Ci}^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t)$ は、スカラー量 $T(\mathbf{x}, t)$ に関する移流拡散方程式の移流速度が $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ とすると、次式で与えられる⁽¹³⁾。

$$f_{Ci}^{\text{eq}} = E_i T (1 + 3\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u}) \quad (15)$$

また、分子拡散係数 κ は次式で与えられる。

$$\kappa = \frac{1}{3} \left(\tau_C - \frac{1}{2} \right) \Delta x \quad (16)$$

液液抽出は二相の異なる分子拡散係数を利用することで、溶媒中の特定の成分のみを抽出することから、本研究では、秩序変数 ψ を用いて緩和時間 τ_C を次式で定義する。

$$\tau_C(\psi) = \frac{\bar{\psi}^Y - \psi}{\bar{\psi}^Y - \bar{\psi}^X} \tau_C^X + \frac{\psi - \bar{\psi}^X}{\bar{\psi}^Y - \bar{\psi}^X} \tau_C^Y \quad (17)$$

ここで、 τ_C^X 、 τ_C^Y は各溶媒における緩和時間を表し、 $\bar{\psi}^X$ 、 $\bar{\psi}^Y$ は各溶媒における秩序変数の代表値である。

本研究では式(5)、(6)、(14)を同時に解くことで、液液抽出の高効率化を目的としたトポロジー最適化手法を構築する。

4. 最適化問題の定式化

流れ場を対象としたトポロジー最適化では、通常、固定された設計領域 D (以下、固定設計領域) を多孔質体と考え、その空孔率を設計変数とすることで流体領域 $\Omega \subset D$ と固体領域 $D \setminus \Omega$ を識別し最適化を行う。本研究では、次の集合で定義される設計変数 γ を用いて最適化問題を定式化する。

$$\mathcal{X}_{\text{ad}} = \{ \gamma \in L^\infty(D) \mid 0 \leq \gamma \leq 1, \text{ a.e. in } D, \text{ s.t. } V \leq 0 \} \quad (18)$$

ここで、許容する流体領域の体積の最大値を \bar{V} とし、 $V := \int_D \gamma d\Omega - \bar{V}$ とする。

$\gamma = 1$ を流体領域、 $\gamma = 0$ を固体領域とすると、式(12)に次の仮想的な外力項 $\mathbf{F}(\mathbf{x}, t)$ を導入することで、固定設計領域における固体領域を表現する⁽²⁾。

$$\mathbf{F} = -\alpha_\gamma \mathbf{u} \quad (19)$$

α_γ は逆透過抵抗係数と呼ばれ、次式で与えられる。

$$\alpha_\gamma = \bar{\alpha} + (\underline{\alpha} - \bar{\alpha}) \gamma \frac{1+q}{\gamma+q} \quad (20)$$

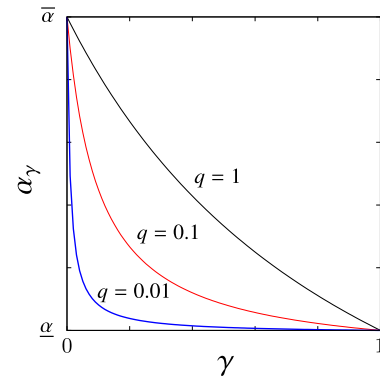


Fig. 3 The interpolation function α_γ plotted for $q = 0.01$, 0.1 , and 1 .

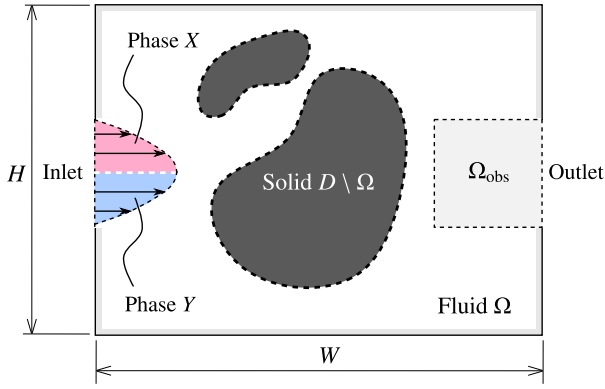


Fig. 4 The design domain is composed of a fluid domain Ω and solid domain $D \setminus \Omega$. The objective functional J is evaluated in the observation domain Ω_{obs} . The two-phase fluid flows are composed of phase X and phase Y that are prescribed on the inlet boundary.

ここで、 q は図 3 に示すように α_γ のプロファイルを決するためのパラメータであり、本研究では $q = 0.1$ に設定する (2, 3)。また、 $\underline{\alpha}$ 、および $\bar{\alpha}$ は流体領域および固体領域におけるそれぞれの逆透過抵抗係数を表し、 $0 \leq \underline{\alpha} \ll 1$ 、および $\underline{\alpha} < \bar{\alpha}$ とすることで、固体領域において仮想的な外力項が作用する。これにより、 $u \approx 0$ の領域を固体領域として表現することができる。本研究では $\underline{\alpha} = 0$ 、 $\bar{\alpha} = 10$ に設定する。

続いて、液液抽出の効率化を目的とした流路構造のトポロジー最適化問題を定式化する。液液抽出を行う流路の設計要件として、1) 流出口において十分に抽出が完了していること、2) 可能な限り圧力損失が小さいことが挙げられる。十分に長い流路を用いることで前者の要件は達成されるが、その場合は圧力損失が大きくなる問題がある。特にマイクロ流路の場合は圧力損失が大きいと、局所的に大きな圧力が作用することで機器の破損に繋がる恐れがあることから、後者の要件を考慮することは重要である。

そこで本研究では、図 4 に示す設計領域について、両要件を同時に考慮した流路構造を創成することを目的として、次の目的汎関数 J および制約汎関数 P に関する最適化問題について考える。

$$\inf_{\gamma \in \mathcal{X}_{\text{ad}}} J = \int_{\Omega_{\text{obs}}} \frac{(T - \langle T \rangle_{\text{in}})^2}{2\langle T \rangle_{\text{in}}^2} d\Omega \quad (21)$$

$$\text{subject to } P = \int_{\Gamma} -pn \cdot \mathbf{u} d\Gamma - \eta \Delta \bar{p} \leq 0 \quad (22)$$

ここで、 $\langle T \rangle_{\text{in}}$ は流入口におけるスカラー量 T の平均値であり、目的汎関数 J は、観測領域 Ω_{obs} においてスカラー場が十分に拡散し、抽出が完了した状態になることを目的としている。また、 Γ は固定設計領域 D の境界を表し、 \mathbf{n} は境界 Γ 上の外向き単位法線ベクトルである。 P の第一項は圧力損失を表しており、第二項の $\Delta \bar{p}$ は最適化の初期ステップにおける圧力損失、 η は各最適化ステップにおける圧力損失と初期の圧力損失の比 (以下、圧力損失効率) を表す。すなわち、

この最適化問題は、初期の最適化ステップにおける圧力損失 $\Delta \bar{p}$ を基準として、その η 倍までの圧力損失を許容しつつ、観測領域 Ω_{obs} において抽出が最大限完了する流路構造の創成を目的としている。また、一次の最適性条件である KKT (Karush-Kuhn-Tucker) 条件は次式で与えられる。

$$\begin{aligned} L' = 0 \quad \mu P = 0 \quad \mu \geq 0 \quad \lambda V = 0 \quad \lambda \geq 0 \\ l_0 \gamma = 0 \quad l_0 \geq 0 \quad l_1(\gamma - 1) = 0 \quad l_1 \geq 0 \end{aligned} \quad (23)$$

ここで、 μ 、 λ 、 $l_0(x)$ 、 $l_1(x)$ は各不等式制約条件に対するラグランジュ未定乗数であり、 $L'(x)$ はラグランジアン $L = J + \mu P + \lambda V + l_0 \gamma + l_1(\gamma - 1)$ の設計変数 γ に対する次式のガトー微分である。

$$\langle L', \delta \gamma \rangle = \left. \frac{d}{d\varrho} L(\gamma + \varrho \delta \gamma) \right|_{\varrho=0} \quad (24)$$

5. 数値実装法

本研究における最適化アルゴリズムを示す。

Step 1. 適当な初期構造を与えるために、設計変数 γ の初期値を設定する。

Step 2. LBM により ψ 、 p 、 \mathbf{u} 、 T を求める。

Step 3. KKT 条件を満足していれば計算を終了する。そうでない場合は設計感度を算出する。

Step 4. MMA (Method of Moving Asymptotes)⁽¹⁴⁾ を用いて設計変数を更新し、*Step 2* に戻る。

MMA は、最適化問題を凸問題に置き換え、最適化問題を双対問題に帰着して解く数値計画法の一手法である。この手法は、多数の設計変数と少数の制約条件の下での非線形最適化問題を解くことに適していることから、これまでに多くのトポロジー最適化問題に適用されている。

また、本研究では、設計感度の算出に随伴 LBM⁽¹⁵⁾ を用いる。この方法の基本的な考え方は、連続系のボルツマン輸送方程式によって最適化問題を定式化することで、随伴場の計算を LBM に基づき陽的な時間発展方程式に帰着させることにある。これにより、行列計算を行うことなく、随伴場を状態場と同様の単純なアルゴリズムで解くことができる。詳細は文献^(10, 15)を参照されたい。

6. 数値計算例

Table 1 Setting parameters for the LBM

Parameters	Values
U_{in}	5.3×10^{-2}
p_{out}	0.33
Re	10
$(\psi_{\text{in}}^X, \psi_{\text{in}}^Y)$	(0.40, 0.26)
$(T_{\text{in}}^X, T_{\text{in}}^Y)$	$(1.0 \times 10^{-2}, 1.0)$
(κ^X, κ^Y)	$(1.0 \times 10^{-3} \Delta x, 1.8 \times 10^{-2} \Delta x)$

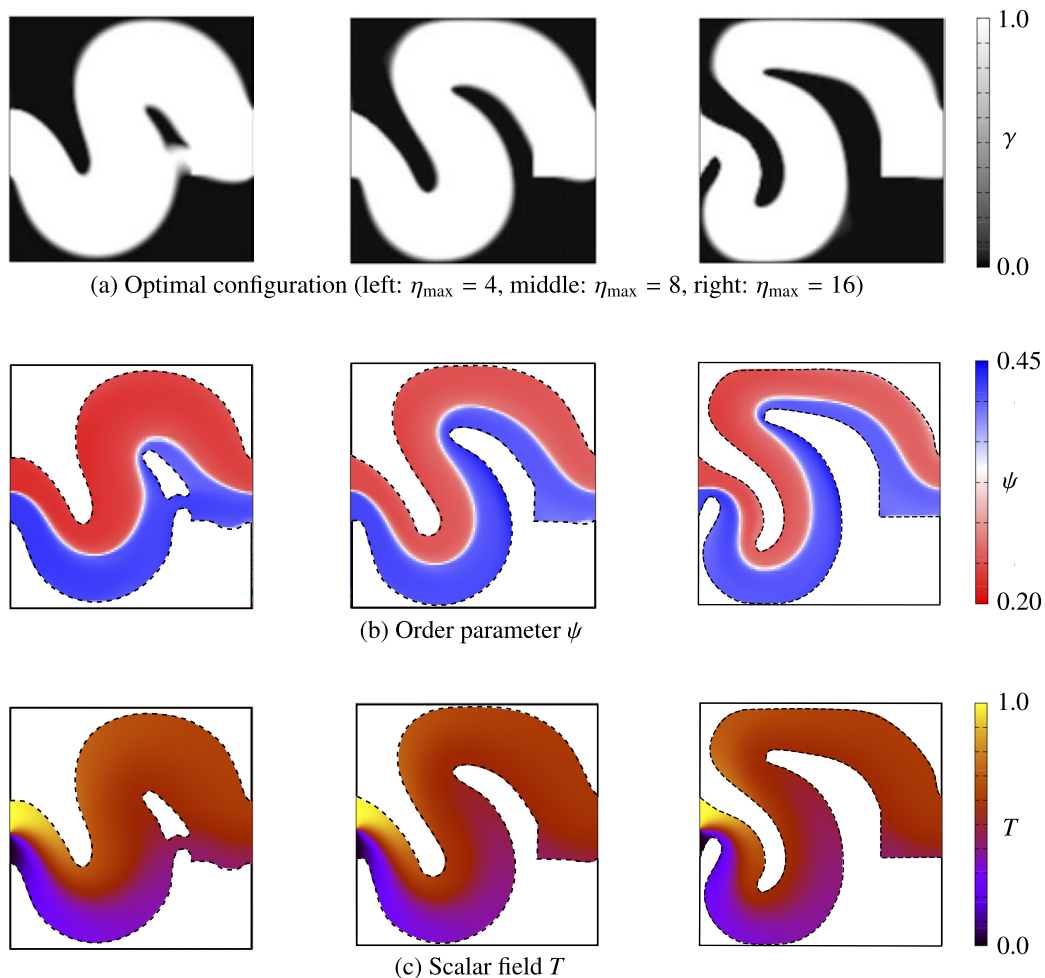


Fig. 5 Optimal configurations showing distributions of order parameter ψ and scalar field T for different settings of pressure drop coefficient η : $\eta = 4$ (left figures); $\eta = 8$ (middle figures); $\eta = 16$ (right figures).

数値計算例により、本研究で提案する手法の妥当性を検証した。本研究では、図4に示す固定設計領域 D について、 $W \times H = 120\Delta x \times 120\Delta x$ の正方形格子で離散化した。設計変数の初期値を $\gamma = 1$ に設定し、初期構造はすべて流体で満たされている状態として最適化を図った。流体領域の最大許容体積に関するパラメータは $\bar{V} = 0.6 \times W \times H$ に設定した。これは固定設計領域の60%までを流体領域として許容することを意味する。なお、観測領域 Ω_{obs} は非設計領域として、 $\gamma = 1$ の流体領域とした。

LBMの計算に用いた各パラメータを表1に示す。ここで、 U_{in} は流入口における規定速さ、 p_{out} は流出口における規定圧力、 Re は代表速さを U_{in} 、代表長さを流入口の幅 $30\Delta x$ としたレイノルズ数、 $\psi_{\text{in}}^X, \psi_{\text{in}}^Y$ は各液相における流入口の秩序変数、 $T_{\text{in}}^X, T_{\text{in}}^Y$ は各液相における流入口のスカラー値、 κ^X, κ^Y は各液相の分子拡散係数である。流入口における各液相の流量は等しくなるように設定した。

本研究で得られた結果を図5に示す。ここでは、圧力損失効率が $\eta = 4, 8, 16$ の場合について最適化を行った。図からわかるように、得られた最適構造はいずれも波状の流路となった。これは、流入した流体が遠回りをしながら流出口へ向か

うことで、スカラー場が拡散に要する時間を可能な限り確保するためと考えられる。また、図5(b)に示すように、流路内部で自律的に形成される二相の界面は秩序変数 ψ によってシャープに捉えられていることがわかる。

各最適構造における目的汎関数値を表2に示す。ここで、各値は最適化の初期ステップにおける目的汎関数値によって正規化している。表からわかるように、 η が大きいほど、より大きな圧力損失を許容することになることから、より湾曲した細く長い流路が最適構造となることで目的汎関数値は小さくなりやすい。また、 η が小さいほど、圧力損失がなるべく生じない流路として、最適構造は太く短い流路になることがわかる。この場合、直線的な流路が最適構造として優位になり易いことから、 $\eta = 4$ の結果において、分岐状の流路が得られたと考えられる。ただし、 η が大きい場合と比較し

Table 2 Values of objective functional

η	4	8	16
Objective	0.30	0.17	0.14

て、 T が観測領域 Ω_{obs} において十分に均一化されないため、目的汎関数値は比較的大きな値となる。以上の結果から、抽出効率と圧力損失は相反関係にあり、本提案手法によって両者を考慮しながら最適構造を創成できることがわかった。

7. 結言

本研究では、二相流を利用した液液抽出の高効率化を目的として、等密度の二相系 LBM に基づく新しいトポロジー最適化手法を構築した。本研究により得られた結果を以下に示す。

- (1) 抽出効率の向上と圧力損失の低減を目的として、目的汎関数および制約汎関数を設定した。さらに、それらを用いて二相流とスカラー輸送を同時に考慮したトポロジー最適化問題を定式化した。
- (2) 定式化した最適化問題に基づき、二相流、スカラー場、および随伴場の計算に LBM を用いたトポロジー最適化アルゴリズムを開発した。
- (3) 数値計算例により、本研究で提唱する方法の有効性を検証した。その結果、流出口において液液抽出が十分に完了するように、波状の流路が最適構造として得られることがわかった。また、圧力損失効率をパラメータとすることで、圧力損失と抽出効率の相反関係を考慮しながら、最適構造を創成できることがわかった。

8. 謝辞

本研究は、第一著者が(独)日本学術振興会特別研究員 DC であった期間に行われ、特別研究員奨励費及び JSPS 科研費 26820032 の支援を受けました。ここに記して謝意を表します。

参考文献

- (1) M.P. Bendsøe, N. Kikuchi: Generating Optimal Topologies in Structural Design Using a Homogenization Method, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **71**(1988), pp. 197–224.
- (2) T. Borrvall, J. Petersson: Topology Optimization of Fluids in Stokes Flow, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, **41**(2003), pp. 77–107.
- (3) A.G. Hansen, O. Sigmund, R.B. Haber: Topology Optimization of Channel Flow Problem, *Structural and Multidisciplinary Optimization*, **30**(2005), pp. 181–192.
- (4) K. Yaji, T. Yamada, S. Kubo, K. Izui, S. Nishiwaki: A Topology Optimization Method for a Coupled Thermal-Fluid Problem Using Level Set Boundary Expressions, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, **81**(2015), pp. 878–888.
- (5) C.S. Andreasen, A.R. Gersborg, O. Sigmund: Topology Optimization of Microfluidic Mixers, *Structural and Multidisciplinary Optimization*, **61**(2009), pp. 498–513.
- (6) A.A. Koga, E.C.C. Lopes, H.F. Villa Nova, C.R.d Lima, E.C.N. Silva: Development of Heat Sink Device by Using Topology Optimization, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, **64**(2013), pp. 759–772.
- (7) S. Succi: *The Lattice Boltzmann Method for Fluid Dynamics and Beyond* (2001), Oxford University Press.
- (8) M.A.A. Spaid, F.R. Phelan: Lattice Boltzmann Methods for Modeling Microscale Flow in Fibrous Porous Media, *Physics of Fluids*, **9**(1997), pp. 2468–2474.
- (9) T. Inamuro, R. Tomita, F. Ogino: Lattice Boltzmann Simulations of Drop Deformation and Breakup in Shear Flows, *International Journal of Modern Physics B*, **17**(2003), pp. 21–26.
- (10) K. Yaji, T. Yamada, M. Yoshino, T. Matsumoto, K. Izui, S. Nishiwaki: Topology Optimization Using the Lattice Boltzmann Method Incorporating Level Set Boundary Expressions, *Journal of Computational Physics*, **274**(2014), pp. 158–181.
- (11) T. Inamuro, M. Yoshino, F. Ogino: Accuracy of the Lattice Boltzmann Method for Small Knudsen Number with Finite Reynolds Number, *Physics of Fluids*, **9**(1997), pp. 3535–3542.
- (12) P. Žnidaršič-Plazl, I. Plazl: Steroid Extraction in a Microchannel System—Mathematical Modelling and Experiments, *Lab on a Chip*, **7**(2007), pp. 883–889.
- (13) T. Inamuro, M. Yoshino, H. Inoue, R. Mizuno, F. Ogino: A Lattice Boltzmann Method for a Binary Miscible Fluid Mixture and Its Application to a Heat-Transfer Problem, *Journal of Computational Physics*, **179**(2002), pp. 201–215.
- (14) K. Svanberg: The Method of Moving Asymptotes—a New Method for Structural Optimization, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **24**(1987), pp. 359–373.
- (15) M.J. Krause, G. Thäter, V. Heuveline: Adjoint-Based Fluid Flow Control and Optimisation with Lattice Boltzmann Methods, *Computers & Mathematics with Applications*, **65**(2013), pp. 945–960.